

GEN 20102416 50376 1994

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE LILLE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ

en

MÉCANIQUE

par

Ali EL BAKKALI

ÉTUDE NUMÉRIQUE D'ÉCOULEMENTS TURBULENTS NON RÉACTIFS DANS UNE MACHINE À COMPRESSION RAPIDE ET CONFRONTATION EXPÉRIMENTALE

Soutenue le 3 Mai 1994 devant la commission d'examen

MM. R. BORGHI A. DYMENT F. FISSON P. MICHEAU H. NAJI L.R. SOCHET Université de Rouen Université de Lille I ENSMA Poitiers Université de Lille I EUDIL-Lille I Université de Lille I Rapporteur Examinateur Examinateur Examinateur Examinateur

À mes parents À ma famille

À Salim et Magda pour la confiance et l'attention qu'ils m'ont toujours témoigné.

AVANT PROPOS

Le travail présenté dans ce mémoire est le fruit d'une collaboration étroite entre le Laboratoire de Mécanique de Lille (LML, URA CNRS 1441) et le Laboratoire de Cinétique et Chimie de la Combustion de Lille (LC3, URA CNRS 876). Plusieurs personnes y ont été impliquées d'une manière plus ou moins directe et ont contribué, en conséquence, à son aboutissement.

En premier lieu, je tiens à exprimer ma grande reconnaissance à Monsieur A. DYMENT, Professeur à l'Université de Lille I, qui m'a acceuilli dans son équipe au sein du LML et qui n'a jamais cessé de m'apporter le soutien et les encouragements nécessaires pour mener à bien ce travail.

Monsieur L.R. SOCHET, Directeur de Recherches au CNRS et Directeur du LC3, a toujours montré un intérêt particulier à ce travail en le suivant de très prêt. Ses suggestions, ses conseils et ses encouragements m'ont toujours permis d'avancer dans la bonne direction. Qu'il me soit permis ici de lui témoigner ma profonde gratitude pour le temps qu'il m'a consacré et le soutien et l'aide qu'il a toujours su m'apporter.

Je suis très reconnaissant également à Monsieur H. NAJI, Maître de Conférences à l'EUDIL-Lille I, pour avoir mis à ma disposition le code de calcul KIVA II ainsi que pour son soutien et ses encouragements permanents.

Monsieur P. MICHEAU, Professeur à l'Université de Lille I et Directeur du LML, m'a fait bénéficier, à plusieurs reprises, de sa grande expérience et sa compétence dans le domaine de la mécanique des fluides numérique. C'est un grand honneur pour moi qu'il ait accépté de présider le jury.

Je suis également très honré que Monsieur R. BORGHI, Professeur à l'Université de Rouen, et Monsieur F. FISSON, Maître de Conférences à l'ENSMA de Poitiers, aient accépté d'examiner ce travail et de participer au jury.

Je voudrais associer à ces remerciements mes collègues du LC3 (M. CARLIER, P. DESGROUX, R. MINETTI et M. RIBAUCOUR) avec qui j'ai eu à maintes reprises des discussions nombreuses et fructueuses et auprès de qui j'ai toujours trouvé soutien et encouragements.

Je remercie également l'ensemble de mes collègues de l'équipe modélisation du LML pour leurs encouragements et leur sympathie. En particulier, je voudrais rendre un témoignage d'amitié à mon collègue et ami Monsieur I. MORTAZAVI pour son soutien permanent surtout durant la phase de rédaction de ce mémoire.

Je ne saurais oublier de remercier Monsieur TINEL (Ingénieur au CITI-LILLE) et Monsieur TEULER (Ingénieur au CIRCE-Paris Orsay) pour le soutien informatique qu'ils m'ont apporté.

Enfin, c'est avec un grand plaisir que je remercie l'ensemble du personnel du LML et tout particulièrement Madame DEKEYSER et Madmoiselle ROUSSEL pour leur gentillesse et disponibilité. Qu'ils soient tous assurés de ma profonde sympathie. Comment se fait-il que la mathématique, qui est un produit de la pensée humaine et indépendante de toute expérience, s'adapte d'une si admirable manière aux objets de la réalité ?

A. EINSTEIN

TABLE DES MATIÈRES

NOMENCLATURE	7
INTRODUCTION GÉNÉRALE	11

CHAPITRE I

LES MACHINES À COMPRESSION RAPIDE DANS L'ÉTUDE DES PROCESSUS D'AUTOINFLAMMATION À L'ORIGINE DU CLIQUETIS

I.1 INTRODUCTION	15
I.2 LE CLIQUETIS ET SES ORIGINES	16
I.2.1 Historique et généralités	16
I.2.2 Différentes théories du cliquetis	17
I.2.2.1 Théorie de détonation	17
I.2.2.2 Théorie de l'accélération du front de flamme	17
I.2.2.3 Théorie d'autoinflammation dans les gaz frais	17
I.2.3 Mécanismes chimiques associés à l'autoinflammation	18
I.2.3.1 Mécanismes semi-globaux	18
I.2.3.2 Mécanismes détaillés	18
I.3 DESCRIPTION DE LA MCR DE LILLE	19
I.3.1 Introduction	19
I.3.2 Conception de la machine	19
I.3.3 Le cylindre de compression et la chambre de combustion	21
I.3.4 Les mesures effectuées	
I.3.4.1 Mesure de la pression	24
I.3.4.2 Mesure de l'émission lumineuse	24

I.3.4.3 Mesure du déplacement du piston	24
I.3.4.4 Température du thermocouple	25
I.3.4.5 L'échantillonnage et le dosage des produits	25
I.4 PRESENTATION DE QUELQUES RESULTATS ET INTERPRETATION	25
I.4.1 L'estimation de la température	25
I.4.1.1 Calcul de la température adiabatique T _a au PMH	26
I.4.1.2 Calcul de la température de coeur T _c au PMH	26
I.4.1.3 Calcul de la température moyenne T _m au PMH	27
I.4.1.4 Température déduite des mesures par thermocouple	27
I.4.2 L'autoinflammation	28
I.4.2.1 Mélange non réactif	28
I.4.2.2 Mélange réactif	28
I.4.3 Evolution des délais avec la température	30
I.4.3.1 Le coefficient négatif de température	30
I.4.3.2 Le modèle utilisé	31
I.4.3.3 Comparaison modèle / expérience	31
I.5 VERS UNE DESCRIPTION EN 2D DES PHENOMENES	31
I.5.1 Discussion critique du modèle 0D	31
I.5.2 Description en 2D du système non réactif et choix des conditions d'étude	32
CONCLUSION PARTIELLE	
Références bibliographiques	39

CHAPITRE II

POSITION MATHÉMATIQUE DU PROBLÈME ET MÉTHODES DE RÉSOLUTION NUMÉRIQUE

II.1 INTRODUCTION	43
II.2 FORMULATION MATHEMATIQUE DU PROBLEME	43
II.2.1 Equations de bilans instantanés	43
II.2.1.1 Equation de continuité	44
II.2.1.2 Equation de quantité de mouvement	44
II.2.1.3 Equation d'énergie	44
II.2.1.4 Equation d'état	45
II.2.2 Equations de bilans moyennés	45
II.2.2.1 L'approche statistique	45
II.2.2.2 Equations moyennées	47

II.2.3 Modèles de fermeture4	49
II.2.3.1 Viscosité tourbillonnaire4	49
II.2.3.2 Modèles de turbulence	51
II.2.4 Conditions initiales et aux limites du problème5	53
II.2.4.1 Conditions initiales	53
II.2.4.2 Conditions aux limites	53
II.3 METHODES NUMERIQUES DE RESOLUTION	54
II.3.1 Formulation mixte Eulerienne-Lagrangienne5	54
II.3.2 Discrétisation temporelle	55
II.3.3 Discrétisation spatiale	55
II.3.4 Présentation du code de calcul Kiva II5	55
II.3.4.1 Introduction	55
II.3.4.2 Maillage, stockage des éléments et choix de volumes de contrôle5	56
II.3.4.3 Procédures de résolution adoptées par KIVA II5	;9
II.3.4.3.1 Procédure de résolution pour les équations de la phase B5	59
II.3.4.3.2 Quelques mots sur la procédure PGS6	50
II.3.4.3.3 Résolution des équations de la phase C6	52
II.3.4.4 Conditions de précision et de stabilité6	55
Conclusion partielle	57
RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES6	58

CHAPITRE III

ÉTUDE NUMÉRIQUE D'ÉCOULEMENTS NON RÉACTIFS DANS LA CHAMBRE DE COMBUSTION DE LA MCR

III.1 INTRODUCTION	71
III.2 LE MOUVEMENT DU PISTON	72
III.2.1 Introduction dans le code	73
III.2.2 Résultats et discussion	73
III.3 DIFFERENTS TESTS DE VALIDATION	75
III.3.1 Conditions de calcul	75
III.3.1.1 Conditions initiales	76
III.3.1.2 Conditions aux limites	
III.3.2 Influence du paramètre pgs sur le calcul	77
III.3.3 Essai en laminaire	82

III.3.3.1 Conditions de calcul	82
III.3.3.2 Résultats et discussion	82
III.3.4 Essai des modèles de turbulence	84
III.3.4.1 Le modèle sgs	84
III.3.4.2 Le modèle k-ε standard	84
III.3.4.3 Remarque au sujet du modèle sgs	85
III.3.4.4 Résultats et discussion	85
III.3.4.4.1 Champ de vitesse	85
III.3.4.4.2 Température et pression	90
III.3.4.4.3 Caractéristiques de la turbulence	93
III.3.4.4.4 Confrontation des modèles sgs et k-ɛ standard	93
III.4 Amelioration du maillage dans kiva II	102
III.4.1 Amélioration du maillage	102
III.4.1.1 Définition du maillage	102
III.4.2 Influence du maillage sur le calcul	104
III.4.2.1 Résultats et discussion	104
III.4.2.1.1 Champ de vitesse	104
III.4.2.1.2 Température	104
Conclusion partielle	107
Références bibliographiques	108

CHAPITRE IV

CONFRONTATION ENTRE SIMULATION NUMÉRIQUE ET EXPÉRIENCE. CARACTÉRISATION DU CHAMP DE TEMPÉRATURE

IV.1	INTRODUCTION	109
IV.2	ETUDE EN SYSTEME ADIABATIQUE	110
IV.3	CONFRONTATION CALCUL ET EXPERIENCE	113
IV.3	.1 Evolution de la pression	113
IV.3	.2 Evolution de la température	116
IV.3	.3 Influence du maillage sur le calcul de P et T	117
IV.3	.4 Estimation de P et T dans le cas d'une vitesse moyenne de compression	119
IV.3	.5 Discussion	119
IV.4	CARACTÉRISTIQUES DU CHAMP DE TEMPÉRATURE	121
IV.4	.1 Comparaison de la température au centre de la chambre de combustion av	ec
	les températures maximales et moyennes	122

Références bibliographioues	134
CONCLUSION PARTIELLE.	133
IV.4.4 Evolution temporelle de la température en post-compresion dans le plan central	128
IV.4.3 Evolution temporelle de la température en post-compresion dans le plan central	125
IV.4.2 Evolution de la température dans les différents plans z en fin de compression	.124

CHAPITRE V

MODÉLISATION DE LA TURBULENCE DANS LA CHAMBRE DE COMBUSTION DE LA MCR

V.1 INTRODUCTION	
V.2 LES DIFFERENTES APPROCHES UTILISEES	135
V.2.1 L'approche théorique	136
V.2.2 L'approche expérimentale	136
V.2.3 L'approche numérique	137
V.3 MODELISATION DE LA TURBULENCE DANS LE CAS DES CONFIGURATIONS	
DE TYPE MOTEUR A PISTON	138
V.4 MODELES ADOPTES	139
V.4.1 Modèle de Morel et Mansour	139
V.4.1.1 Equations du modèle de départ	139
V.4.1.2 Cas d'une compression rapide / approche de Reynolds	139
V.4.1.3 Cas d'une compression axiale	141
V.4.2 Modèle de Coleman et Mansour	143
V.4.2.1 Modélisation de la compression rapide	144
V.5 ETUDE PARAMETRIQUE ET COMPARATIVE DES DIFFERENTS MODELES	146
V.5.1 Modèles testés	146
V.5.2 Influence de l'énergie cinétique turbulence initiale	147
V.5.3 Influence du temps de compression	153
V.5.4 Influence du type de compression	154
CONCLUSION PARTIELLE	155
Références bibliographiques	156

ANNEXE II.1 :	FORMULATION EULERIENNE LAGRANGIENNE	161
ANNEXE II.2 :	DÉTERMINATION DU PARAMÈTRE PGS DANS KIVA II	164
ANNEXE II.3 :	SCHÉMA DE CONVECTION "Q.S.O.U"	166
ANNEXE III :	LA MÉTHODE D'INTERPOLATION "CUBIC SPLINES"	173
ANNEXE IV :	DÉTERMINATION DES FONCTIONS DE PAROI	176
LISTE DES FIGU	RES ET TABLEAUX	186

NOMENCLATURE

c	:	célérité du son
C _c	:	capacité calorifique du thermocouple
Cd	:	constante
Ср	:	capacité calorifique à pression constante
Cv	:	capacité calorifique à volume constant
Cw	:	capacité calorifique massique du thermocouple
$C_{\mu}, C_{\epsilon i}, C_{\epsilon 1}', C_{\epsilon 1}''$:	constantes du modèle k-ε
D	:	diamètre de la chambre de combustion
D _c	:	diamètre du couple
e	:	énergie interne par unité de masse
E	:	énergie totale
h	:	enthalpie massique
h _t	:	enthalpie totale
Н	:	hauteur de la chambre de combustion (alésage)
Jp	:	flux de chaleur à la paroi
k	:	énergie cinétique turbulente
1	:	échelle de longueur de turbulence
l _c	:	course du piston
lm	:	longueur de mélange de Prandtl
l _{sgs}	:	échelle de longueur de turbulence dans le modèle sgs
M _c	:	constante de temps du thermocouple
Nu	:	nombre de Nusselt (cf. realtion I.7)
p ou P	:	pression
P _C	:	pression dans le canon à air
P _k	:	terme de production défini par la relation II.30 (chap. II)
Pr	:	nombre de Prandtl
P _{rl}	:	nombre de Prandtl laminaire
P ₁	:	pression mesurée expérimentalement

r	:	composante spatiale en coordonnées cylindriques
R	:	constante des gaz parfaits ou rayon du piston compresseur
R _c	:	nombre de Reynolds critique
Re	:	nombre de Reynolds
t	:	temps
Т	:	température
t _c	:	temps de compression
T _{cp}	:	taux de compression défini par $T_{cp} = \frac{V_{PMB}}{V_{PMH}}$
T _{m,h}	:	température moyenne homogène
ug	:	vitesse du gaz à proximité du thermocouple
u _i (u,v,w)	:	composantes de la vitesse d'une particule fuide
u*	:	vitesse de cisaillement à la paroi
v _{op}	:	constante (cf. relation II.2)
v	:	volume
Vp	:	vitesse moyenne du piston
$x_i(x,y,z)$:	composantes spatiales
Х	:	Point de l'éspace

Lettres grecs

α	:	paramètre pgs ou face d'une cellule du maillage
γ	:	rapport de chaleurs spécifiques
δ _{ij}	:	symbole de Kronicker
3	:	taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente
κ	:	constante de Von Karman
λ	:	coefficient de conductivité thermique
λΙ	:	coefficient de conductivité thermique laminaire
μ	:	viscosité dynamique
μι	:	viscosité dynmique laminaire
μ _t	:	viscosité turbulente
ν	:	viscosité cinématique
vl	:	viscosité cinématique laminaire
vt	:	viscosité tourbillonnaire définie par μ_t / ρ
ρ	:	masse volumique
τ _{ij}	:	tenseur de contraintes visqueuses
τ _p	:	contrainte de cisaillement à la paroi
Φ	:	richesse d'un mélange gazeux
ωί	:	ième composante du tourbillon
ξ	:	perte de chaleur sans dimension (définie en annexe IV)

Δt	:	pas de temps principal du calcul
Δt_{C}	:	pas de temps de la convection
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$:	pas spatial suivant les directions x, y et z

Exposants

()'	:	fluctuation
() ⁿ	:	relatif au cycle de calcul
() ^B	:	relatif à la phase lagrangienne
() ^C	:	relatif à la phase du calcul convectif
() ^{ns}	:	relatif à un sous-cycle de calcul convectif

Indices

0	:	relatif à l'état initial
a	:	adiabatique
c	•	relatif au coeur adiabatique, à la compression ou à la convection
g	:	relatif au gaz à proximité du thermocouple
i,j	:	composantes spatiales
ijk	:	symbolise une cellule du maillage
k	:	composante spatiale où énergie cinétique turbulente
m	:	moyenne
р	:	relatif à la paroi
PMH (ou PMB)	:	relatif au point mort haut (ou point mort bas)
w	:	relatif au thermocouple
α	:	relatif au paramètre pgs ou à une face d'un volume de contrôle
3	:	relatif au taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente k

Notations

	:	moyenne au sens de Reynolds ou relatif à l'étude asymptotique de la couche limite
<>	:	moyenne au sens de Favre
×	:	proportionnel à
^	:	relatif à la pression dans la procédure pgs
11	:	valeur absolue
\sum_{i}	:	sommation ou surface d'un volume de contrôle
\overrightarrow{div}	:	opérateur divergence
grad	:	opérateur gradient
δ	:	signifie incrément lorsqu'il est appliqué à une grandeur

Abréviations

ALE	:	méthode "Eulerienne-Lagrangienne Arbitraire"
Ar	:	argon
CFL	:	condition de "Courant Freidreich Lewy"
FF	:	flamme froide
FN	:	flamme normale
ICE	:	méthode "Implicit Continuous Eulerian"
KI	:	facteur d'intensité du cliquetis
MCR	:	machine à compression rapide
ms	:	millesecondes
NASA	:	National Aeronautics and Space Administration
NS	:	nombre total de sous-cycles convectifs
N ₂	:	azote pur
n-C ₄ H ₁₀	:	n-butane
n-C ₅ H ₁₂	:	n-pentane
0 ₂	:	oxygène
pgs ou PGS	:	méthode "Pressure Gradient Scaling"
PMB / PMH	:	point mort haut / point mort bas
sgs ou SGS	:	modèle de turbulence "Subgrid Scale"
SND	:	simulation numérique directe
TDR	:	théorie de la distortion rapide
Torr	:	unité de pression (750 Torr = 1 bar)
0D	:	zéro dimension
1D	:	unidimensionnel
2D	:	bidimensionnel
M1	:	maillage uniforme, nombre de cellules en $(r, z) = (14, 20)$
M2	:	maillage non uniforme, nombre de cellules en $(r, z) = (14, 20)$
M3	:	maillage non uniforme, nombre de cellules en $(r, z) = (18, 40)$

INTRODUCTION GÉNÉRALE

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Outre les conséquences très nocives qu'il peut entrainer, le cliquetis est un paramètre qui limite considérablement le rendement des moteurs à allumage commandé, à cause de l'impossibilité d'accroître le taux de compression qui favorise l'apparition de ce phénomène. Comme nous le verrons, le consensus qui règne actuellement attribue l'origine du cliquetis à une auoinflammation des gaz non-brûlés ("end-gas") en amont du front de flamme issu de la bougie. Cependant, les processus physico-chimiques que le cliquetis met en jeu demeurent encore peu connus et méritent plus que jamais de sérieux développements, à cause des législations antipollution qui visent à éliminer progressivement les additifs "antidétonants" dans les essences.

Pour étudier l'autoinflammation dans des conditions voisines des conditions moteur, on utilise en général des machines à compression rapide (MCR). Le principe de celles-ci consiste à porter très rapidement le mélange à étudier à une pression et une température données, par la compression du mélange (au moyen d'un piston) dans une chambre de combustion où l'autoinflammation se produira.

Une de ces machines, dont le prototype a été inspiré d'une machine réalisée à Poitiers, a été conçue et développée à Lille entre 1986 et 1988 au Laboratoire de Cinétique et de Chimie de la Combustion (LC3). Cette machine permet de mesurer les délais d'autoinflammation à partir de dispositifs de diagnostic permettant de suivre l'évolution de différents phénomènes.

Les processus physico-chimiques caractérisant les écoulements dans le cylindre d'une MCR et d'une manière générale dans les foyers industriels, sont extrêmement complexes. Cette complexité est due, d'une part, à l'existence d'une multitude de phénomènes (diffusion, convection, transfert thermique, turbulence, combustion...), qui posent individuellement un problème compliqué et d'autre part aux fortes interactions entre la combustion et le caractère souvent fortement turbulent de l'aérodynamique.

Un des moyens fiable qui permettrait une bonne compréhension de l'ensemble des phénomènes cités précédemment serait une expérimentation adéquate. Cependant, la voie expérimentale s'avère souvent très difficile à mettre en oeuvre et surtout très coûteuse. De plus, elle est parfois dans l'incapacité de fournir les mesures de certaines grandeurs physiques telles que les corrélations vitesse-pression par exemple.

Depuis une vingtaine d'années, le développement extraordinaire des moyens de calcul numériques et des modèles statistiques, a permis de plus en plus l'utilisation de ceux-ci pour la maîtrise des différents phénomènes liés aux écoulements complexes. Néanmoins, les modèles utilisés ne permettent d'accéder qu'aux moyennes statistiques des grandeurs physiques et non à leurs évolutions instantanées qui demeurent aléatoires. Récemment, l'apparition de la simulation numérique directe (SND) qui permet de résoudre numériquement les équations de Navier-Stockes, sans recours à priori à la modélisation, a permis de combler le vide laissé par l'expérience physique dans son incapacité de fournir les mesures de certaines grandeurs. Malheureusement, cette voie a aussi ces limites actuellement, puisque ses performances n'ont été obtenus, principalement, que pour des écoulements à nombres de Reynolds modérés.

Dans le but d'apporter davantage de lumière sur les différents mécanismes liés aux écoulements complexes dans le cas particulier de la machine à compression rapide de Lille, il nous a semblé nécessaire de procéder par étapes. Ainsi, nous avons décidé dans le cadre de cette thèse, de limiter notre travail à une étude aussi fine que possible des écoulements non réactifs. Cette étude est, à notre avis, pertinente puisqu'elle nous permettra de mieux comprendre l'évolution de certaines mécanismes tels que le champ aérodynamique, la turbulence et les pertes thermiques, sans la présence de mécanismes chimiques. Cette étude une fois effectuée, elle nous permettra de mieux aborder le cas des écoulements réactifs et donc du processus d'autoinflammation.

Les travaux que nous présenterons ici reposent sur deux approches différentes du problème. Une approche expérimentale qui fournit, dans la limite des moyens de mesures disponibles actuellement au LC3, l'évolution des caractéristiques physiques de l'écoulement étudié, et une approche numérique quantitative qui permet d'étudier l'évolution de ces caractéristiques physiques dans le temps et dans l'espace. Une confrontation entre les résultats issus de ces deux approches est effectuée et permet par conséquent d'avoir une étude plus complète du problème. Néanmoins, là où l'expérience fait défaut nous sommes contraint de la remplacer par la simulation numérique et dans ce cas nos résultats sont comparés, dans la mesure du possible, à des résultats existant dans la littérature.

Dans ce qui suit, nous essayerons de présenter succintement les contenus des différentes parties qui composent cette thèse.

Le premier chapitre fera l'objet d'un rappel bref des théories relatives à l'autoinflammation et le cliquetis. La machine à compression rapide conçue pour étudier ces phénomènes est l'objet d'une description détaillée. Les performances de la MCR en matière de mesures sont mises en valeur, notamment par la présentation de quelques résultats obtenus au LC3 dans le cas de mélanges réactifs et non réactifs.

Dans le deuxième chapitre nous procédons, dans un premier temps, à la formulation mathématique d'un écoulement de fluide non réactif soumis à une compression dans le cylindre de la MCR. Les équations régissant cet écoulement sont écrites en prenant en compte les hypothèses imposées par la nature physique du problème. La prise en compte de la turbulence est effectuée en adoptant une approche statistique. Celle-ci fera apparaître des termes supplémentaires dans les équations de bilans moyennées. Ces termes se présentent sous forme de corrélations qu'il va falloir modéliser pour assurer la fermeture des équations. Des possibilités de fermeture seront proposées, ce qui nous amènera à aborder les modèles de turbulence.

Par la suite, nous exposerons les techniques numériques adoptées pour la résolution des équations résultant du traitement statistique. Le code de calcul KIVA II qui a été choisi pour effectuer les différentes simulations numériques fera l'objet d'une description succincte.

La modification de KIVA II et son adaptation à la configuration de la MCR est l'objet du Chapitre III. Ce dernier, comportera dans un premier temps un test en laminaire qui permettra de caractériser les méthodes numériques utilisées. Ensuite, un ensemble de résultats issus de deux modèles de turbulence à une et deux équations seront présentés et discutés en fonction de quelques paramètres importants (vitesse de compression par exemple). A la fin de ce chapitre nous présenterons le nouveau maillage que nous avons incorporé dans KIVA II, et une étude de l'écoulement en fonction de celui-ci sera présentée.

Le chapitre IV a pour objectif principal, la confrontation des résultats numériques aux résultats expérimentaux. En outre, une discussion autour de l'évolution spatiale de la température obtenue numériquement nous permettra de confirmer certaines hypothèses émises au chapitre I.

Le dernier chapitre est consacré à une étude détaillée de la manière dont évolue la turbulence sous l'effet de la compression dans la chambre de combustion de la machine. Une revue bibliographique succincte concernant les différents travaux effectués à ce sujet sera

proposée. Ensuite, les résultats issus du test de l'ensemble des modèles que nous avons introduit dans le code seront présentés, sous forme paramétrique, et discutés.

Nous finirons ce travail, par une conclusion générale dans laquelle nous mentionerons les différents problèmes résolus et ceux qui méritent d'amples améliorations. Par ailleurs, nous exposerons les différentes voies et perspectives à explorer pour augmenter notre compréhension des écoulements de fluides dans les machines à compression rapide, et d'une manière générale dans les moteurs à allumage commandé.

CHAPITRE I

LES MACHINES À COMPRESSION RAPIDE DANS L'ÉTUDE DES PROCESSUS D'AUTOINFLAMMATION À L'ORIGINE DU CLIQUETIS

CHAPITRE I

LES MACHINES À COMPRESSION RAPIDE DANS L'ÉTUDE DES PROCESSUS D'AUTOINFLAMMATION À L'ORIGINE DU CLIQUETIS

I.1 INTRODUCTION

Pour déclencher le phénomène de combustion dans un moteur, il suffit d'augmenter localement, dans la chambre de combustion, la température du mélange gazeux. Ceci s'accomplit, en pratique, par une flamme initiée par une étincelle électrique (allumage). Lorsque la combustion est normale le front de flamme issu de la bougie se propage uniformément à travers la chambre en comprimant les gaz non brûlés (end-gas). Néanmoins, sous certaines conditions de mauvais fonctionnement du moteur, les gaz non brûlés en amont du front de flamme s'autoinflamment. Un court instant après cette inflammation spontanée un bruit caractéristique est entendu. Celui-ci est appelé couramment "**cliquetis**". Trés récemment ce bruit a été considéré comme le résultat d'une vibration acoustique, du contenu de la chambre de combustion, à une fréquence de résonance appropriée.

Le cliquetis peut devenir très nuisible pour le moteur dans le cas où il est intense et prolongé. Dans ces conditions il peut provoquer une perte catastrophique de sa puissance ainsi que d'éventuelles défaillances mécaniques. La tendance au cliquetis est liée à divers paramètres comme : la composition du fuel, le taux de compression, la température initiale du mélange, la durée d'inflammation, la vitesse de rotation du moteur...

Depuis sa mise en évidence, le cliquetis a fait l'objet de nombreuses études afin d'apporter plus de lumière sur les facteurs fondamentaux qui sont à l'origine du phénomène ainsi que sur les méthodes permettant son élimination.

Dans ce chapitre, nous rappelons, dans un premier temps, quelques généralités concernant le cliquetis. Nous proposons ensuite une description détaillée de la Machine à

Combustion de Lille (LC3) pour l'étude des phénomènes d'autoinflammation à l'origine du cliquetis. Quelques résultats expérimentaux déjà obtenus seront présentés et discutés. Nous montrerons enfin l'intérêt d'une étude, en système non-réactif, des champs de vitesse et de température engendrés par la compression des gaz.

I.2 LE CLIQUETIS ET SES ORIGINES

I.2.1 Historique et généralités

Le premier moteur à combustion interne avec compression dans la chambre de combustion, fût envisagé par l'ingénieur français Beau de Rochas en 1862. Ce n'est qu'en 1876 que le chercheur allemand Otto, à qui on doit le premier moteur à quatre temps, réalisa le premier moteur avec compression à l'intérieur du cylindre. Toutefois, cette invention montra ses limites lorsqu'on s'est aperçu que le bon fonctionnement du moteur dépendait du taux de compression. En effet, c'est en 1882 [1] qu'on constata qu'au delà d'une certaine valeur, ce facteur favorise l'apparition de certains phénomènes physiques pouvant être très nocifs pour le moteur, en particulier le phénomène de **cliquetis**. Celui-ci dépend en fait de deux facteurs essentiels, le carburant (composition chimique) d'une part, le moteur (taux de compression) d'autre part.

L'étude du cliquetis a suscité depuis l'origine la curiosité de nombreux chercheurs [2],[3],[4],[5],[6]. Actuellement, si tout le monde s'accorde sur les véritables méfaits du cliquetis, la nature exacte du phénomène et les processus qu'il met en jeu suscitent encore de nombreux développements; et ceci d'autant plus que les règlements antipollution visant à éliminer les composés plombés (Pb(C₂H₅)₄) utilisés depuis longtemps comme "antidétonant" dans les essences sont de plus en plus stricts. Néanmoins, on s'accorde actuellement sur le fait que le cliquetis trouve son origine dans l'inflammation spontanée des gaz non brûlés situés en amont du front de flamme issu de la bougie. Une étude trés récente [7], conduite dans le cadre d'un contrat européen Joule piloté par Daimler Benz (R. Maly) et associant diverses spécialistes : Université de Stuttgart (J. Warnatz), Université de Leeds (D. Bradley), Université de Lille (L.R. Sochet), Université de Trondheim (B. Magnusem), et Société Shell a permis de préciser de nombreux points concernant ce phénomène.

I.2.2 Différentes théories du cliquetis

Depuis les années 70, trois théories différentes du cliquetis ont été proposées.

I.2.2.1 Théorie de détonation

Basée sur des considérations expérimentales, cette théorie prétend que le cliquetis serait une onde de combustion couplée à une onde de choc. Celle-ci se propage, selon Male [8] et Miller [9] à une vitesse supersonique (1.3 à 1.7 km/s). La propagation de cette onde dans la chambre de combustion donnerait naissance à une détonation [8].

I.2.2.2 Théorie de l'accélération du front de flamme

Proposée par Curry [10], cette théorie stipule qu'en conditions de cliquetis le front de flamme subit une accélération avec des vitesses allant de 90 à 360 m/s. Cette accélération serait due à la formation d'espèces réactives lors des préréactions dans les gaz non brûlés. Ceci a permis à Curry de conclure que ni une autoinflammation dans les gaz frais, ni le développement d'une onde de détonation n'est nécessaire pour engendrer le cliquetis.

En 1982, Maly & Zigler [11] proposèrent aussi la même explication pour le phénomène. Le modèle de combustion thermique qu'ils ont développé, leur a permis de conclure que l'accélération de la flamme serait due, à une augmentation de la turbulence et de la température dans les gaz frais.

I.2.2.3 Théorie d'autoinflammation dans les gaz frais

Cette théorie prétend que sous certaines conditions de fonctionnement du moteur, une autoinflammation a lieu après un certain délai dans les gaz frais [12],[13],[14]. Ces derniers brûlent instantanément, entraînant ainsi une augmentation locale de la pression. Il s'ensuit des vibrations de la masse gazeuse qui s'atténuent jusqu'à égalisation de la pression dans la chambre.

Actuellement, certains auteurs [15],[16] constatent que les théories proposées ne sont pas forcément contradictoires. Ils suggèrent alors de décrire le phénomène en faisant une synthèse. En effet, au moyen d'une **MCR**, Hayashi et Coll [15] ont pu visualiser une autoinflammation des gaz non brûlés s'autoaccélérant à vitesses supersoniques. Cette autoinflammation donne naissance à une onde de choc, laquelle après réflexion sur les parois de la chambre provoque des oscillations de pression. En tous cas, il semble clair que le phénomène source provoquant le cliquetis dans les moteurs soit une autoinflammation dans les gaz frais. Par conséquent, l'étude de différents mécanismes (aérodynamique, turbulence, thermique, chimiques...) rencontrés par les gaz frais dans la chambre de combustion semble primordiale.

I.2.3 Mécanismes chimiques associés à l'autoinflammation

Cette partie ne rentre pas dans le cadre de cette thèse. En effet notre travail est basé essentiellement sur une étude à caractère aérodynamique du problème. En ce qui concerne une étude chimique détaillée, nous conseillons au lecteur de consulter la référence [17]. Néanmoins, il nous a semblé important de rappeler d'une manière rapide les différents types de mécanismes chimiques utilisés pour étudier l'autoinflammation.

Actuellement, les plus utilisés sont :

I.2.3.1 Mécanismes semi-globaux

Ces modèles sont basés essentiellement sur une globalisation des réactions, et ne prennent en compte que les réactions chimiques ayant un impact direct sur l'apparition de l'autoinflammation. Les modèles de la Shell [18] et de Keck [19] font partie de cette catégorie.

I.2.3.2 Mécanismes détaillés

Ces mécanismes permettent la modélisation sur une base plus fondamentale et impliquent en principe une meilleure prédiction des phénomènes. Cependant, leur principal défaut est le temps de calcul exigé, puisqu'ils prennent en compte beaucoup plus d'espèces et de réactions élémentaires que les mécanismes semi-globaux. Par ailleurs, pour être véritablement prédictifs, ces mécanismes doivent être validés dans une large gamme de température et de pression par des études expérimentales compte tenu du manque de données fiables concernant les constantes de vitesse des réactions élémentaires impliquées. A titre d'exemple, on peut citer les modèles de Westbrook et Pitz [20] ou Warnatz [21].

L'un des moyens de valider ces mécanismes détaillés est la machine à compression rapide, qui peut apporter des informations sur les délais d'autoinflammation et sur la nature des mécanismes mis en jeu lors du développement de l'autoinflammation.

I.3 DESCRIPTION DE LA MCR DE LILLE [17,22]

I.3.1 Introduction

Depuis les premiers dispositifs utilisés, dont on trouvera une présentation intéressante dans [23], différentes machines à compression rapide ont été réalisées. Dans ces machines, le mélange à étudier est porté trés rapidement à une pression et une température données, par la compression quasi adiabatique du mélange à l'intérieur d'un cylindre au moyen d'un piston. L'arrêt du piston en fin de course doit être pratiquement instantané et sans rebond, délimitant ainsi une chambre de combustion à géométrie bien déterminée dans laquelle, la réaction d'oxydation conduisant à l'autoinflammation se produira.

Parmi les machines les plus récentes, nous citerons la machine développée par Affleck et Thomas [24] (dite machine de la Shell) et celle de Gray et Griffiths [25] qui est en fait une version simplifiée de la précédente. Ces machines comportent un piston moteur qui fournit la force motrice et un piston compresseur qui comprime le mélange à étudier. Ces deux pistons sont dans le prolongement l'un de l'autre. Dans ces machines en "ligne" le mouvement, le freinage et l'arrêt des pistons sont contrôlés par l'intermédiaire d'un dispositif hydraulique.

Plus récemment une machine à "angle droit" a été proposée par Fisson, Kageyama et Gabano [26]. Dans cette machine, les pistons moteur et compresseur sont perpendiculaires et les mouvements des deux pistons sont découplés par l'intermédiaire d'une came. Le même principe a été retenu pour la machine développée à Lille. Cependant, compte tenu d'une part du facteur d'extrapolation souhaitée (4 environ) et d'autre part des dispositifs de diagnostic devant équiper la chambre de combustion, en vue de suivre l'évolution des phénomènes avant et durant l'autoinflammation, de profondes modifications dans la conception de l'ensemble ont été apportées.

I.3.2 Conception de la machine

Le schéma de principe de la machine de Lille est représentée sur la figure I.1. Trois éléments principaux peuvent être distingués : le cylindre moteur, le chariot-came, le cylindre de compression et la chambre de combustion.

Le cylindre moteur (canon à air) (7) est constitué de deux cylindres : l'un extérieur servant de réservoir haute pression (35 l environ, 10 bar maximum), l'autre intérieur de diamètre 125 mm permettant le guidage du piston moteur (3). Un amortisseur (5) permet d'arrêter le mouvement de ce piston en fin de course.



Figure I.1 : Schéma de principe de la machine à compression rapide de Lille [22]

1: came, 2: chambre de combustion, 3: piston-moteur, 4: piston-compresseur, 5: amortisseur, 6: came rainurée, 7: cylindre moteur (canon à air), 8: doigt de vérouillage de la came, 9: hublots latéraux, 10: hublot axial, 11: capteur piézo-électrique, 12: vanne d'introduction et d'évacuation des gaz, 13: adaptation pour le système d'échantillonnage. Le chariot-came (1) se déplaçant sur deux glissières grâce à quatre galets assure la transition entre le cylindre moteur et le cylindre de compression des gaz.

Dans le cylindre de compression (4) est réalisée la compression rapide du mélange gazeux introduit dans la chambre de combustion (2).

Le principe de fonctionnement de la machine est le suivant : De l'air est admis dans le canon à air à une pression relative P_c , le système étant immobilisé par l'intermédiaire d'un doigt (8) solidaire d'un vérin pneumatique double effet. Le mélange gazeux à étudier est alors introduit à une pression initiale P_0 dans la chambre de combustion. Le déclenchement de la compression s'opère par abaissement du doigt (8). En fin de course le freinage des deux pistons est réalisée indépendamment. L'ensemble piston moteur-came est arrêté progressivement par l'amortisseur (5) sur quelques cm. Le freinage puis l'immobilisation du piston de compression des gaz est lui en liaison directe avec la courbure de la partie rainurée de la came.

La déconnexion des mouvements du piston moteur et du piston de compression des gaz dans la phase finale de l'opération constitue la partie la plus originale de la machine.

I.3.3 Le cylindre de compression et la chambre de combustion

Les figures I.2 et I.3 présentent des vues en coupe d'une des parties les plus importantes de la machine : la chambre de combustion qui vient coiffer le cylindre dans lequel s'effectue la compression des mélanges à étudier. La tête du piston est apparente sur la figure I.2. Le problème de l'étanchéité au niveau du piston aussi bien en statique qu'en dynamique a été résolu en utilisant des joints à lèvres et des segments de guidage en turcite pouvant supporter des vitesses linéaires jusqu'à 15 m/s en fonctionnement discontinu.

La chambre est équipée d'un capteur de pression piézo-électrique (1), de hublots latéraux (3), d'un hublot central (4) pour la visualisation de l'autoinflammation et éventuellement le diagnostic laser, d'une vanne d'introduction et d'évacuation des gaz de la chambre (5), et d'un orifice (6) permettant d'adapter un système d'échantillonnage des gaz.

Sur les différents orifices de la chambre, l'étanchéité est assurée par des joints toriques ou des joints plats en viton assurant des taux de fuite négligeables (0,03 torr/s sous vide au point mort bas (PMB) et 24 mbar/s au point mort haut (PMH) sous une pression de 50 bar).

Plusieurs colliers chauffants fixés sur le cylindre de compression et la culasse de la chambre permettent d'opérer à partir d'une température initiale T_0 que l'on peut faire varier et mesurer grâce à un thermocouple introduit par l'un des orifices latéraux.



Figure I.2 : Coupe axiale de la chambre de combustion et du piston compresseur [22]
4: hublot central, 5: vanne d'introduction et d'évacuation des gaz, 7: joints, 8: segments en turcite.



Figure I.3 : Coupe transversale de la chambre de combustion [22] 1: capteur de pression piezoélectrique, 3: hublots latéraux, 5: vanne d'introduction et d'évacuation des gaz, 6: orifice pour l'adaptation du système d'échantillonnage. L'ensemble cylindre de compression-chambre de combustion est relié par ailleurs à un système permettant la préparation de mélanges gazeux de composition donnée sur la base de la méthode des pressions partielles.

I.3.4 Les mesures effectuées

Un micro-ordinateur permet de déclencher la machine et d'acquérir les données des capteurs utilisés, soit pour contrôler le fonctionnement de la machine (capteur de position), soit pour suivre l'évolution de la réactivité chimique globale dans la chambre de combustion (capteurs de pression, d'effet lumineux, voire de température).

Le logiciel d'aquisition effectue simultanément l'acquisition et la conversion numérique de quatre signaux analogiques avec une précision de 8 bits. 32000 points par canal avec une résolution temporelle de 40 µs peuvent être stockés sur une disquette ou disque dur. Des commandes spécifiques de type "zoom" permettent d'isoler une partie intéressante d'un phénomène en changeant le pas affiché entre chaque point, chaque courbe étant représentée à l'écran par 320 points.

I.3.4.1 Mesure de la pression

La pression dans la chambre est mesurée grâce à un capteur piézo-électrique KISTLER 601 A associé à l'amplificateur de charge 5007 pouvant travailler dans des échelles allant de 500 mbar/volt à 50 bar/volt. Un dispositif approprié permet d'éviter les surcharges de l'amplificateur et d'adapter la pleine échelle de l'amplificateur (10 V) à celle de l'écran de visualisation (2 V).

I.3.4.2 Mesure de l'émission lumineuse

L'émission lumineuse liée aux préréactions et à l'autoinflammation proprement dite est mesurée par un photomultiplicateur RCA 1P21 équipé d'un filtre bleu centré sur 400 nm. Après amplification par un facteur 20 le signal est transmis à l'ordinateur.

I.3.4.3 Mesure du déplacement du piston

Le déplacement du piston de compression du mélange est suivi en fonction du temps grâce à un optocoupleur constitué d'une diode émettrice infrarouge et d'un récepteur solidaire du piston. Le déplacement de ce capteur devant une barrière optique fixe, percée de trous de 1,02 mm de diamètre espacés de 2,54 mm, génère des signaux carrés dont l'exploitation informatique permet de connaître à chaque instant la position z et la vitesse v du piston.

I.3.4.4 Température du thermocouple

La température donnée par le thermocouple introduit au centre de la chambre de combustion représente d'autant mieux la température des gaz que le temps de réponse du couple (qui dépend essentiellement de la grosseur de la jonction et de la vitesse des gaz) est faible. Des essais de mesure de l'évolution de la température pendant la compression et après la fin de compression ont été réalisés avec des thermocouples chromel-alumel de 12,5 et $25 \ \mu m$.

I.3.4.5 L'échantillonnage et le dosage des produits

Les capteurs décrits précédemment ne permettent que de suivre globalement la réactivité chimique du mélange comprimé en mesurant, par exemple, les périodes d'autoinflammation dans différentes conditions paramétriques. Afin de suivre l'évolution chimique des substances initiales associée à l'autoinflammation et plus spécialement à la phase précédant celle-ci, un dispositif permettant de prélever la masse gazeuse à un instant donné a été développé. Ce dispositif s'apparente aux dispositifs décrits dans la littérature [27].

Un diaphragme de 0,6 mm d'épaisseur constitué de 6 feuilles d'aluminium est adapté sur l'orifice (6, figure I.3) de la chambre de combustion. Il est percé à un instant donné à l'aide d'un pointeau métallique solidaire d'un dispositif électromécanique commandé par le microordinateur. Les gaz sont alors récupérés à très basse pression dans une enceinte métallique de 1550 cm³ environ; dont la forme évasée et le fond concave permettent d'éviter la réflexion d'une onde de choc pouvant être engendrée par le passage brutal des gaz de la pression élevée régnant dans la chambre de combustion à celle relativement faible régnant dans la chambre de prélèvement. L'instant du prélèvement est connu avec précision par l'enregistrement de la brutale chute de pression observée dans la chambre lors du percement du diaphragme. Une fois recueilli, les gaz sont comprimés lentement, puis injectés pour analyse dans un dispositif chromatographique approprié, associé à un spectromètre de masse.

I.4 PRESENTATION DE QUELQUES RESULTATS ET INTERPRETATION [17,22,28,29]

I.4.1 L'estimation de la température

La température est un paramètre essentiel pour décrire la réactivité du milieu pendant ou après la compression. Elle peut être calculée, à priori (température adiabatique), déterminée à partir de la pression (température de coeur ou température moyenne) ou déduite des mesures par thermocouple.

I.4.1.1 Calcul de la température adiabatique T_a au PMH

En supposant que le système évolue adiabatiquement et sans changement du nombre de molécules pendant la compression, la température adiabatique T_a s'exprime en fonction de la température initiale T_0 par les expressions suivantes :

$$\int_{L}^{L} \frac{1}{\gamma - 1} \frac{dT}{T} = \text{Log} \frac{V_{\text{PMB}}}{V_{\text{PMH}}}$$
(I.1)

$$\int_{T_0}^{T_a} \frac{1}{\gamma - 1} \frac{dT}{T} = \text{LogT}_{cp}$$
(I.2)

Dans ces expressions $\frac{V_{PMB}}{V_{PMH}}$ représente le taux de compression T_{cp} de la MCR et γ le rapport des chaleurs spécifiques $\frac{C_p}{C_v}$ qui peut être exprimé en fonction de la température à partir des tables de la NASA. La pression adiabatique est déterminée à partir de l'équation des gaz parfaits (à nombre de moles constant) $\frac{PV}{T}$ = cste, et des conditions initiales (P_0, T_0) par :

$$P_{a} = P_{0} \frac{T_{a}}{T_{0}} T_{cp}$$
(I.3)

L'expérience montre que quel que soit le temps de compression (20 à 80 ms), la pression mesurée au PMH est toujours inférieure à la pression adiabatique calculée P_a . Ceci traduit le fait que les pertes de chaleur ne sont pas négligeables même pour une compression s'effectuant en 20 ms.

I.4.1.2 Calcul de la température de coeur T_c au PMH

On peut admettre qu'il existe un noyau au centre de la chambre non affecté par les pertes thermiques se trouvant à la pression mesurée P_1 et à une température de "coeur" T_c que l'on peut déterminer par une expression équivalente à l'expression (I.2) :

$$\int_{T_0}^{I_c} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{dT}{T} = \text{Log}\frac{P_1}{P_0}$$
(I.4)

L'importance de ce "coeur" adiabatique ne peut malheureusement pas être facilement estimée.

I.3.1.3 Calcul de la température moyenne homogène T_{m,h} au PMH

Une température moyenne $T_{m,h}$ caractérisant le milieu supposé homogène peut être également calculée (sans variation du nombre de moles) par :

$$T_{m,h} = T_0 \frac{P_1}{P_0} \frac{1}{T_{cp}}$$
(I.5)

Dans le cas d'une compression adiabatique $T_a = T_c = T_{m,h}$, mais en règle générale des écarts notables entre ces trois températures ont été enregistrés ($T_a > T_c > T_{m,h}$).

I.3.1.4 Température déduite des mesures par thermocouple

La température du gaz T_g peut être déduite de la température du couple T_w par résolution de l'équation suivante :

$$T_{g} = T_{w} + M_{c} \frac{dT_{w}}{dt} \qquad \text{avec} \qquad M_{c} = \frac{D_{c}^{2} \rho_{w} C_{w}}{4 N u \lambda_{g}} \qquad (I.6)$$

 M_c représente la constante de temps du thermocouple. Celle-ci dépend non seulement du diamètre D_c , de la masse volumique ρ_w et de la capacité calorifique massique C_w du couple qui sont des grandeurs facilement estimables mais aussi de la conductivité thermique du gaz λ_g et du nombre de Nusselt Nu. Ce dernier est défini par :

$$Nu = 0,42 \left(\frac{\nu_{g} C_{p_{g}}}{\lambda_{g}}\right)^{0,2} + 0,57 \left(\frac{\nu_{g} C_{p_{g}}}{\lambda_{g}}\right)^{0,33} \left(\frac{u_{g} D_{c}}{\mu_{g}}\right)^{0,5}$$
(I.7)

Dans cette expression v_g , μ_g , C_{p_g} , u_g représentent respectivement la viscosité cinématique du gaz, la viscosité dynamique du gaz, la capacité calorifique massique du gaz et la vitesse du gaz à proximité du thermocouple.

L'étude réalisée [30] a montré qu'il suffisait de connaître les grandeurs physiques λ_0 , ν_0 , C_{p_g} , ρ_g aux conditions initiales T_0 , P_0 ainsi que $u_g(t)$ pour en déduire la température corrigée quels que soient les paramètres T_g et P_g . La méthode de compensation numérique de la réponse du thermocouple qui a été élaborée dépend, en fait, beaucoup de la valeur de la vitesse du gaz au voisinage du thermocouple.

En règle générale, la température de coeur T_c a été retenue pour caractériser la température du milieu au PMH.

I.4.2 L'autoinflammation

I.4.2.1 Mélange non réactif

Le comportement d'un mélange butane-azote-argon, non réactif est représenté sur la figure I.4. La courbe de pression atteint son maximum au PMH. La diminution de pression observée après le PMH est due aux pertes de chaleur aux parois et par conséquent à une diminution de la température moyenne.

I.4.2.2 Mélange réactif

Dans le cas d'un mélange réactif de même capacité calorifique que le précédent dans lequel une fraction d'azote a été remplacée par de l'oxygène, un comportement tout à fait différent est observé (figure I.4). Pendant 60 ms après le PMH, les courbes de pression du mélange réactif et du mélange non réactif sont quasiment identiques. Par contre au delà de cette valeur la production de chaleur par la réaction chimique devient prépondérante et une autoinflammation en deux stades est observée. Le premier stade se produit après un délai t₁; il s'agit d'une flamme froide (FF). Le second stade ou flamme normale (FN) de délai global t est associé à une autoinflammation totale. Dans le cas général, des autoinflammations en deux stades ou en un stade seront observées suivant la température atteinte au PMH.

La présentation du phénomène d'autoinflammation dans son intégralité est donnée sur la figure I.5 dans le cas du pentane. On peut constater que l'autoinflammation produit une forte augmentation de pression. Elle est dite "sévère" dans ce cas, car elle est associée à des oscillations importantes de pression, qui sont tout à fait analogues à celles que l'on peut observer dans le cas des moteurs à allumage commandé dans les conditions de cliquetis. Ces oscillations de pression qui peuvent être de grande amplitude sont d'ailleurs utilisées pour définir un facteur d'intensité de cliquetis KI (Knock Intensity) sur une certaine plage de degré vilebrequin après l'autoinflammation.



Figure I.4 : Comparaison des courbes de pression d'un mélange réactif et d'un mélange non réactif [22]



Figure I.5 : Autoinflammation d'un mélange n-pentane/"Air" de richesse 1 [22] $n-C_5H_{12}/O_2/N_2/Ar = 2,56/20,48/48/28,96$. T₀ = 365 K, P₀ = 310 Torr
I.4.3 Evolution des délais avec la température, Comparaison expériencemodélisation

Outre les analyses chimiques qui sont d'une grande utilité pour l'élaboration des mécanismes détaillés permettant de décrire les processus conduisant à l'autoinflammation, la mesure des délais peut être effectuée pour différentes richesses, charges et températures.

I.4.3.1 Le coefficient négatif de température

A titre d'exemple, est représentée sur la figure I.6 (en fonction de la température de coeur T_c au PMH) l'évolution des délais d'autoinflammation (froide et normale) dans le cas d'un mélange stoechiométrique ($\Phi = 1$) butane "air" correspondant à une charge compressée $(T_{cp} \frac{P_0}{RT_0})$ de 180 mol m⁻³.



Figure I.6 : Comparaison entre les délais d'autoinflammation expérimentaux (symboles) et calculés (courbes) d'un mélange n-butane-"air" pour différentes températures de coeur T_c [29]

densité de la charge compressée : 180 mol m⁻³, O : délais globaux, Δ : délais de la flamme froide

Le fait le plus caractéristique, constituant une règle générale pour les hydrocarbures est l'existence d'un coefficient négatif de température. Celui-ci se traduit, dans une certaine zone de température, par une augmentation des délais avec la température. Ce phénomène est associé à un changement des mécanismes chimiques impliqués et notamment de la nature des agents de ramification.

I.4.3.2 Le modèle utilisé

Pour rendre compte des phénomènes, le modèle utilisé est basé sur les hypothèses d'un système adiabatique homogène à volume constant (V_{PMH}) dont les paramètres initiaux sont la composition chimique initiale et les températures et pressions déterminées au PMH : c'est à dire la pression mesurée P_1 et la température de coeur calculée T_c . Le mécanisme chimique utilisé comporte 140 espèces impliqués dans 807 réactions élémentaires.

I.4.3.3 Comparaison modèle / expérience

Le modèle permet de rendre compte avec une bonne estimation, notamment en ce qui concerne les produits majoritaires, de l'évolution temporelle de 25 composés moléculaires qui ont pu être détectés par l'analyse chimique ($T_c = 731$ K).

Comme on peut le voir sur la figure I.6, les délais calculés sont du même ordre de grandeur que les délais mesurés. Le coefficient négatif de température est bien reproduit. Cependant un décalage global vers les basses températures semble perceptible pour la courbe des délais calculés. Ces désaccords peuvent être dus, soit à la nature du modèle (homogène adiabatique), soit au choix du mécanisme chimique, soit à une surestimation de la température effective du milieu.

L'ensemble de ces résultats montre que la machine à compression rapide est un outil de choix pour l'étude des mécanismes d'autoinflammation à haute pression dans le domaine 700-900 K. Cependant, une prise en compte plus fine des phénomènes permettrait probablement de résoudre certains problèmes qui demeurent.

I.5 VERS UNE DESCRIPTION EN 2D DES PHÉNOMÈNES. CAS D'UN SYSTÈME NON RÉACTIF

I.5.1 Discussion critique du modèle 0D

Le modèle utilisé ne prend en compte ni les pertes de chaleur aux parois ni la nonhomogénéité du point de vue température du milieu. Ces deux paramètres sont probablement importants à considérer. L'existence d'un noyau quasi-adiabatique au centre de la chambre mérite d'être confirmée. Celui-ci doit être profondément influencé par les mouvements des gaz engendrés par le déplacement du piston. Les transferts thermiques dépendent également de la vitesse des gaz et de la turbulence. D'un point de vue chimique, l'existence de zones périphériques plus froides pourrait impliquer un démarrage de l'autoinflammation en "couronne" dans la zone du coefficient négatif de température.

Toutes ces considérations militent pour une prise en compte bidimensionnelle de l'ensemble des phénomènes qu'ils soient aérodynamiques, thermiques ou chimiques. Comme il est tout à fait impensable de décrire la chimie à l'aide d'un mécanisme détaillé, impliquant par exemple dans le cas du butane 140 espèces et 800 réactions élémentaires (bien que certains développements aient été réalisés récemment avec des mécanismes réduits [31-34]), il nous a semblé utile de limiter notre étude à une description aussi fine que possible des écoulements engendrés par la compression d'un gaz non réactif.

I.5.2 Description en 2D du système non réactif et choix des conditions d'étude

Une connaissance approfondie des champs de vitesse et de température dans le cas d'un système non réactif permettrait de comparer la température de coeur T_c que l'on déduit de la mesure de la pression au PMH à celle calculée, et de matérialiser ce "coeur" ainsi que l'importance de l'hétérogénéité de température dans la chambre de combustion. Elle fournirait aussi des données intéressantes sur l'importance des corrections à apporter à la mesure locale des températures par thermocouple (cf. § I.3.1.4).

Dans ces conditions, nous avons choisi de développer le code de calcul KIVA II (voir Chapitre II) pour étudier le comportement d'un gaz non réactif (l'azote) comprimé à différentes vitesses dans la chambre de combustion en nous intéressant plus particulièrement aux champs de température et de vitesse pendant et après la compression.

La configuration expérimentale de la MCR a été respectée notamment en ce qui concerne le diamètre D de la chambre et la course L du piston. Le taux de compression a été fixé à 9,8 ce qui correspond à la valeur mesurée (\pm 0,1) et implique une hauteur de chambre H au PMH égale à 22,6 mm (cf. Tableau I.1).

Les conditions d'étude sont précisées dans le tableau I.2 ainsi que les valeurs des paramètres P_a , T_a , T_c et $T_{m,h}$ calculés en utilisant les expressions (I.2), (I.3), (I.4) et (I.5). Les données initiales P_0 , T_0 et les courbes de déplacement du piston en fonction du temps ont été utilisées comme données d'entrée pour la modélisation.

La vitesse de compression des gaz dans la chambre est liée directement à la pression P_c dans le canon à air. Sur la figure I.7 on représente pour deux pressions très différentes dans le canon à air ($P_c = 1,6$ et 5,6 bar), les courbes d'évolution de la pression mesurée. Avec une vitesse de compression plus rapide, le gradient d'augmentation de pression (et donc de

température) associé à la compression est beaucoup plus important. Ceci peut limiter le développement de réactions chimiques dans les gaz avant la fin de la compression, mais par la même occasion induire une turbulence plus importante dans la masse gazeuse.

Un examen de l'influence de la vitesse de compression sur l'évolution des courbes de pression expérimentales après le PMH, n'est pas sans intérêt. En effet l'analyse des résultats correspondant à trois valeurs de P_c (1,6 ; 4 et 5,6 bar) rassemblés sur la figure I.8, nous révèle l'existence de trois régions A,B et C dans la période de décroissance.

Dans la région C, la dimunition de pression est sensiblement la même quelle que soit la vitesse de compression et les courbes de pression sont pratiquement superposables.

Dans la région A, d'une durée de 1 à 2 ms environ après le PMH, nous constatons une diminution de pression qui s'accentue avec la vitesse de compression et qui est probablement associée à l'accroissement de la turbulence créée par une compression plus rapide.

La région B est associée à une oscillation du capteur de pression. Une analyse fine de ce phénomène a montré que cette oscillation était engendrée par le choc du piston-moteur sur l'amortisseur. Ce phénomène, sensible surtout pour les valeurs élevées de P_c , peut cependant être "déplacé" sur l'échelle des temps en changeant la position de l'amortisseur. Ceci permet éventuellement de déplacer le choc après l'apparition du phénomène d'autoinflammation et d'éviter la perturbation engendrée par celui-ci.

La figure I.9 représente dans les mêmes conditions, une estimation de l'évolution de la température de "coeur" que l'on peut déduire de l'expression (I.4).

Taux de compression	T _{cp} =9.8		
Hauteur de la chambre	H=22.6 mm		
Diamètre de la chambre	D=50 mm		
Course du piston	L=199 mm		

Tableau I.1 : Caractéristiques géométriques de la MCR retenues pour la simulationnumérique

1

Temps de compression (en ms)	86	47	29
Pression mesurée au PMH (en bar)	7,4	8,05	8,5
Pression adiabatique P _a (en bar)	9,4	9,4	9,4
Température adiabatique T _a (en K)	850	850	850
Température de coeur T _c (en K)	798	816	828
Température moyenne homogène T _{m,h} (en K)	670	729	770

Tableau I.2 : Conditions d'étude et valeurs des paramètres mesurés ou calculés au PMH $(N_2 \text{ pur}, P_0 = 0.4 \text{ bar} . T_0 = 355 \text{ K})$







Figure I.8 : Evolution de la pression expérimentale pendant et après la compression pour différentes pressions P_c dans le canon à air $(N_2 pur, P_0 = 0.4 Bar, T_0 = 355 K)$



Figure I.9 : Estimation de la température de cocur T_c lors de la compression et après le PMH pour différentes pressions P_c dans le canon à air $(N_2 pur, P_0 = 0.4 bar, T_0 = 355 K)$

CONCLUSION PARTIELLE

Dans ce chapitre, nous avons proposé quelques généralités concernant l'étude des phénomènes d'autoinflammation et de cliquetis dans les moteurs à allumage commandé. Ensuite, nous avons procédé à une description de la machine à compression rapide de Lille qui a été conçue, essentiellement, pour l'étude des délais d'autoinflammation (source principale du cliquetis) de différents hydrocarbures.

Nous avons par ailleurs présenté quelques résultats expérimentaux, obtenus dans cette machine qui ont fait l'objet d'une confrontation à des résultats calculés issus d'une modélisation 0D impliquant une chimie complexe et détaillée des différents processus.

Nous avons montré l'importance que pourrait avoir une étude fine et détaillée de l'écoulement de fluide subissant la compression dans la chambre de combustion de la MCR. Cette étude fournirait des éléments supplémentaires pour une meilleure connaissance de l'environnement dans lequel évoluent les phénomènes d'autoinflammation et de cliquetis. Dans cette optique, nous avons choisi d'étudier, en premier lieu dans le cadre de ce travail, un écoulement de fluide non réactif (ou toutes les considérations chimiques seront écartées) en s'intéressant principalement aux aspects aérodynamique, turbulence et thermique.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] D. CLARK Trans. Faraday Soc., pp: 22-338 (1926).
- [2] H.R RICARDO & J.G.G HEMPSON
 "The high speed internal combustion engine"
 5th ed., Blackie, (1968).
- B. LEWIS & G. VON ELBE
 "Combustion flames and explosion of gases" Academic Press, (1961).
- [4] G.J. MINKHOFF & C.F.H. TIPPER
 "Chimistry of combustion reactions" Butterworths, (1962).
- [5] S.S. PENNER & B.P. MULLINS
 "Explosions, Detonations, Flammability and Ignition"
 Part I, Pergamon Press, pp : 192-209 (1959).
- [6] C.R. FERGUSON

"Internal combustion engines: applied thermosciences" Perdue University, pp : 387-393 (**1986**).

[7] R. MALY, D. BRADLEY, B. MAGNUSEN, L.R SOCHET & J. WARNATZ

"Gas/surface interactions and damaging mechanisms in knocking combustion" Periodic and final CCE reports, JOULE-0028 D (28), (1990-1993).

[8] **T. MALLE**

"Photographs at 500 000 frames per second of combustion and detonation in a reciprocating engine"

3th Symp. (Int.) on Comb., The combustion institute, pp : 721-726 (1948).

[9] C.D. MILLER

"Roles of detonation waves and autoignition in spark and ignition engine knock as shown by photographs taken at 40 000 and 200 000 frames per second" SAE Quart., Trans. 1, pp : 98-143 (**1947**).

[10] S. CURRY

"Effect of antiknocks on flame propagation in a spark ignition engine" 9th Symp (Int) Comb, pp : 1056-1068, (1963).

[11] R. MALY & G. ZIEGLER

"Thermal combustion modeling-theoretical and experimental investigation of the knocking process"

SAE paper 820 759, (1982).

[12] G.A. BALL

"Photographic studies of cool flames and knock in an engine" 5th Symp. (Int.) Comb., pp : 366-372, (1954).

[13] W.S. AFFLECK & A. FISH

"Two-stage ignition under engine conditions parallels that at low pressures" 11th Symp. (Int.) Comb., pp : 1003-1013, (1967).

[14] J. SMITH, R. GREEN, C.K WESTBROOK & W. PITZ

"An experimental and modeling study of engine knock" 20th Symp. (Int.) Comb., pp : 91-100, (1984).

[15] T. HAYASHI, M. TAKI, S. KOJIMA & T. KONDO

"Photographic observation of knock with rapid compression and expansion machine" SAE paper 841 336,5, pp : 847-859, (1985).

[16] S. ANTONIK & D. SCACHE

"Un phénomène méconnu : l'autoinflammation détonante" Entropie, 160, pp : 21-28, (**1991**).

[17] M. RIBAUCOUR

"Autoinflammation et cliquetis dans les moteurs, etude en machine à compression rapide de l'influence de la structure de l'hydrocarbure sur les délais d'autionflammation" Thése de doctorat de l'Université de Lille I, (1992).

[18] M.P. HALSTEAD, L.J. KIRSH & C.P. QUINN

"The autoignition of hydrocarbon fuels at high temperature and pressures-fitting of a mathematical model"

Comb. and Flame, 30, pp : 45-60, (1977).

[19] K.M. CHUN, J.B. HEYWOOD & J.C. KECK

"Prediction of knock occurence in a spark-ignition engine" 22th Symp. (Int.) Comb., pp : 455-463, (1988).

[20] C.K. WESTBROOK, J. CREIGHTON, C. LUND & K.L. DRYER

"A numerical model of chemical kinetics in a turbulent flow reactor" J. Phys. Chem., 81, pp : 2542-2554, (1977).

[21] J. WARNATZ

"Chemistry of heigh temperature combustion of alkanes up to octane" 20th Symp. (Int.) Comb., pp : 845-856, (1984).

[22] M. RIBAUCOUR, R. MINETTI, M. CARLIER, L.R SOCHET

"Autoinflammation à haute pression. Conception, réalisation et test d'une machine à compression rapide"

J. Chim. Phys., 89, pp : 2127-2152, (1992).

[23] A. COMBE, H. GUENOCHE ET C. MEYER

"Les machines à compression rapide" Revue de l'IFP, XII, N° 3, pp: 338-353, (1957).

[24] W.S. AFFLECK & A. THOMAS

"An opposed piston rapid compression machine for preflame reaction studies" Proc. Inst. Mech. Eng., 183, pp: 255-268, (1968).

[25] P. BEELEY, J.F. GRIFFITHS & P. GRAY

"Rapid compression machine studies on spontaneous of isopropyl nitrate. Part I : non explosive oxidation conditions for safe handling" Comb. and Flame, 39, pp : 255-268, (1980).

[26] J.D. GABANO

"Etude dans une chambre fermée du régime de combustion vibratoire s'apparentant au cliquetis des moteurs alternatifs à allumage commandé" Thèse de Doctorat de l'Université de Poitiers, Spécialité énergétique, (1988).

[27] L.H.S. ROBLEE

"A technique for sampling reaction intermediates in a rapid compression machine" Comb. and Flame, 5, pp : 229-234, (1961).

[28] M. CARLIER, C. CORRE, R. MINETTI, J.F. PAUWELS, M. RIBAUCOUR & L.R. SOCHET

"Autoignition of butane : a burner and a rapid compression machine study" 23th. Symp. (Int.) Comb., pp : 1753-1758, (1990).

[29] R. MINETTI, M. RIBAUCOUR, M. CARLIER, C. FITTSCHEN & L.R. SOCHET

"Experimental and modelling study of oxidation and autoignition of butane at high pressure"

Comb. and Flame, 96, pp : 201-211, (1994).

[30] M. CHABANT

"Détermination de l'evolution temporelle de la temperature dans une machine à compression rapide au moyen d'un thermocouple rapide" Stage de Maitrise de Physique, Université de Lille I, (1993).

[31] J.F. GRIFFITHS, Q. JAIO, M. SCHREIBER, J. MEYER & K.F. KNOCHE

"Development of thermokinetic models for autoignition in a CFD code : experimental validation and application of the results to rapid compression machine" 24th. Symp. (Int.) Comb., pp :1809-1815, (1992).

[32] J.F. GRIFFITHS, D. ROSE, M. SCHREIBER, J. MEYER & K.F. KNOCHE "Application of CFD to the modelling of autoignition at high pressure in a cylinder" I. Mech. E, C448/030 : 29, (1992).

[33] J.F. GRIFFITHS, D. ROSE, M. SCHREIBER, J. MEYER & K.F. KNOCHE "Novel features of end-gas autoignition revealed by computational fluid dynamics"

Comb. and Flame, 93, pp : 209-212, (1992).

[34] J.F. GRIFFITHS, Q. JAIO, W. KORDYLEWSKI, M. SCHREIBER, M. MEYER & K.F. KNOCHE "Experimental and numerical studies of ditertiary butyl peroxide combustion at high pressures in a rapid compression machine" Comb. and Flame, 93, pp : 303-315, (1993).

CHAPITRE II

Position mathématique du problème et méthodes de résolution numérique

CHAPITRE II

POSITION MATHÉMATIQUE DU PROBLÈME ET MÉTHODES DE RÉSOLUTION NUMÉRIQUE

II.1 INTRODUCTION

L'écoulement de fluide dans la chambre de combustion de la MCR peut être décrit en tout point de l'espace X (x,y,z) et à chaque instant t, par la connaissance de la masse volumique ρ du fluide, des trois composantes de la vitesse u_i(i=1,2,3), de la pression p et de l'énergie E. Ces différentes quantités peuvent être déterminées par la résolution du système d'équations classiques de la mécanique des milieux continus et les relations de la thermodynamique.

Dans ce chapitre, on établira le système d'équations qui régit l'écoulement de fluide considéré. Les différentes hypothèses adoptées pour prendre en compte la particularité du problème, seront mentionnées. Pour l'étude d'un écoulement turbulent, le traitement statistique du système d'équations sera revu, et les différents modèles de turbulence assurant la fermeture du système seront proposés et discutés. Par ailleurs, nous présenterons les différentes techniques numériques que nous avons utilisé pour traiter le problème. En particulier une description du programme KIVA II, qui nous a permis d'effectuer différentes simulations numériques, sera proposée.

II.2 FORMULATION MATHEMATIQUE DU PROBLEME

II.2.1 Equations de bilans instantanés

Le mélange fluide dans la chambre de combustion est considéré homogène, composé d'une seule espèce chimique, visqueux, non pesant, newtonien et à masse volumique variable. L'écoulement est supposé instationnaire et turbulent. Dans ces conditions, les différentes équations régissant l'écoulement de fluide sont les suivantes [1] :

II.2.1.1 Equation de continuité

Elle traduit la conservation de la masse et s'exprime par :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \tag{II.1}$$

II.2.1.2 Equation de quantité de mouvement

Elle traduit le principe fondamental de la mécanique, à savoir la conservation de la quantité de mouvement. Dans le cas d'un fluide newtonien, cette équation est celle de Navier-Stockes. Elle exprime le fait que l'accélération des particules fluides est due aux forces de pression et aux contraintes visqueuses.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i}$$
(II.2)

Dans cette expression τ_{ij} représente le tenseur des contraintes dues à la viscosité. Dans le cas d'un fluide newtonien, τ_{ij} est relié linéairement au tenseur de taux de déformation. Son expression est donnée en première approximation par :

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

II.2.1.3 Equation d'énergie

Elle traduit le premier principe de la thermodynamique, concernant la conservation de l'énergie. Cette équation peut se mettre sous diverses formes en fonction des variables d'état choisies. Nous la présentons ici pour l'enthalpie totale h_t .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_t) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h_t) - \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_j \tau_{ij})$$
(II.4)

avec

$$h_t = h + \frac{u_i u_i}{2}$$
 et $h = e + \frac{p}{\rho}$ (II.5)

Dans l'équation (II.4), les termes de droite représentent le transfert de chaleur par conduction (loi de Fourier) avec λ le coefficient de conductivité thermique, et la puissance des forces visqueuses par unité de volume. Les contributions d'autres natures ont été négligées. Les scalaires h et e dans (II.5) représentent l'enthalpie massique et l'énergie interne par unité de masse.

II.2.1.4 Equation d'état

Dans le cas de l'hypothèse des gaz parfaits, la relation d'état traduisant l'équilibre thermodynamique s'exprime par :

$$\mathbf{p} = \boldsymbol{\rho} \mathbf{R} \mathbf{T} \tag{II.6}$$

Cette équation associée aux autres équations nous permet d'obtenir un système fermé.

II.2.2 Equations de bilans moyennés

II.2.2.1 L'approche statistique

Le calcul d'un écoulement turbulent de fluide compressible peut en principe s'accomplir par la résolution des équations précédentes. Cependant, la taille des ordinateurs les plus puissants qu'il est possible de concevoir, ne permet pas de traiter ces équations. Il devient donc nécessaire en pratique de recourir à des techniques particulières pour pouvoir simuler numériquement un écoulement turbulent

La technique la plus couramment utilisée pour les applications industrielles, repose sur une description statistique qui consiste à prendre en compte certaines des caractéristiques fluctuantes du mouvement dans les équations instantanées de l'écoulement considéré [2]. En fait, les valeurs instantanées des vitesses, pression et enthalpie deviennent inaccessibles dans ce type d'écoulements. Ceci est dû à leurs variations aléatoires dans le temps, dans l'espace et aussi à leurs conditions initiales et aux limites. L'approche statistique nous permet d'accéder aux valeurs moyennes de ces variables et de leurs conditions aux limites, à l'écart type de leurs variations et également à certaines de leurs corrélations.

Pour obtenir la moyenne d'une variable, différentes possibilités existent [2] :

• Moyennes de Reynolds :

Considérons une variable f(x,t), sa moyenne temporelle s'écrit :

$$\bar{f}(x;t) = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_{t-\frac{T}{2}}^{t+\frac{T}{2}} f(x;t) dt$$
(II.7)

Dans le cas de phénomènes stationnaires ergodiques, les moyennes d'ensemble au sens de Reynolds sont égales aux moyennes temporelles et obéissent aux mêmes règles classiques dites de Reynolds. Il s'ensuit que si f(x,t) et h(x,t) sont deux variables alors leurs moyennes temporelles obéissent aux relations suivantes :

$$\overline{\mathbf{f} + \mathbf{h}} = \overline{\mathbf{f}} + \overline{\mathbf{h}}$$

$$\overline{\alpha}\overline{\mathbf{f}} = \alpha\overline{\mathbf{f}} \quad \text{et} \qquad \overline{\alpha} = \alpha \quad \text{si} \quad \alpha = \text{constante} \quad (II.8)$$

$$\overline{\overline{\mathbf{fh}}} = \overline{\mathbf{fh}}$$

$$\overline{\overline{\mathbf{df}}} = \frac{\partial\overline{\mathbf{f}}}{\partial \mathbf{t}} \quad , \quad \overline{\frac{\partial\overline{\mathbf{f}}}{\partial \mathbf{x}_i}} = \frac{\partial\overline{\mathbf{f}}}{\partial \mathbf{x}_i}$$

Ce traitement statistique comporte aussi la décomposition de chaque variable aléatoire f en une partie moyenne (non aléatoire) et une partie fluctuante :

$$\mathbf{f} = \bar{\mathbf{f}} + \mathbf{f}'' \tag{II.9}$$

La fluctuation f'' est centrée, puisque sa moyenne est nulle : $\overline{f''} = 0$. Ce qui nous permet d'écrire les relations suivantes :

$$\overline{\mathbf{f}^2} = \overline{\mathbf{f}}^2 + \overline{\mathbf{f}''^2} \tag{II.10}$$

$$\overline{\mathbf{fh}} = \overline{\mathbf{fh}} + \overline{\mathbf{f''h''}} \tag{II.11}$$

• Moyennes au sens de Favre :

L'approche précédente, a été utilisée par Boussinesq et Reynolds pour établir les équations statistiques des fluides en écoulements turbulents et à masse volumique constante. Dans le cas des écoulements à masse volumique variant aléatoirement, cette approche fournit des équations dont la forme n'est pas simple et dont les expressions n'ont pas une signification physique claire. Favre [2], a proposé une autre méthode statistique pour les variables qui sont proportionnelles à la masse volumique. Cette méthode consiste, à prendre comme partie macroscopique de la variable f, la moyenne $\langle f \rangle$ pondérée par la masse. Ceci s'accomplit à l'aide de la décomposition suivante :

$$\mathbf{f} = \langle \mathbf{f} \rangle + \mathbf{f}' \tag{II.12}$$

Avec :

$$\langle f \rangle = \frac{1}{T} \frac{1}{\rho} \int_{0}^{T} \rho(t) f(t) dt = \frac{\overline{\rho f}}{\overline{\rho}}$$
 (II.13)

Dans cette approche, c'est pf' qui est centrée, puisqu'on a :

$$\overline{\rho f'} = 0 \tag{II.14}$$

Il s'ensuit que :

$$\overline{\mathbf{f}'} = -\frac{\overline{\rho' \mathbf{f}'}}{\overline{\rho}} \tag{II.15}$$

Cette approche de Favre est très pratique, car elle permet par l'élimination des corrélations de type $\rho f'$, d'obtenir une écriture simplifiée des équations de bilans d'écoulements turbulents de fluides compressibles.

II.2.2.2 Equations moyennées

L'application de la moyenne de Reynolds puis de Favre aux équations (II.1),(II.2), (II.3) et (II.6), nous fournit après quelques calculs intermédiaires [2], [3], que nous ne développerons pas ici, les équations suivantes :

Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_{i}} (\overline{\rho} \langle u_{i} \rangle) = 0$$
 (II.16)

Conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\langle \mathbf{u}_{i}\rangle) + \frac{\partial}{\partial x_{i}}(\overline{\rho}\langle \mathbf{u}_{i}\rangle\langle \mathbf{u}_{j}\rangle) = -\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{i}}(\overline{\tau}_{ij} - \overline{\rho}\langle \mathbf{u}_{i}'\mathbf{u}_{j}'\rangle)$$
(II.17)

Conservation de l'enthalpie totale :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\langle \mathbf{h}_{t}\rangle) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{i}}(\overline{\rho}\langle \mathbf{u}_{i}\rangle\langle \mathbf{h}_{t}\rangle) - \frac{\partial\overline{p}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{i}}(\lambda\frac{\partial\overline{T}}{\partial \mathbf{x}_{i}} + \overline{\rho}\langle \mathbf{u}_{i}'\mathbf{h}'\rangle + \overline{\rho}\frac{\langle \mathbf{u}_{i}'\mathbf{u}_{j}'\mathbf{u}_{j}'\rangle}{2}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{i}}(-\overline{\rho}\langle \mathbf{u}_{j}\rangle\langle \mathbf{u}_{i}'\mathbf{u}_{j}'\rangle + \overline{\mathbf{u}_{j}}\overline{\mathbf{\tau}_{ij}})$$
(II.18)

Lorsqu'on suppose le nombre de Mach basé sur les fluctuations de vitesse petit devant 1, on peut négliger les termes $\overline{\rho}\langle u_j \rangle \langle u'_i u'_j \rangle$ et $\overline{\rho} \langle \frac{u'_i u'_j u'_j}{2} \rangle$, représentant la transformation d'énergie cinétique en enthalpie, dans l'équation (II.18) [10].

A la place de (II.18) on obtient alors :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\langle \mathbf{h}_{t}\rangle) + \frac{\partial}{\partial x_{i}}(\overline{\rho}\langle \mathbf{u}_{i}\rangle\langle \mathbf{h}_{t}\rangle) - \frac{\partial\overline{p}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_{i}}(\lambda\frac{\partial\overline{T}}{\partial x_{i}} + \overline{\rho}\langle \mathbf{u}_{i}'\mathbf{h}'\rangle - \overline{\mathbf{u}_{j}\tau_{ij}})$$
(II.19)

Equation d'état :

L'équation d'état moyennée s'écrit :

$$\overline{\mathbf{p}} = \overline{\mathbf{p}} \mathbf{R} \langle \mathbf{T} \rangle \tag{II.20}$$

Les équations moyennées, ainsi obtenues, régissent le comportement de l'écoulement moyen. Cependant, à cause de leur non-linéarité, le système qu'elles forment n'est pas fermé. En effet, des inconnues additionnelles apparaissent sous forme de corrélations entre les caractéristiques des composantes fluctuantes. L'intérêt principal de la moyenne pondérée au sens de Favre est de minimiser le nombre de ces inconnues.

II.2.2.3 Prise en compte des flux turbulents

Les nouvelles inconnues, relatives aux corrélations $\langle u'_i u'_j \rangle$ et $\langle u'_i h' \rangle$, qui apparaissent dans les équations moyennées, représentent des flux de diffusion turbulente. Ces inconnues doivent être modélisées d'une manière où d'une autre pour assurer la fermeture du problème.

Le tenseur $\overline{\rho} \langle u'_i u'_j \rangle$, appelé tenseur de Reynolds, représente le transfert de quantité de mouvement dû au mouvement fluctuant. Ce transfert de quantité de mouvement, peut être interprété comme une tension de cisaillement additionnelle apportée par la turbulence. En 1877, Boussinesq proposa d'exprimer le tenseur de Reynolds d'une manière analogue à

celle des contraintes visqueuses τ_{ij} . Ainsi, il relia le flux turbulent de quantité de mouvement aux gradients de vitesse moyenne par l'intermédiaire d'un coefficient jouant le rôle d'une viscosité"tourbillonnaire" (hypothèse de transport par gradients) :

$$\overline{\rho}\left\langle u_{i}^{\prime}u_{j}^{\prime}\right\rangle = \mu_{t}\left(\frac{\partial\left\langle u_{i}\right\rangle}{\partial x_{j}} + \frac{\partial\left\langle u_{j}\right\rangle}{\partial x_{i}}\right) - \frac{2}{3}\mu_{t}\frac{\partial\left\langle u_{k}\right\rangle}{\partial x_{k}}\delta_{ij} - \frac{2}{3}\overline{\rho}\left\langle k\right\rangle\delta_{ij}$$
(II.21)

La présence du terme $-\frac{2}{3}\overline{\rho}\langle k \rangle \delta_{ij}$ permet d'assurer une cohérence dans l'écriture de l'expression II.21. En effet, la contraction des indices i et j dans cette expression fournit l'expression de $\langle k \rangle$ (énergie cinétique de turbulence qui sera notée k par la suite) suivante :

$$\langle \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{2} \langle \mathbf{u}'_{i} \mathbf{u}'_{i} \rangle$$
 (II.22)

 μ_t est une viscosité artificielle introduite par Boussinesq pour modéliser le tenseur de Reynolds. Celle-ci, appelée communément viscosité turbulente, n'est pas une propriété physique du fluide mais dépend de la structure de la turbulence en chaque point.

L'expression de μ_t diffère selon le modèle de fermeture adopté. Sa modélisation sera proposée par la suite.

L'inconnue $\overline{\rho}\langle u'_i h' \rangle$ dans l'équation de l'énergie représente la diffusion turbulente de l'enthalpie. Sa modélisation est basée couramment sur une analogie avec la loi de Fourier :

$$\overline{\rho} \left\langle \mathbf{u}_{i}^{\prime} \mathbf{h}^{\prime} \right\rangle = \frac{\mu_{t}}{\sigma_{h}} \frac{\partial \left\langle \mathbf{h} \right\rangle}{\partial x_{i}} \tag{II.23}$$

 σ_h est une constante assimilée à un nombre de Prandtl / Schmidt turbulent, celle-ci est prise en général égale à 1.

II.2.3 Modèles de fermeture

II.2.3.1 Viscosité tourbillonnaire

La modélisation du tenseur de Reynolds fait intervenir une nouvelle inconnue du problème, en l'occurrence la viscosité tourbillonnaire. Celle-ci doit être évaluée a son tour pour fermer le problème. L'usage de l'approximation de Boussinesq requiert la détermination de μ_t en fonction des échelles caractéristiques de la turbulence [3].

Prandtl [4] fut le premier qui a donné une formulation à cette viscosité tourbillonnaire. En effet, en s'inspirant de la théorie cinétique des gaz, il proposa que μ_t soit le produit d'une échelle de longueur et d'une échelle de vitesse :

$$\mu_{t} = \rho l_{m}^{2} \left| \frac{\partial \overline{u}}{\partial y} \right|$$
(II.24)

 $l_{\rm m}$ est la longueur de mélange de Prandtl, analogue au libre parcours moyen dans la théorie cinétique des gaz, et $V_{\rm m} = l_{\rm m} \left| \frac{\partial \overline{u}}{\partial y} \right|$ est une échelle de vitesse.

La longueur l_m dépend de la position dans l'écoulement, sa valeur est déterminée d'une manière empirique en fonction de la configuration considérée. Prandtl a obtenu certains succès en rendant l_m proportionnelle à la distance y de la paroi solide dans le cas des couches limites turbulentes. Von Karman [5], a amélioré la formulation de Prandtl en fournissant à la place de la longueur de mélange variable, une constante universelle κ déterminée à partir de données de profils de vitesse des écoulements dans un tuyau. Ce type de formulation a été largement utilisé dans les "modèles à zéro équation".

Par la suite Prandtl a essayé d'améliorer le calcul de l'échelle caractéristique de la vitesse en la rendant proportionnelle à une propriété scalaire de la turbulence, en l'occurrence l'énergie cinétique de turbulence k. On obtient ainsi la formule de Prandtl-Kolmogorov [6] suivante :

$$v_t \propto l\sqrt{k}$$
 avec $v_t = \frac{\mu_t}{\rho}$ (II.25)

Dans cette expression k est déterminée à partir de son équation de transport et l une échelle de longueur caractéristique de la taille des grosses structures qui reste à déterminer d'une manière plus ou moins empirique. Cette nouvelle formulation a été utilisée dans les modèles dits à une "seule équation" [7].

Le principal inconvénient des modèles basés sur une seule équation, réside dans le fait que le taux de dissipation de l'énergie turbulente est lié a la connaissance plus ou moins exacte d'une longueur caractéristique des mouvements à grande échelle [3]. Pour pallier ce problème on a eu recours aux modèles à deux équations, une pour k et l'autre pour une grandeur $Z = k^m l^n$, avec m et n deux constantes. Dans ces modèles, l'échelle de longueur doit être déterminée par une équation de transport du même type que celle de k. La longueur caractéristique qui a été adoptée par la suite par de nombreux chercheurs, notamment par Launder et Spalding [8] est le taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence défini par :

$$\varepsilon \propto \frac{k^{\frac{3}{2}}}{l} \tag{II.26}$$

La viscosité tourbillonnaire s'exprime alors de la manière suivante :

$$v_t \propto \frac{k^2}{\epsilon}$$
 (II.27)

k et ε sont déterminées à partir de leurs équations de transport.

II.2.3.2 Modèles de turbulence

Modèles à une équation

Comme on l'a déjà mentionné au paragraphe précédent, ces modèles reposent sur la détermination du coefficient de diffusion turbulent à partir d'une équation de bilan pour k. Cette équation peut s'obtenir soit directement de l'équation de Navier-Stockes, soit par contraction des indices i et j dans l'équation de transport pour les contraintes de Reynolds. Cette équation s'écrit [3] :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_{1}}(\overline{\rho}\langle u_{1}\rangle k) = \overline{-\overline{\rho}\langle u_{1}'u_{i}'\rangle} \frac{\partial\langle u_{i}\rangle}{\partial x_{1}} - \frac{\partial}{\partial x_{1}} \left[\frac{1}{2}\overline{\rho}\langle u_{1}'u_{i}'u_{i}'\rangle + \overline{u_{i}'p'}\delta_{il} - \overline{\tau_{il}u_{i}'}\right]$$
(II.28)
$$-\overline{u_{1}'} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_{1}} + \overline{p'} \frac{\partial u_{1}'}{\partial x_{1}} - \overline{\tau_{il}} \frac{\partial u_{i}'}{\partial x_{1}}$$

(II.28) ne peut pas être résolue, puisqu'elle présente à son tour de nouvelles inconnues sous forme de corrélations. Il est donc nécessaire d'imposer à nouveau des hypothèses de fermeture, autrement dit procéder à une modélisation de l'équation.

Essayons tout d'abord d'identifier les différents termes que comporte l'équation (II.29) : Les deux premiers termes de gauche représentent respectivement le taux de variation temporel et la convection par le champ de vitesse moyenne. Le terme 1 est le taux de production par le mouvement moyen. Le terme 2 correspond à la diffusion due au mouvement moléculaire et aux fluctuations de pression et de vitesse. Le terme 3 correspond aux effets de la compressibilité et le terme 4 représente la dissipation de l'énergie cinétique de turbulence par effet de viscosité.

La technique mise au point par Tennekes et Lumley [9], permettant d'évaluer les ordres de grandeur à fort nombre de Reynolds $\frac{k^{\frac{1}{2}}l}{v}$ nous amène à négliger le troisième terme diffusif. dans l'équation (II.28). La modélisation des différents termes retenus dans l'équation se fait d'une manière classique. Le lecteur peut consulter, à titre d'exemple, les références [3] et [10] pour les différents détails du calcul.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\,k) + \frac{\partial}{\partial x_{i}}(\overline{\rho}\,\langle u_{i}\rangle k) = \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\frac{\mu_{t}}{\sigma_{k}}\frac{\partial k}{\partial x_{i}}\right) + P_{k} - c_{d}\,\overline{\rho}\frac{k^{\frac{3}{2}}}{l}$$
(II.29)

avec :

$$P_{k} = \left[2\mu_{t} \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \frac{\partial \langle u_{i} \rangle}{\partial x_{i}} \delta ij \right) - \frac{2}{3} \overline{\rho} k \delta_{ij} \right] S_{ij}$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \langle u_{i} \rangle}{\partial x_{i}} + \frac{\partial \langle u_{j} \rangle}{\partial x_{i}} \right)$$
(II.30)

 σ_k est une constante assimilée à un nombre de Prandtl-Schmidt turbulent à déterminer. c_d est une constante de l'ordre de l'unité.

L'utilisation d'un modèle basé sur une équation de transport pour k, nécessite la définition d'une loi pour la longueur caractéristique l. Ceci rend très délicat l'emploi de ce type de modèle. Cependant, ces modèles sont préférables aux modèles de longueur de mélange car ils présentent l'avantage de prendre en compte, via l'équation pour k, l'histoire de la turbulence.

• Modèles à deux équations

Pour résoudre la difficulté que présentent les modèles à une équation, des modèles à deux équations sont apparus. Dans le paragraphe précèdent, on a montré que le coefficient de diffusion turbulent peut être déterminée à partir de deux caractéristiques scalaires de la turbulence définis par leurs équations de transport. On a aussi mentionné le fait que la longueur caractéristique qui a le plus de succès se trouve être le taux de dissipation défini par la relation (II.26). Nous présentons ici les deux équations données par le modèle classique $k - \varepsilon$ [8],[11]. Notons que l'équation pour k est la même que (II.29), sauf que les termes de dissipation ne sont plus modélisés mais regroupés sous la variable ε .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{\rho}\langle u_i \rangle k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + P_k - \overline{\rho}\epsilon$$
(II.31)

En ce qui concerne l'équation pour ε, la forme exacte obtenue à partir des équations de Navier-Stockes est très compliquée. Néanmoins, une analyse menée par Tennekes et Lumley [9] dans le cas des écoulements isovolumes, permet de négliger légitimement certains termes, lorsque le nombre de Reynolds est élevé.

Launder et Spalding [8] proposent une forme modélisée de cette équation, qui est la suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_{i}}(\overline{\rho}\langle u_{i}\rangle\varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\frac{\mu_{t}}{\sigma_{\varepsilon}}\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_{i}}\right) + \frac{\varepsilon}{k}\left(C_{\varepsilon_{1}}P_{k} - C_{\varepsilon_{2}}\overline{\rho}\varepsilon\right) + C_{\varepsilon_{3}}\overline{\rho}\varepsilon\frac{\partial\langle u_{i}\rangle}{\partial x_{i}}$$
(II.32)

 σ_{ϵ} est une constante assimilée à un nombre de Prandtl /Schmidt turbulent.

Les constantes C_{ϵ_1} , C_{ϵ_2} et C_{ϵ_3} sont déterminées d'une manière souvent empirique en fonction de la configuration de l'écoulement considéré.

Les équations (II.31) et (II.32) constituent ce que l'on appelle communément le modèle $k - \varepsilon$ standard. Celui-ci a été testé avec succès sur une gamme assez large d'écoulements à finalité industriel et s'est révélé d'une précision suffisante [12]. Cependant l'universalité des constantes qu'il met en oeuvre est mise en défaut par des écoulements très simples. A titre d'exemple, la valeur de C_{μ} déterminée à partir d'écoulements ou production et dissipation d'énergie cinétique de turbulence sont en équilibre, se trouve mal adaptée au calcul des écoulements faiblement cisaillés dans lesquels la dissipation l'emporte largement sur la production. De plus, l'un des points faibles du modèle $k - \varepsilon$ réside dans l'équation de transport pour ε . Celle-ci a une forme tellement complexe que seule une modélisation "sévère" est capable de fournir une forme exploitable de cette équation.

Dans le chapitre V on reviendra plus en détail sur les différentes tentatives pour améliorer la modélisation de l'équation pour ε . Cette modélisation doit prendre en compte la particularité du problème pour une meilleure prédiction de la turbulence subissant une compression dans une chambre fermée.

II.2.4 Conditions initiales et aux limites du problème

II.2.4.1 Conditions initiales

A l'instant t = 0, l'écoulement de fluide dans la chambre est considéré au repos. Les champs de vitesse et de quantité de mouvement sont initialisés à zéro. Les autres grandeurs : pression, température, énergie cinétique de turbulence...sont prises égales à des valeurs de référence sur tout le domaine de calcul. Ces valeurs seront fournies dans le chapitre III.

II.2.4.2 Conditions aux limites

Dans le cadre de ce travail, les conditions aux limites imposées sur les différentes frontières du domaine de calcul sont de type physique. Celles-ci sont exigées par les équations régissant l'écoulement et doivent prendre en compte la nature du problème : présence d'une paroi solide par exemple. Nous distinguons deux cas :

• Cas laminaire

- Condition de non glissement pour la vitesse : la vitesse du gaz est égale à la vitesse de la paroi.

- Paroi adiabatique pour la température : le flux de température à travers la paroi est nul.

Cas turbulent

Les conditions aux limites résultent du traitement analytique des équations de la couche limite thermique et turbulente qui se développe sur les différentes parois de la chambre de combustion de la MCR.

En outre, nous supposons nuls les flux des différentes quantités scalaires aux parois. L'exception est faite pour le flux de l'enthalpie pour lequel nous considérons deux cas :

1/- Paroi adiabatique : Le flux de chaleur $J_p = -\lambda \nabla T.n$ est nul.

2/- Paroi non adiabatique : Le flux de chaleur J_p est déterminé analytiquement (voir le détail du calcul en Annexe IV).

II.3 METHODES NUMERIQUES DE RESOLUTION

L'étude de l'écoulement que nous considérons, repose sur la résolution numérique du système d'équations (II.16-II.19,II.29) ou (II.16-II.19,II.31-II.32), selon le type de modèle de turbulence adopté. Ce système est spatio-temporel, donc la résolution numérique doit comprendre une double discrétisation en espace et en temps. Dans ce qui suit, nous relatons les différentes techniques numériques adoptées pour la résolution du problème.

II.3.1 Formulation mixte Eulerienne-Lagrangienne

La formulation Eulerienne-Lagrangienne (ALE : Arbitrary Lagrangian Eulerian) [13], [14], est utilisée généralement pour tenir compte de la déformation du domaine d'étude au cours du temps. Dans notre cas, elle permet de prendre en compte le déplacement de la surface supérieure du piston. De plus, cette formulation permet la décomposition de l'opérateur différentiel temporel dans les différentes équations à résoudre de manière à effectuer le calcul en deux étapes (voir Annexe II.1) :

- La première étape constitue une phase lagrangienne dans laquelle on prend en compte la contribution de différents termes sources (forces de pression, diffusion...) lorsqu'on suit le fluide dans son mouvement.

- La deuxième étape constitue une phase eulerienne pendant laquelle on prend en compte les termes convectifs lorsqu'on suit le déplacement relatif du maillage par rapport au fluide.

II.3.2 Discrétisation temporelle

La discrétisation temporelle adoptée est de type différences finies avec une approximation au premier ordre des dérivées temporelles. Le pas de temps est déterminé par :

 $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ avec n le numéro du cycle de calcul.

Cette discrétisation temporelle fait appel à la méthode A.L.E, ce qui signifie qu'un cycle de calcul se déroule, comme on le verra lors de la description du programme KIVA II [15], en trois phases. Deux phases A et B lagrangiennes et une phase C eulerienne.

II.3.3 Discrétisation spatiale

La discrétisation spatiale permet de remplacer les dérivées spatiales par des expressions algébriques dans le système à résoudre. La méthode de discrétisation adoptée ici est celle des volumes finis. Celle-ci consiste, une fois le domaine d'étude subdivisé en N volumes V_i (des hexaèdres dans le cas de KIVA II), à écrire les équations de bilan pour chacun de ces volumes limité par une surface Σ_i . On obtient ainsi un nouveau système d'équations dont la résolution nécessite des intégrations volumiques et surfaciques. Ces intégrations s'effectuent aisément lorsqu'on adopte les hypothèses suivantes:

1. La valeur de chaque grandeur G est considérée uniforme à l'intérieur d'un volume de contrôle.

2. Les grandeurs G sont considérées uniformes sur chaque portion de la surface \sum_i délimitant un volume V_i.

Le choix de la méthode des volumes finis est justifié par le double avantage qu'elle présente. En effet, outre le fait qu'elle préserve le caractère conservatif des équations, elle permet d'assurer un traitement commode des conditions aux limites.

II.3.4 Présentation du code de calcul KIVA II

II.3.4.1 Introduction

KIVA II (version améliorée du programme KIVA [16]) a été conçu au "Los Alamos National Laboratory" pour étudier les écoulements tridimensionnels, turbulents, instationnaires et multiréactifs de fluides compressibles. Son champ d'application est principalement la modélisation des écoulements dans les moteurs à combustion interne. Cependant, sa structure modulaire lui permet de s'adapter, moyennant quelques modifications, à d'autres applications (problèmes à entrée-sortie par exemple). Par rapport à sa première version, le programme KIVA II permet davantage d'efficacité numérique, une meilleure prédiction de la turbulence et constitue un outil à usages multiples.

Les équations résolues par KIVA II sont celles d'un écoulement turbulent de gaz parfait. La procédure de résolution est fondée sur la méthode A.L.E avec une discrétisation spatiale de type volumes finis qui assure le caractère conservatif des équations. La discrétisation temporelle, de type différences finies, est largement implicite et le pas de temps principal est calculé en se basant sur des critères de précision et non de stabilité. Ce qui permet d'utiliser des pas de temps assez larges et d'économiser ainsi le temps de calcul dans différents problèmes.

Pour des raisons évidentes de temps de calcul, nous utiliserons ce programme en version axisymétrique.

II.3.4.2 Maillage, stockage des éléments et choix de volumes de contrôle

Le domaine de calcul est partitionné en un nombre de cellules de forme hexaédrique quelconque. Les positions des sommets (ou noeuds) de ces cellules, peuvent être définies arbitrairement en fonction du temps. Le maillage peut donc se déformer et n'est pas contraint d'être orthogonal.

L'adoption de la technique du maillage décalé [17] permet de stocker les composantes du vecteur vitesse aux noeuds et les quantités scalaires aux centres des cellules. L'indice d'une cellule régulière est, par convention, celui de son sommet 4 (voir figure II.1). Ceci, a pour avantage de stocker les éléments dans des tableaux à une dimension et d'économiser ainsi de la place mémoire.

Le programme KIVA II utilise aussi pendant une portion d'un cycle de calcul, des vitesses définies aux centres des interfaces délimitant les cellules. Ceci, a pour but d'éviter toute interpolation, sur les composantes du vecteur vitesse ou la pression, lors de la discrétisation implicite de l'équation couplée vitesse-pression et de réduire ainsi la tendance de la méthode A.L.E à propager des modes parasites [18].

Les volumes de contrôle nécessaires pour l'intégration des différentes équations sont :

1/ Les cellules régulières (figure II.2) qui sont construites autour des quantités scalaires (p,
 p...) constituent des volumes de contrôle pour exprimer les bilans des différentes quantités scalaires.

2/ Les cellules permettant d'exprimer les bilans de quantité de mouvement, sont de deux natures :

- Les premières centrées sur les noeuds du maillage (figure II.2) permettent de déterminer les vitesses aux noeuds.

- Les secondes construites autour de chaque face d'une cellule régulière (figure II.3) permettent de déterminer les vitesses aux interfaces.



Figure II.1 : Type de cellule régulière du maillage



Figure II.2 : Volumes de contrôle



Figure II.3 : Volume de contrôle pour les vitesses aux interfaces

II.3.4.3 Procédures de résolution adoptées par KIVA II

KIVA II utilise une discrétisation temporelle de type différences finies qui fait appel à la méthode A.L.E. Ainsi, pour chaque pas de temps, le calcul s'effectue en trois différentes phases :

Phase A : Dans cette phase lagrangienne, on prend en compte les termes sources d'origine chimique, injection de gouttelettes liquides et les forces de volume. Le calcul se fait d'une manière totalement explicite. La nature de l'écoulement que nous considérons nous évitera de prendre en compte cette phase.

Phase B : Faisant aussi partie de la phase lagrangienne, elle est consacrée à la prise en compte implicite des termes de diffusion (masse, chaleur, turbulence et enthalpie) et des termes de pression dans les différentes équations de conservation.

Phase C : C'est la phase de transport convectif dans laquelle on calcule explicitement les termes convectifs dus au déplacement relatif du maillage par rapport au fluide.

II.3.4.3.1 Procédure de résolution pour les équations de la phase B

La discrétisation des équations de la phase B, largement implicite, utilise la méthode I.C.E "Implicit Continuous Eulerian" [19]. La contribution de la pression est déterminée séparément par l'intégration d'une équation de Poisson. Les équations couplées de cette phase sont résolues par une méthode itérative similaire à l'algorithme de SIMPLE "Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations" [17] avec un traitement individuel de chacune des équations par la méthode des résidus conjugués [20].

La procédure itérative est exécutée en deux pas (appelée "grande itération"):

Premier pas : On sélectionne une valeur p^B de la pression (valeur "prédictrice"). Le champ de pression étant "gelé", on calcule les autres quantités en utilisant les équations dans lesquelles on a discrétisé implicitement les termes de diffusion.

Deuxième pas : Les termes de diffusion obtenues au pas 1 sont "gelés" à leur tour. On détermine la valeur p^c de la pression (valeur "correctrice") en utilisant les équations dans lesquelles sont discrétisées implicitement les termes de pression.

A l'issue de ces deux pas, les valeurs des pressions "correctrice" et "prédictrice" sont comparées pour tester si la convergence est atteinte. Si la différence entre les deux valeurs excède la valeur tolérée, la pression "correctrice" redevient la nouvelle pression "prédictrice" et le calcul redémarre à nouveau au pas 1. Sinon, la valeur "correctrice" est retenue comme la bonne valeur de la pression pour le cycle considéré. Seules les équations de conservation de la quantité de mouvement, de l'énergie et de la masse de la phase B sont incluses dans "la grande itération". Les équations pour k et ε de la phase B sont résolues après "la grande itération" puisqu'elles sont faiblement couplées à la solution du champ de l'écoulement.

II.3.4.3.2 Quelques mots sur la procédure "PGS"[21]

La méthode implicite "I.C.E" utilisée par KIVA II et les procédures itératives auxquelles elle fait appel, présentent quelques problèmes liés à la vitesse de convergence dans le cas des écoulements à faible nombre de Mach. Pour remédier à ces problèmes, une procédure appelée P.G.S (Pressure Gradient Scaling) a été introduite dans le programme par Ramshaw et O'Rourke [21]. Cette procédure, qui s'apparente à la " transformation α " développée par O'Rourke et Bracco [22], consiste à augmenter artificiellement le nombre de Mach en introduisant un facteur $\frac{1}{\alpha^2}$ (α est appelé le paramètre pgs) dans le terme de pression de l'équation de quantité de mouvement.

Nous essayerons, dans ce qui suit, de présenter d'une manière succincte les fondements de cette procédure. Pour plus de détails, le lecteur pourra consulter la référence [21].

Soit (II.33-II.36) le système d'équations classiques qui régissent un écoulement compressible et instationnaire de fluide non réactif :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \qquad \qquad : \text{ conservation de la masse} \qquad (II.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + S \qquad : \text{ conservation de quantité de mouvement} \qquad (II.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i e) = -p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + Q \qquad : \text{ conservation d'énergie} \qquad (II.35)$$

$$p = f(\rho, e)$$
 : équation d'état (II.36)

avec :

$$S = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \text{ et } Q = \frac{\partial}{\partial x_i} (\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_j \tau_{ij})$$

Les termes S et Q n'apparaissent pas explicitement dans les équations parcequ'ils ne seront pas concernés par la méthode pgs.

Le principe de la procédure pgs consiste à décomposer le terme de pression dans les équations precédentes en deux parties distinctes, il vient :

$$\mathbf{p}(\mathbf{x},t) = \overline{\mathbf{p}}(t) + \mathbf{p}'(\mathbf{x},t) \tag{II.37}$$

 $\overline{p}(t)$ représente la partie moyenne de la pression, son expression est la suivante :

$$\overline{p}(t) = \frac{1}{V} \int_{V} p(x,t) dx$$
(II.38)

p'(x,t) est la partie fluctuante

La prise en compte de (II.37) fournit à la place de (II.33-II.36) le système suivant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0$$
(II.39)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p'}{\partial x_i} + S$$
(II.40)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i e) = -(\overline{p} + p')\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + Q$$
(II.41)

$$\overline{p} + p' = f(\rho, e) \tag{II.42}$$

Dans le cadre des écoulements à faible nombre de Mach |p'| est partout très petit devant \overline{p} . En partant de ce constat, les auteurs de la méthode pgs font la supposition suivante : si p'est petit alors on peut considérer que $\alpha^2 p'$ l'est aussi pourvu que les valeurs de α^2 ne soient pas très importantes. Il en résulte que pour certaines valeurs de α , $\overline{p} + p'$ peut être remplacée par $\overline{p} + \alpha^2 p' = \hat{p}$ et $\frac{\partial p'}{\partial x_i}$ par $\frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial \hat{p}}{\partial x_i}$ dans les équations (II.41) et (II.42) sans qu'il y ait d'effet majeur. le paramètre α est proche de l'unité et ne dépens que du temps, la manière dont il est déterminé dans KIVA II est proposée dans l'annexe II.2.

Ainsi, on obtient le système d'équations à résoudre avec la prise en compte de la procédure pgs :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0$$
(II.43)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_j u_i) = -\frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial \hat{p}}{\partial x_i} + S$$
(II.44)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i e) = -\hat{p}\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + Q \qquad (II.45)$$

$$\overline{p} + p' = f(\rho, e) \tag{II.46}$$

Le système d'équations ainsi obtenu n'a pas la même forme que le système (II.33-II.36) à cause de la présence du facteur $\frac{1}{\alpha^2}$ dans le terme de pression de l'équation II.34. Cependant, les deux systèmes ont la même solution à condition que les perturbations de pression soient petites (de type acoustique par exemple). Ceci est possible dans le cas d'écoulements dans les enceintes fermées (cas du probème que nous traitons) où régne une pression quasi uniforme et où les hétérogénéités de pression sont d'ordre acoustique.

L'avantage que présente la procédure pgs peut être démontré à partir d'une analyse linéaire conventionnelle des équations (II.44-II.46) avec des termes sources S et Q nuls. En effet, cette analyse montre que la méthode pgs a pour effet de réduire artificiellement la célérité du son d'un facteur α , alors que le nombre de Mach se voit augmenté artificiellement par le même facteur et par la même occasion le nombre de courant c $\frac{\Delta t}{\Delta x}$ se trouve réduit d'un facteur α . Il en résulte une convergence plus rapide du calcul itératif et donc une augmentation de l'efficacité numérique. Cependant, la condition fondamentale pour la validité de cette méthode réside dans le fait que $\alpha^2 p'$ doit être partout très petit devant \overline{p} . Autrement dit, il faut que l'écart absolu maximum entre \hat{p} et \overline{p} soit très petit devant 1. Cette condition est utilisée pour la sélection automatique de α dans le code Kiva II (voir annexe II.2).

II.3.4.3.3 Résolution des équations de la phase C

Pour le calcul des termes de convection dans les différentes équations, KIVA II utilise des schémas totalement explicites. Cependant, le calcul peut s'accomplir en un certain nombre de sous-cycles dont le pas de temps Δt_c est un sous-multiple du pas de temps Δt . Le "sous-cyclage" convectif permet de préserver le temps de calcul, puisque la phase C ne prend que 10% du temps de calcul de la phase lagrangienne.

Deux différents schémas de convection sont disponibles dans KIVA II :

• Le schéma P.D.C (Partial Donor Cell) [15-16]. Celui-ci permet moyennant le choix des valeurs de deux paramètres d'utiliser un schéma aux différences amont "Donor cell" et un schéma aux différences interpolées "Interpolated Donor Cell".

• Le schéma Q.S.O.U (Quasi Second Order Upwind) (voir annexe II.3). C'est un schéma aux différences finies du quasi second ordre. Celui-ci est plus précis qu'un schéma aux différences centrées puisqu'il présente l'avantage d'être fortement monotone. Il sera utilisé dans nos différents calculs.

Le transport convectif des quantités centrées est déterminé en utilisant les débordement de volumes δV_{α} dûs au déplacement des quatre sommets de chacune des faces α de leurs positions de la phase B (x_i^B) à leurs positions finales (x_i^{n+1}). Soit NS le nombre total de sous-cycles utilisés (NS = $\frac{\Delta t}{\Delta t_{\alpha}}$), nous avons :

$$V^{n+1} = V^{B} + NS \sum_{\alpha} \delta V_{\alpha}$$
(II.47)

Sachant que :

$$V^{B} = V^{n} + \Delta t \sum_{\alpha} (uA)_{\alpha}$$
(II.48)

Si δV_{α}^{t} est la variation du volume totale dûe au déplacement des sommets de leurs positions initiales x_{i}^{n} à leurs positions finales x_{i}^{n+1} , alors nous avons :

$$\delta V_{\alpha} = \delta V_{\alpha}^{t} \frac{\Delta t_{c}}{\Delta t} - (uA)_{\alpha}^{B} \Delta t_{c}$$
(II.49)

 $(uA)_{\alpha}$ représente le produit scalaire entre le vecteur vitesse u et le vecteur surface normal de la face α

Pour illustrer la manière dont est calculé le transport convectif des quantités centrées, nous donnons un exemple pour le cas de la masse volumique. Les autres quantités : l'énergie interne, l'énergie cinétique turbulente et l'échelle de longueur de turbulence subissent pratiquement le même sort. La masse volumique ρ^{ns} après ns sous-cycles de calcul convectif est donnée par :

$$\rho_{ijk}^{ns} V_{ijk}^{ns} = \rho_{ijk}^{ns-1} V_{ijk}^{ns-1} + \sum_{\alpha} (\rho^{ns-1})_{\alpha} \,\delta V_{\alpha} \tag{II.50}$$

avec :

$$V_{ijk}^{ns} = \left[nsV_{ijk}^{n+1} + (NS - ns)V_{ijk}^{B} \right] / NS$$
(II.51)

La valeur initiale de ρ est prise à chaque fois égale à sa valeur à la fin de la phase lagrangienne B :

$$(\rho_0)_{ijk} = \rho_{ijk}^{B}$$
(II.52)

La détermination de $(\rho^{ns-1})_{\alpha}$ fait appel au schéma de convection utilisé.

Après la fin du "sous-cyclage" convectif, les valeurs finales des différentes quantités centrées sont égales à leurs valeurs après les NS sous-cycles.

Le transport convectif de la quantité de mouvement dans le sous-cycle ns est calculé à partir des incréments de masse dûs au déplacement de chacune des faces de la cellule de quantité de mouvement.

L'incrément de masse dû au déplacement de la face α d'une cellule de quantité de mouvement est défini par :

$$(\delta M')_{\alpha}^{ns-1} = \frac{1}{8} \left(\rho_o^{ns-1} \delta V_o - \rho_i^{ns-1} \delta V_i \right)$$
(II.53)

où les indices o et i représentent les faces de la cellule régulière situées de part et d'autre de la face α .

Il s'ensuit que la masse totale convectée s'écrit :
$$(M')_{ijk}^{ns} = (M')_{ijk}^{ns-1} + \sum_{\alpha} (\delta M)_{\alpha}^{ns-1}$$
(II.54)

Les incréments de masse $\delta M'_{\alpha}$ correspondant aux vingt quatre faces de la cellule de quantité de mouvement sont additionnés par groupe de quatre pour obtenir le flux de masse (δM^{c}_{β}) à travers les six faces de la cellule de quatité de mouvement.

Le flux de la quantité de mouvement est alors calculé par :

$$(M')_{ijk}^{ns} u_{ijk}^{ns} = (M')_{ijk}^{ns-1} u_{ijk}^{ns-1} + \sum_{\alpha} (\delta M_{\beta}^{c})^{ns-1} u_{\beta}^{ns-1}$$
(II.55)

Les valeurs de u_{β}^{ns-1} sont évaluées par le schéma de convection adopté.

II.3.4.4 Conditions de précision et de stabilité

On a pu constater dans les paragraphes précédents que KIVA II, utilise un schéma implicite pour les termes de diffusion et un "sous-cyclage" convectif pour les termes de convection. Par conséquent, le pas de temps principal Δt n'est théoriquement pas restreint au critère de stabilité. En revanche, on peut définir certaines conditions de convergence (des schémas itératifs) et de précision sur lesquelles sera basée la sélection automatique de Δt dans le code. Cette sélection est loin d'être universelle, puisqu'il existe plusieurs autres conditions de précision et de convergence qui n'ont pas été prises en compte (voir la référence [15] pour plus de détail).

Le pas de temps Δt_c de la convection doit, par contre, satisfaire la critère de stabilité de Courant Friedrich Lewy (CFL) [23] pour garantir la stabilité du schéma explicite. Cette condition s'écrit :

$$u_r \frac{\Delta t_c}{\Delta x} < 1 \tag{II.56}$$

où u, désigne la vitesse relative du maillage par rapport au fluide.

Dans le cas d'un maillage rectangulaire le critère (II.56) s'écrit :

$$\Delta t_{c} \le \min\left\{\frac{\Delta x}{|u|}, \frac{\Delta y}{|v|}, \frac{\Delta z}{|w|}\right\}$$
(II.57)

avec u, v et w les composantes du vecteur vitesse.

Cette condition empêche le flux de volume de devenir plus grand que le volume lui même dans toutes les directions.

Dans KIVA II la condition II.57 généralisée à une maille arbitraire, se traduit par la relation suivante :

$$\Delta t_{c}^{n} \leq \Delta t_{c}^{n-1} \min \frac{V_{ijk}}{\left|\delta V_{\alpha}\right|}$$
(II.58)

où :

 V_{ijk} est le volume total d'une cellule typique (i,j,k) et δV_{α} est le débordement du volume dû au déplacement d'une face α de la cellule (i,j,k) pendant le pas de temps Δt_{c}^{n-1} .

CONCLUSION PARTIELLE

Dans ce chapitre, nous avons présenté dans un premier temps et d'une manière classique les équations générales qui régissent un écoulement de fluide non réactif dans la chambre de combustion de la machine à compression rapide. Pour étudier la turbulence générée suite à la compression du fluide, nous avons considéré quelques possibilités de fermeture. Ces possibilités seront revues et discutées avec davantage de détails dans le chapitre V.

Dans un second temps, nous avons exposé les possibilités numériques pour la résolution des équations. En particulier, nous avons tenté de présenter les principales caractéristiques et les différents schémas numériques proposés par le programme de calcul KIVA II. Le choix de ce dernier pour traiter notre problème est parfaitement justifié; sachant que KIVA II a été conçu sur une base de départ ayant pour objectif l'étude des écoulements de fluides dans des chambres fermées, en particulier les écoulements dans les moteurs à combustion interne.

Références bibliographiques

[1] J. COUSTEIX

"Turbulence et couche limite" Cepadues-editions, (1989).

[2] A. FAVRE, L. KOVASZNAY, R. DUMAS, J. GAVIGLIO & M. COANTIC "La turbulence en mécanique des fluides" Gauthier-Villars, (1976).

[3] D. VANDROMME

"Contribution à la modélisation et la prédiction d'écoulements turbulents à masse volumique variable"

Thèse de doctorat d'état, Université de Lille, (1983).

[4] L. PRANDTL

"Uber die ausgebildete turbulenz" Z. Angew. Math. Mech, vol 5, pp : 136-139, (1925).

[5] TH. VON KARMAN

"Mechanische ahnlichkeit und turbulenz" Nachr. Ges. Wiss. Gottingen, Math. Phys. Klasse 58, (1930).

[6] A.N. KOLMOGOROV

"Equations of turbulent motion of incompressible fluid" Izr. Akad. Nank SSSR, Seria fizichiska VI, 56., (1942).

[7] P. BRADSHAW, D.A. FERRISS & N.P. ATWELL

"Calculation of boundary layer development using the turbulent energy equation" J.F.M., 28, P. 593., (1967).

[8] B.E. LAUNDER & B. SPALDING

"The numerical computation of turbulent flows" Comp. Meth. in Applied Mech. Eng., Vol3, (1974).

[9] H. TENNEKES & J.L. LUMLEY"A first course on turbulence" MIT Press, (1971).

68

[10] **R. BORGHI**

"Réactions chimiques en milieu turbulent" Thèse de doctorat d'état, Université de Paris VI, (1978).

[11] S.H. EL TAHRY

"k- ϵ equation for compressible reciprocating engines" Journal of Energy, Vol 7, N° 4, pp : 345-353, (1983).

[12] W. RODI

"Turbulence models for practical applications in : introduction to the modelling of turbulence"

Von Karman Institute for fluid dynamics, (1985).

[13] C.W. HIRT, A.A. AMSDEN & J.L. COOK

"An arbitrary Lagrangian-Eulerian method for all flows speeds" J. Compt. Phys., 14, pp : 227-253, (1974).

[14] A.A. AMSDEN & H.M. RUPPEL

"SALE-3D : A simplified ALE computer program for calculating three dimensional fluid flow"

Los Alamos National Laboratory report LA-8905, (1981).

[15] A.A. AMSDEN, P.J. O'ROURKE & T.D. BUTLER

"KIVA II : A computer program for chemically reactive flows with spray" Los Alamos National Laboratory report LA-11560-MS, (1989).

[16] A.A. AMSDEN, J.D. RAMSHAW, P.J. O'ROURKE & J.K. DUKOWITCZ

"KIVA : A computer program for two and three-dimensional fluid flows with chemical reactions and fuel sprays"

Los Alamos National Laboratory report LA-10245-MS, (1985).

[17] S.V. PATANKAR

"Numerical heat transfert and fluid flow" Himesphere Publishing Coperation, Washington D.C., (1980).

[18] A. BRANDT, J.E. DENDY & H. RUPPEL

"The multigrid method for semi-implicit hydrodynamic codes" J. compt. phys., 34, pp : 348-370, (1980).

[19] F.H. HARLOW & A.A. AMSDEN

"Numerical calculation of almost incompressible flow"

J. Compt. Phys., 3, pp : 80-93, (1986).

[20] P.J. O'ROURKE & A.A. AMSDEN

"Implementation of a conjugate residual iteration in the KIVA computer program" Los Alamos National Laboratory report, LA-10849-MS, (1986).

[21] J.D. RAMSHAW, P.J. O'ROURKE & L.R. STEIN

"Pressure gradient scaling method for fluid flow with nearly uniform pressure" J. Compt. Phys., 58, pp : 361-376, (1985).

[22] P.J. O'ROURKE & F.V. BRACCO

"Two scaling transformations for the numerical computation of multidimensional unsteady laminar flames"

J. Compt. Phys., 33, pp : 185-203, (1979).

[23] R. COURANT, K.O. FRIEDRICHS & H. LEWY

"Uber die Parprillen Disserenzengleichungen der Mathematischn Physics" Mathematische Annulen Vol. 100, pp : 32-74

CHAPITRE III

ÉTUDE NUMÉRIQUE D'ÉCOULEMENTS NON RÉACTIFS DANS LA CHAMBRE DE COMBUSTION DE LA MCR

CHAPITRE III

ÉTUDE NUMÉRIQUE D'ÉCOULEMENTS NON RÉACTIFS DANS LA CHAMBRE DE COMBUSTION DE LA MCR

III.1 INTRODUCTION

L'étude de l'écoulement de fluide considéré, dont la formulation mathématique a été proposée au chapitre II, est basée sur la résolution numérique des équations mathématiques qui le régissent. Le programme KIVA II, modifié pour être adapté à la configuration de la MCR, assure cette résolution.

La chambre de combustion de la MCR présente l'avantage d'une axisymétrie parfaite, ceci nous a permis d'utiliser la version modifiée de KIVA II en configuration bidimensionnelle, dans un plan représentant le déplacement du piston et la moitié du rayon.

Dans le but d'éviter l'attribution de toute source d'erreurs aux modèles de turbulence utilisés ou à une viscosité turbulente trop importante, et pour tester la performance des schémas numériques adoptés, nous avons effectué un premier test en laminaire.

Pour prédire les caractéristiques de la turbulence qui régne dans la chambre de combustion, nous avons testé deux modèles à une et deux équations (sub-grid Scale : Sous-mailles et le $k - \varepsilon$ standard). Une comparaison des résultats issus de ces deux modèles sera proposée.

Nos différents calculs ont été réalisés sur l'IBM 3090 du C.I.R.C.E (Centre Inter Régional du Calcul Scientifique), sur lequel la version modifiée de KIVA II a été implantée.

III.2 LE MOUVEMENT DU PISTON

Le mouvement du piston-compresseur dans la chambre de combustion de la machine s'effectue de la manière suivante : à l'instant initial t_0 le piston se trouve au point mort bas (PMB), la compression du mélange gazeux à étudier s'effectue en un temps t_c (temps de compression) imposé par la pression qui régne dans le canon à air. A la fin de sa course, le piston est immobilisé progressivement au point mort haut (PMH).

La simulation numérique du mouvement du piston nécessite le calcul de son déplacement et de sa vitesse en fonction du temps. A cet effet, nous avons considéré les deux possibilités suivantes :

a/ Les profils de position et de vitesse moyennés

Dans ce cas, la vitesse du piston $v_p(t)$ est considérée comme constante dans le temps, sa valeur est calculée à partir de la course du piston l_c et du temps de compression t_c par l'expression :

$$V_{\mathbf{p}}(t) = \frac{l_{\mathbf{c}}}{t_{\mathbf{c}}}$$
(III.1)

La position du piston en fonction du temps est alors donnée par $z(t) = V_p t$.

Il est évident que le cas d'une vitesse constante du piston, n'est pas réaliste. Cependant, on l'a retenu dans certains cas dans le seul but de confronter nos résultats à ceux d'une autre équipe travaillant sur le même problème et utilisant ce type de loi pour la vitesse du piston [2].

b/ Les profils de position et de vitesse interpolés

A l'aide de la méthode expérimentale qui permet de mesurer le déplacement du piston en fonction du temps (voir chapitre I § I.2.4.3), nous constituons un fichier de données composé de différentes positions z_i du piston pour un ensemble de temps t_i entre le début et la fin de la compression. Pour déterminer la position z(t) du piston à un instant t quelconque de la compression, nous adoptons la méthode d'interpolation "cubic splines" [1] (voir annexe III).

Le profil de vitesse est déterminé de la manière suivante : à partir du fichier de données expérimentales des positions du piston $z_i(t_i)$, on calcule les dérivées $w_i(t_i)$ en utilisant des relations de type Gregory-Newton [3] (L'utilisation de ces relations est justifiée par le fait que le pas de temps entre deux mesures expérimentales successives est constant). A ce sujet, nous avons adopté des différences centrées pour avoir une approximation au second ordre et donc une meilleure précision. Ainsi, nous constituons un fichier de vitesses w_i calculées aux instants t_i . A partir de ce fichier et à l'aide de la méthode d'interpolation "cubic splines", nous

obtenons un profil de vitesse permettant de connaitre la vitesse du piston à chaque instant de la compression.

III.2.1 Introduction dans le code

KIVA II dispose d'un sous programme permettant de calculer, pour chaque pas de temps, la position et la vitesse du piston dans le cylindre d'un moteur ordinaire. Pour prendre en compte, le mouvement particulier du piston-compresseur de la MCR, nous avons remplacé ce sous-programme par deux modules. Le premier permet de constituer un fichier de valeurs, qui résultent d'une dérivation par rapport au temps de la fonction position z(t) suivie d'un "lissage" à l'aide de paraboles qui approchent par les moindres carrés cinq points consécutifs [3]. Le deuxième permet, à l'aide d'une interpolation, de fournir les valeurs de la position et de la vitesse du piston à tout instant de la compression.

La méthode de calcul utilisée permet de prendre en compte le temps de compression souhaité. Le pas de temps principal est choisi pour assurer d'une part la convergence du calcul et d'autre part l'arrivée du piston au PMH avec une vitesse nulle.

Les temps de compression retenus pour les différents calculs se situent dans l'intervalle [20, 100 ms], correspondant à une bonne gamme de données expérimentales.

III.2.2 Résultats et discussions

Sur les figures III.1 et III.2, nous représentons les profils calculés de position et de vitesse du piston en fonction du temps. Ces profils sont obtenus pour différents temps de compression. Nous constatons que, pour un temps de compression assez lent (cas de 47 où 86 ms), le piston a tendance à garder une vitesse constante en début de compression, pendant un intervalle de temps qui n'est pas négligeable (14 ms pour 47 ms et 24 ms pour 86 ms). Cependant, lorsque la compression est plus rapide (cas de 29 ms) le piston subit dès le départ une accélération. Dans les cas de 29 et 47 ms la décélération du piston survient de 2 à 3 ms avant son arrivée au PMH, alors que dans le cas 86 ms la décélération du piston commence à 6 ms avant le PMH.

Il faut noter, que la détermination de la vitesse du piston à l'approche du PMH ne se fait pas d'une manière très précise. En effet, il aurait fallu connaitre, à cet endroit, les positions du piston pour un pas de temps très petit pour espérer obtenir un calcul beaucoup plus précis de la vitesse. Ceci n'était pas possible dans la mesure où les données expérimentales dont nous disposions résultent d'un pas de temps de mesure assez large (1 ms). On verra dans le chapitre IV, que cette imprécision dans le calcul de la vitesse du piston à l'approche du point mort haut influence, d'une certaine manière, le calcul de la pression qui règne dans la chambre.



Figure III.1 : Les profils calculés de position du piston-compresseur pour les temps de compression 29 ms, 47 ms et 86 ms



Figure III.2 : Les profils calculés de vitesse du piston-compresseur pour les temps de compression 29 ms, 47 ms et 86 ms

III.3 DIFFERENTS TESTS DE VALIDATION

III.3.1 Conditions de calcul

Nous étudions l'écoulement d'un fluide (azote pur) considéré initialement homogène, au repos et soumis à une compression axiale pendant un temps t_c . Le pas de temps initial est pris égal à 5.10^{-5} s. Pendant les phases de compression et de post-compression, le pas de temps principal et le pas de temps de la convection sont déterminés automatiquement par le code (voir chapitre II § II.2.2.4). Néanmoins, lorsque le piston approche le PMH, le pas de temps principal est contrôlé durant un nombre de cycles de manière à éviter tout phénomène de rebond.

II.3.1.1 Conditions initiales

Les conditions initiales de l'écoulement, adoptées pour les différents cas tests, sont rapportées dans le tableau III.1. En principe, la valeur de l'énergie cinétique de turbulence initiale k_0 devrait être nulle, puisque le mélange fluide admis dans la chambre est supposé suffisamment au repos avant d'être comprimé. Cependant, pour des raisons purement numériques liées à un bon déroulement du calcul nous la supposons très faible et nous lui attribuons une valeur représentant un pourcentage de l'énergie cinétique basée sur la vitesse moyenne V_p du piston. Une étude de l'influence, de la valeur attribuée à k_0 , sur l'évolution de la turbulence dans la chambre de combustion sera proposée dans le chapitre V. Par ailleurs, nous supposons qu'initialement les différentes parois de la chambre de combustion sont à la même température que celle du fluide.

Champ de vitesse	u = w = 0
Température	$T_0 = 355 \text{ K}$
Pression	$P_0 = 0.4 \text{ bar}$
Masse volumique	$\rho_0 = 0.38 \text{kg} / \text{m}^3$
Energie cinétique turbulente	$k_0 = 0.02 V_p^2$

Tableau III.1 : Conditions initiales retenues pour les différents cas tests

II.3.1.2 Conditions aux limites

Les conditions aux limites pour l'écoulement sont déduites du traitement de la couche limite thermique et turbulente se développant sur une paroi solide; celles-ci sont explicitées dans l'annexe IV. Les flux des différentes quantités scalaires à travers la paroi sont nuls, à l'exception de l'enthalpie pour laquelle on considère les deux cas suivants :

- cas adiabatique : le flux de chaleur à travers la paroi est nul
- cas non-adiabatique : le flux de chaleur est déduit du calcul de la couche limite.

Les résultats qui seront présentés dans ce paragraphe III.3 ont été obtenus en adoptant le maillage uniforme préconisé dans KIVA II et dont les caractéristiques, dans notre cas, sont reportées dans le tableau III.2 et la figure III.3.

Nombre de cellules en r	14
Nombre de cellules en z	20 pendant la compression
Nombre de cellules en z	10 en post-compression

Tableau III.2 : Type de maillage uniforme utilisé



III.3.2 Influence de la procédure "pgs" sur le calcul

Lors de la description de la procédure pgs au chapitre II (§ II.3.4.3.2), nous avons mentionné le fait que la validité de cette méthode dépend fondamentalement du rapport entre les fluctuations de pression et la pression moyenne qui doit être très petit devant 1 :

$$\frac{\delta p_{\alpha}}{\overline{p}} \le v_{op} \tag{III.2}$$

avec v_{op} une valeur optimale très petite devant 1.

La condition III.2, dans laquelle v_{op} a été fixée à 0.04, constitue un critère qui permet de déterminer la valeur du paramètre α dans le code KIVA II (voir annexe II.2).

Les perturbations de pression dans le cas de l'écoulement que nous traitons sont liées à la propagation des ondes acoustiques et à la structure "quasi-stationnaire" du champ de vitesse. Celles-ci sont négligeables devant la pression moyenne qui règne dans la chambre de combustion à chaque instant (la condition III.2 est donc satisfaite).

La procédure "pgs" a un double objet :

1 Elle permet d'accélerer la convergence de la résolution de l'équation fournissant la pression en "éliminant" les ondes de pression.

2 Elle fournit à chaque instant la pression moyenne dans la chambre de combustion, tout en sauvegardant le terme "gradp" permettant que l'équation de continuité quasi-stationnaire soit satisfaite.

Pour évaluer l'efficacité de cette méthode, nous avons fait varier dans trois simulations le paramètre v_{op} (0.04, 0.02 et 0.01). Pour chacune de ces valeurs nous présentons les valeurs numériques de la pression (tableaux III.3-III.5) et de la température (tableaux III.6-III.8) en fin de compression ainsi que l'évolution radiale de la vitesse axiale au centre de la chambre de combustion en fin de compression (figure III.4).

En examinant les valeurs numériques fournies dans les tableaux III.3-III.5, nous constatons que c'est pour $v_{op} = 0.01$ que le champ de pression est le plus uniforme. De plus, bien que les gradients de pression, liés directement au champ des vitesses quasi-stationnaires $\frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial p}{\partial x_i}$, soient sensiblement différents ils sont, cependant, du même ordre de grandeur. Nous avons aussi constaté que les valeurs moyennes spatiales de la pression sont identiques dans les trois cas.

En ce qui concerne l'évolution du champ de température en fonction du paramètre v_{op} , nous constatons dans les tableaux III.6-III.8 une répartition quasi voisine dans les trois cas. Ceci peut s'expliquer par le fait qu'à faible nombre de Mach, le terme $-p \frac{\partial u_i}{\partial x_i}$ dans l'équation

de l'enérgie (II.35, chapitre II) est négligeable devant le terme Q correspondant au transfert de chaleur et à la diffusion visqueuse. Ce terme constitue en effet dans ce cas l'apport principal pour la détermination de la température. Cet apport est d'autant plus important que la température moyenne dans la chambre de combustion est élevée.

Les champs de vitesse sont quasiment les mêmes pour les trois valeurs de v_{op} . Pour s'en rendre compte nous représentons sur la figure III.4 l'évolution radiale de la vitesse axiale de l'écoulement en fin de compression.

En conséquence, dans le cadre de notre travail le choix de $v_{op} = 0.01$ sera adopté pour les différents calculs réalisés. Nous éviterons délibéremment, par la suite, de parler des valeurs locales de la pression, puisque celles-ci dépendent fondamentalement du choix de la valeur de v_{op} . Il en résulte que seule une moyenne spatiale de la pression, évoluant en fonction du temps uniquement, sera prise en compte. Par contre, les champs de température et de vitesse que nous considérons comme satisfaisants seront présentés.

7

9.15 9.15 9.15 9.13 9.12 9.11 9.10 9.09 9.08 9.07	9.16 9.15 9.15 9.13 9.12 9.11 9.10 9.09 9.09 9.09	9.16 9.15 9.14 9.12 9.11 9.10 9.10 9.09 9.09	9.16 9.15 9.13 9.12 9.11 9.10 9.10 9.09 9.09	9.16 9.15 9.13 9.12 9.11 9.10 9.10 9.10 9.10	9.16 9.15 9.13 9.12 9.11 9.10 9.10 9.10 9.10	9.16 9.15 9.13 9.12 9.11 9.10 9.10 9.09 9.10	9.16 9.15 9.13 9.12 9.11 9.09 9.09 9.09	9.16 9.15 9.13 9.12 9.11 9.10 9.09 9.08 9.08	9.16 9.15 9.13 9.12 9.11 9.09 9.08 9.08 9.08	9.16 9.15 9.13 9.12 9.11 9.09 9.08 9.07 9.07	9.16 9.15 9.14 9.12 9.11 9.09 9.08 9.07 9.07	9.16 9.15 9.14 9.12 9.11 9.09 9.08 9.08 9.08	9.16 9.15 9.14 9.13 9.11 9.10 9.08 9.08 9.09	paroi latérale 😪
					p	iston Z	۹ 							

Tableau III.3 Champ de pression en fin de compression, cas $v_{op} = 0.01$

9.19 9.19 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.10 9.07 9.03	9.20 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.10 9.07 9.03	9.20 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.10 9.07 9.04	9.20 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.10 9.07 9.04	9.20 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.10 9.07 9.04	9.20 9.19 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.10 9.07 9.04	9.20 9.19 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.10 9.07 9.04	9.20 9.20 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.10 9.07 9.04	9.20 9.20 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.10 9.07 9.03	9.20 9.20 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.10 9.07 9.03	9.20 9.20 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.10 9.07 9.03	9.20 9.20 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.10 9.07 9.03	9.20 9.20 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.11 9.07 9.04	9.20 9.20 9.19 9.18 9.17 9.15 9.13 9.11 9.08 9.04	paroi latérale 😒
	piston 🖉													

Tableau III.4 Champ de pression en fin de compression, cas $v_{op} = 0.02$

9.37 9.37 9.37 9.36 9.37 9.37 9.37 9.37 9.36 9.36 9.36 9.36 9.36 9.35 9.36 paroi latérale 9.35 9.35 9.35 9.35 9.35 9.35 9.35 9.35 9.34 9.34 9.34 9.34 9.34 9.32 9.32 9.32 9.32 9.31 9.31 9.31 9.31 9.31 9.31 9.31 9.31 9.31 9.31 9.27 9.27 9.27 9.27 9.26 9.26 9.26 9.26 9.26 9.26 9.26 9.26 9.26 9.26 9.21 9.21 9.20 9.20 9.20 9.20 9.20 9.20 9.20 9.20 9.20 9.20 9.20 9.20 9.13 9.14 9.13 9.13 9.13 9.13 9.13 9.13 9.13 9.13 9.13 9.13 9.13 9.13 9.05 9.05 9.05 9.05 9.05 9.05 9.05 9.05 9.05 9.05 9.05 9.05 9.05 9.05 8.96 8.97 8.96 8.96 8.96 8.96 8.96 8.96 8.96 8.96 8.96 8.96 8.96 8.96 £ 8.87 8.88 8.87 8.87 8.87 8.87 8.87 8.87 8.87 8.87 8.87 8.87 8.87 8.87 8.77 8.77 8.78 8.80 8.78 8.78 8.78 8.77 8.77 8.77 8.77 8.77 8.78 8.78 — piston 🖉



Les conditions de calcul pour les trois tableaux sont : compression non adiabatique de 47 ms, maillage M1, modèle de turbulence k-ɛ standard avec loi de paroi, vitesse du piston expérimentale

paroi latérale 😪

805.1	804.8	804.5	804.2	804.1	804.1	804.1	803.9	803.9	803.7	803.7	803.8	796.9	777.6
809.3	809.1	808.9	808.7	808.6	808.4	808.3	808.1	807.9	807.5	806.7	805.0	800.7	782.2
809.3	809.3	809.2	809.2	809.1	809.0	808.9	808.7	808.5	808.0	807.1	805.3	800.8	781.7
809.2	809.2	809.1	809.1	809.1	809.0	808.8	808.7	808.4	807.9	806.9	805.0	800.3	779.5
809.0	809.0	809.0	808.9	808.9	808.8	808.7	808.5	808.2	807.6	806.7	804.7	799.6	776.9
808.8	808.8	808.8	808.8	808.8	808.8	808.8	808.5	808.1	807.4	806.3	804.2	798.8	774.2
808.6	808.7	808.8	808.9	809.2	809.4	809.4	809.0	808.0	806.8	805.5	803.3	797.4	771.3
808.7	808.9	809.2	809.7	810.4	811.0	810.9	809.3	806.6	804.0	802.5	801.0	795.1	767.7
809.5	810.0	810.7	811.7	813.0	814.7	812.0	806.3	798.9	793.8	792.1	791.2	785.6	762.8
809.7	810.5	811.6	812.8	814.1	813.6	803.5	791.7	777.4	770.1	766.5	762.0	755.3	744.6
							-						
					-	intam /							

Tableau III.6 Champ de température en fin de compression, $v_{op} = 0.01$

	808.3	808.2	808.2	808.1	808.0	807.9	807.7	807.5	805.5	805.7	804.0 805.3	799.4 799.1	781.7 781.2
808.2	808.2	808.1 808.0	808.1 807.9	808.1 807.9	808.0 807.8	807.8 807.7	807.7 807.5	807.4 807.2	806.9 806.6	806.9 805.7	805.0 804.7	798.6 798.3	779.0 776.0
808.1 808.2	808.2 808.1 808.2	808.2 808.2 808.2	808.2 808.3 808.7	808.2 808.2 810.0	808.2 808.4 810.0	808.2 808.4 809.1	807.9 808.5 806.5	807.1 807.0 803.8	806.4 806.8 803.6	805.3 805.1 802.1	804.0 803.3 800.0	796.4 794.1	771.0 768.0
808.5 809.0	809.0 809.5	810.1 810.6	811.1 811.8	812.0 813.1	814.0 813.1	812.0 803.9	807.5 796.1	800.5 781.0	795.1 772.1	792.0 767.5	791.0 763.0	785.0 756.3	763.0 745.0

Tableau III.7 Champ de température en fin de compression, $v_{op} = 0.02$

809.1	809.4	809.2	808.8	808.5	808.2	808.1	808.1	808.2	808.2	807.8	806.7	803.4	780.4
813.	813.6	813.4	813.3	813.2	813.1	813.1	813.2	813.2	813.1	812.6	811.3	807.4	784.2
813.0	813.0	813.0	813.0	813.0	813.0	813.0	813.0	812.9	812.7	812.2	810.9	806.9	783.2
812.0	812.0	812.0	812.0	812.0	812.0	812.0	812.0	811.9	811.7	811.2	809.8	805.7	780.6
810.	810.7	810.7	810.7	810.7	810.7	810.7	810.7	810.6	810.4	809.8	808.5	804.1	777.2
809.3	809.3	809.3	809.3	809.4	809.5	809.6	809.5	809.3	808.8	808.2	806.8	802.1	773.4
807.4	8 807.9	808.1	808.3	808.6	808.9	809.0	808.5	807.5	806.5	805.9	804.7	799.5	769.1
806.	8 807.1	807.5	808.1	808.9	809.6	809.0	806.5	803.1	801.0	800.9	800.9	795.7	764.0
806.	807.5	808.6	809.8	811.1	811.0	806.8	798.1	790.1	787.4	788.3	788.8	783.1	757.5
807.1	7 808.6	810.2	811.5	812.1	807.7	793.5	775.3	765.0	762.2	759.6	755.1	748.7	737.9



Les conditions de calcul pour les trois tableaux sont : compression non adiabatique de 47 ms, maillage M1, modèle de turbulence k-ɛ standard avec loi de paroi, vitesse du piston expérimentale

I

7.



Figure III.4 Evolution radiale de la vitesse axiale au centre de la chambre de combustion en fin de compression

compression non adiabatique de 47 ms, maillage M1, modèle de turbulence k-ε avec loi de paroi, vitesse du piston expérimentale.

III.3.3 Essai en laminaire

L'écoulement de fluide dans la chambre de combustion de la MCR est, bien entendu, turbulent puisque les nombres de Reynolds basés sur la vitesse et le rayon du piston sont importants. Néanmoins, il nous a semblé nécessaire d'effectuer un premier essai en laminaire pour tester d'une part les différents schémas numériques de KIVA II et d'autre part pour éviter d'attribuer toute source d'erreurs aux modèles de turbulence qui seront adoptés.

III.3.3.1 Conditions de calcul

Cet essai, a été effectué pour un nombre de Reynolds de l'ordre de 200. Ce dernier est basé sur la vitesse du piston supposée constante et ayant comme valeur 0.125 m/s déterminée à partir de la relation III.1. Les conditions initiales pour l'écoulement sont les mêmes que celles indiquées au tableau III.1. Quant aux conditions aux limites, nous imposons une condition de glissement pour la vitesse et un flux de chaleur nul à la paroi (paroi adiabatique) pour la température. Le maillage est équidistant dans les deux directions r et z (maillage M1). Pour améliorer le calcul à faible nombre de Mach nous avons utilisé la procédure "pgs" proposée dans KIVA II (chapitre II § II.2.2.3.2). Par ailleurs, les différents schémas de convection proposés dans le code ont été testés. Le schéma "q.s.o.u" (voir annexe II.3) qui s'est avéré le plus précis a été retenu pour nos différentes simulations.

III.3.3.2 Résultats et discussion

Les figures III.5 illustrent l'évolution du champ de vitesse en fin de compression et après la compression. En fin de compression, nous pouvons noter la présence d'une zone de recirculation localisée au voisinage de la paroi latérale de la chambre de combustion. Cette zone a tendance à se déplacer de la paroi latérale vers le centre de la chambre après l'arrêt du piston au PMH.

Ce résultat peut être rapproché de celui obtenu, récemment, par Güntsch et al. [4]. Ces auteurs ont procédé au calcul d'un écoulement laminaire tridimensionnel soumis à une compression dans un cylindre. Le calcul de l'écoulement a été effectué pour un nombre de Reynolds, basé sur la vitesse maximale du piston et son rayon, égal à 50. Les résultats que ces auteurs ont obtenu montrent l'existence, pendant la phase de compression, d'une région de recirculation localisée au voisinage de la paroi latérale du cylindre. Cette zone qui tend à se déplacer lentement de la paroi latérale au centre du cylindre à fur et à mesure que le piston avance vers le PMH (figures III.6a et III.6b), est le siège de plusieurs tourbillons "contrarotatifs" en fin de compression (figure III.6c). Ce résultat remarquable montre que cet écoulement est déjà assez complexe dans un cas laminaire et à faible nombre de Reynolds.

a

b

С



Figure III.5: Champ de vitesse à différents instants cas laminaire, compression adiabatique avec une vitesse moyenne du piston = 0.125 m/s, Re = 200, maillage M1, fdc : fin de compression

R-XIS

Figure III.6 : Les lignes de courant d'aprés Güntsch et al. [4] Re = 50, maillage équidistant en (z, φ, r) : 128 x16 x 32

III.3.4 Essai des modèles de turbulence

Dans ce chapitre, les différents tests en turbulent ont été accomplis à l'aide des deux modèles de turbulence sgs et $k - \varepsilon$ standard.

III.3.4.1 Le modèle sgs

L'étude d'un écoulement turbulent, nécessiterait en réalité la prise en compte de toutes les échelles caractéristiques de la turbulence. Cependant, comme il est impossible d'augmenter indéfiniment le nombre de points de calcul pour la résolution de ces échelles, Deardorff [5] suggéra un traitement différent pour les petites structures. En effet, selon l'analyse de Kolmogorov, les petites structures qui dissipent l'énergie reçue des grosses structures à travers la zone inertielle du spectre sont proches de l'isotropie et ont un caractère universel. Ces structures sont modélisées par la technique dite de sous-mailles (sgs). Les grosses structures qui sont porteuses de la plus grande partie de l'énergie turbulente (donc déterminantes pour le comportement du fluide) sont loin de l'homogénéité et de l'isotropie. Ces structures sont souvent calculées par la technique de simulation des grandes structures (Large Eddy Simulation) [6].

Dans KIVA II, le modèle sgs est fondé sur une équation de transport pour l'énergie cinétique de turbulence k (voir équation II.29 § II.1.3.2) associée aux mouvements des petites échelles. Dans ce modèle le coefficient de diffusion turbulent s'exprime par :

$$v_t = C_{\mu} k^{\frac{1}{2}} l_{sgs}$$
(III.3)

 C_{μ} est une constante dont la valeur empirique est 0.09 et l_{sgs} est une échelle de longueur de référence dont la valeur est prise égale à $4\Delta x$, où Δx est une dimension de la maille de calcul.

III.3.4.2 Le modèle $k - \varepsilon$ standard

Le modèle $\mathbf{k} - \varepsilon$ adopté par KIVA II est celui proposé par Launder et Spalding [7], et qui a été décrit au chapitre II (§ II.1.2.3). Néanmoins, un terme source permettant de prendre en compte les changements dans les échelles de longueur, dus aux effets de compressibilité, a été ajouté aux termes de droite de l'équation de transport pour le taux de dissipation ε . Celle-ci s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_{i}}(\overline{\rho}\langle u_{i}\rangle\epsilon) = \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\frac{\mu_{t}}{\sigma_{\epsilon}}\frac{\partial\epsilon}{\partial x_{i}}\right) + \frac{\epsilon}{k}\left(C_{\epsilon_{1}}p_{k} - C_{\epsilon_{2}}\overline{\rho}\epsilon\right) + C_{\epsilon_{3}}\overline{\rho}\epsilon\frac{\partial\langle u_{i}\rangle}{\partial x_{i}}$$

$$(III.4)$$

$$-\frac{2}{3}C_{\epsilon_{1}}\overline{\rho}\epsilon\frac{\partial\langle u_{i}\rangle}{\partial x_{i}}$$

Le terme noté 1 est celui ajouté.

L'équation de transport pour l'énergie de turbulence k est identique à l'équation II.31 du chapitre II.

Les valeurs des constantes, $C_{\varepsilon_1}, C_{\varepsilon_2}, C_{\varepsilon_3}, \sigma_k$ et σ_{ε} sont réunies dans le tableau suivant :

C _{ε1}	C _ε ,	C _{ε,}	σ _k	σ _ε
1.44	1.92	-1.0	1.0	1.3

Tableau III.9: Les constantes du modèle $k - \epsilon$ standard

III.3.4.3 Remarque au sujet du modèle sgs dans KIVA II

Lorsque le modèle sgs est utilisé, la valeur du taux ε doit satisfaire en chaque noeud du maillage la relation suivante :

$$\varepsilon \ge \left[\frac{C_{\mu}}{\sigma_{\varepsilon} \left(C_{\varepsilon_{2}} - C_{\varepsilon_{1}}\right)}\right]^{\frac{1}{2}} \frac{k^{\frac{3}{2}}}{l_{sgs}}$$
(III.5)

Cette inégalité impose à l'échelle de longueur de turbulence d'être inférieure où égale à l_{Sgs} . Il s'ensuit qu'au voisinage des parois, là où la relation (III.5) est toujours satisfaite, ce sont les équations du modèle $\mathbf{k} - \varepsilon$ qui sont résolues. Alors que, loin des parois où l'échelle de longueur de turbulence est l_{Sgs} , c'est l'équation de transport pour k du modèle sgs qui est résolue.

III.3.4.4 Résultats et discussion

III.3.4.4.1 Champ de vitesse

Sur les figures III.7, III.8 et III.9, sont représentés les champs de vitesse correspondant à une compression non adiabatique pour les trois temps de compression 29, 47 et 86 ms. Ces résultats sont issus du modèle $\mathbf{k} - \varepsilon$ standard.



Figure III.7 : Champ de vitesse à différents instants compression non adiabatique de 29 ms, modèle k – ε standard avec loi de paroi, maillage M1, vitesse du piston basée sur l'expérience fdc : fin de compression



Figure III.8 : Champ de vitesses à différents instants compression non adiabatique de 47 ms, modèle k – ε standard avec loi de paroi, maillage M1, vitesse du piston basée sur l'expérience fdc : fin de compression



Figure III.9 : Champ de vitesses à différents instants compression non adiabatique de 86 ms, modèle k – ɛ standard avec loi de paroi, maillage M1, vitesse du piston basée sur l'expérience fdc : fin de compression



Figure III.10 : Champ de vitesses à différents instants cas de compression non adiabatique de 47 ms, modèle de sous-mailles (sgs) avec loi de paroi, maillage M1 fdc : fin de compression

Nous pouvons constater, à première vue, dans les trois cas l'apparition en fin de compression d'une zone tourbillonnaire aux abords du piston et de la paroi latérale. Cette zone qui est davantage mise en évidence dans le cas d'une vitesse de compression élevée (cas 29 ms), a tendance à se déplacer simultanément vers le centre de la chambre et la tête du cylindre après l'arrêt du piston au PMH. Ce résultat est en accord avec les travaux de Güntsch et al [4] qui suggèrent que la compression a pour effet de pousser la turbulence vers la culasse.

Le test du modèle sgs pour une vitesse de compression de 47 ms, fournit quasiment les mêmes résultats que le modèle $\mathbf{k} - \boldsymbol{\varepsilon}$ (voir figure III.9).

III.3.4.4.2 Température et pression

• Cas adiabatique

Lorsqu'on adopte l'hypothèse d'une paroi adiabatique, nous obtenons une évolution spatiale quasi-homogène pour la pression et la température. Celles-ci ne dépendent dans ce cas que du facteur temps. L'évolution en fonction du temps des valeurs moyennes (moyenne spatiale) de ces deux grandeurs physiques, sera proposée au chapitre IV.

• Cas non adiabatique

Dans ce cas aussi la pression évolue d'une manière quasi-homogène en espace. En revanche, à partir d'un certain temps de compression le champ spatial de température est le siège d'hétérogénéités résultant des transferts thermiques aux différentes parois de la chambre. Ces hétérogénéités, dépendant de la vitesse de compression, deviennent importantes surtout en fin de compression et en post-compression. Sur la figure III.10, nous représentons le champ d'isothermes correspondant à une vitesse de compression de 47 ms. Nous constatons, à première vue, l'existence d'un gradient de température au voisinage des différentes parois. Celui-ci devient important en fin de compression et tout particulièrement après la fin de la compression. Cependant, nous remarquons qu'il existe au centre de la chambre une région où la température demeure quasiment homogène pendant la compression et ne dépend que du temps. Nous pouvons, dés à présent, assimiler cette région à l'hypothèse de "coeur adiabatique" émise généralement (cf chap. I § I.5.1). Nous reviendrons plus en détail sur cet aspet au chapitre IV. Le même résultat est obtenu lorsqu'on adopte le modèle sgs (figure III.11).

Ce résultat important a été aussi constaté par Schreiber et al. [2]. Cependant, il faut remarquer que cette zone chaude se déplace après la compression vers la périphérie en liaison avec la zone tourbillonnaire.



Figure III.11 : Isothermes en K à différents instants compression non adiabatique de 47 ms, modèle k – ε standard et loi de paroi, vitesse du piston basée sur l'expérience, maillage M1 fdc : fin de compression



Figure III.12 Isothermes en K à différents instants compression non adiabatique de 47 ms, modèle sgs et loi de paroi, maillage M1, vitesse du piston basée sur l'expérience fdc : fin de compression

III.3.4.4.3 Caractéristiques de la turbulence

Nous représentons sur les figures III.13 et III.14 l'évolution de l'énergie cinétique de turbulence fournie, respectivement, par les modèles $k - \varepsilon$ et sgs. Nous pouvons remarquer que les valeurs de k prédites par le modèle sgs sont surestimées par rapport à ceux issus du modèle $k - \varepsilon$. Cependant, les deux modèles montrent que k a tendance à augmenter pendant la phase de compression pour atteindre un maximum en fin de compression. Tandis qu'en post-compression, k chute brusquement pour atteindre sa valeur initiale.

Le taux de dissipation de k (figures III.15 et III.16) suit la même évolution que k dans le cas des deux modèles. Néanmoins, nous constatons que, pendant la compression, l'hypothèse d'équilibre local (production = dissipation) n'est pas satisfaite. Par contre en post-compression, cette hypothèse est satisfaite puisque le processus de dissipation survient dans les régions où l'énergie turbulente est importante.

Quant aux échelles de longueur de turbulence (figures III.17 et III.18), elles sont réduites par la compression. Mais elles voient leurs valeurs augmenter légèrement en postcompression.

III.3.4.4.4 Confrontation des modèles sgs et k – ε

Pour une meilleure confrontation des modèles $k - \varepsilon$ et sgs, nous avons déterminé l'évolution en fonction du temps des valeurs sans dimension de k, ε et $l: \frac{k}{k_0}, \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}$ et $\frac{1}{l_0}$, ou k_0 est l'énergie cinétique turbulente initiale, ε_0 est le taux de dissipation de k initial et l_0 l'échelle de longueur de turbulence initiale. Les valeurs des grandeurs k, ε et l sont prises à chaque instant sur l'axe du piston au centre de la chambre.

Sur la figure III.19, nous constatons que l'évolution de k est très rapide au démarrage de la compression. Pendant un intervalle de temps elle subit une légère chute probablement due au fait que la vitesse du piston est constante. Ensuite, elle augmente très rapidement pour atteindre sa valeur maximale en fin de compression (sous forme de pic). En post-compression, k diminue rapidement et tend vers sa valeur initiale quelques ms après l'arrivée du piston au PMH. Sur la figure III.20, représentant l'évolution du taux de dissipation de k, on peut constater quasiment le même comportement que celui de k. En ce qui concerne l'échelle de longueur de turbulence l (figure III.21), le modèle sgs prédit une diminution brusque de celleci au démarrage de la compression suivie d'une légère augmentation (d'une durée d'environ 10 ms de la phase de compression) et à nouveau une diminution rapide jusqu'à la fin de compression où l atteint sa valeur minimale. En revanche, le modèle $\mathbf{k} - \varepsilon$ prédit une diminution rapide de l durant toute la phase de compression et sa valeur minimale est atteinte en fin de compression. En post compression, les deux modèles prédisent une légère augmentation de l pendant quelques ms et ensuite sa valeur devient constante.



Figure III.13 : Iso-k en m²/s² à différents instants compression non adiabatique de 47 ms, modèle k – ε standard et loi de paroi, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage M1 fdc : fin de compression



Figure III.14 : Iso-k en m²/s²à différents instants compression non adiabatique de 47 ms, modèle sgs et loi de paroi, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage M1 fdc : fin de compression



fin de compression



Figure III.15 : Iso-epsilon en m²/s³ à différents instants compression non adiabatique de 47 ms, modèle k – ε standard et loi de paroi, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage M1 fdc : fin de compression





Figure III.16 : Iso-epsilon en m²/s³ à différents instants compression non adiabatique de 47 ms, modèle sgs et loi de paroi, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage M1 fdc : fin de compression



Figure III.17 : Iso-l en cm à différents instants compression non adiabatique de 47 ms, modèle k – ε et loi de paroi, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage M1 fdc : fin de compression



Figure III.18 : Iso-l en cm à différents instants compression non adiabatique de 47 ms, modèle sgs et loi de paroi, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage M1 fdc :fin de compression


Figure III.19 : Evolution de l'energie cinétique de turbulence sans dimension au centre de la chambre

compression non adiabatique de 47 ms, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage M1



Figure III.20 : Evolution du taux de dissipation de k sans dimension au centre de la chambre

compression non adiabatique de 47 ms, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage M1



Figure III.21 : Evolution de l'échelle de longueur de turbulence sans dimension au centre de la chambre

compression non adiabatique de 47 ms, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage M1

• Synthèse

Les modèles sgs et $\mathbf{k} - \varepsilon$ standard prédisent le même comportement pour l'évolution des grandeurs k, ε et l, et cela pendant les deux phases de compression et de post-compression. Nous avons pu noter que le modèle sgs conduit à des valeurs de ces grandeurs supérieures à celles prédites par le modèle $\mathbf{k} - \varepsilon$. Néanmoins, les résultats issus de ces deux modèles ne sont pas forcément contradictoires.

A ce stade, on peut se poser des questions sur la nature exacte des résultats issus de ces deux modèles, et sur la capacité de ces derniers à prédire correctement le comportement de la turbulence dans la chambre de combustion de la MCR. Des éléments de réponse seront fournis dans le chapitre V.

III.4 AMELIORATION DU MAILLAGE DANS KIVA II ET SON INFULENCE SUR LE CALCUL

III.4.1 Amélioration du maillage

Comme nous l'avions déjà mentionné, le maillage initialement incorporé dans KIVA II est uniforme dans toutes les directions. Dans le but d'avoir une meilleure résolution au voisinage de la paroi, nous l'avons modifié en le rendant non-équidistant dans les deux directions radiale et axiale. A cet effet, on a mis en oeuvre des fonctions de répartition qui permettent de serrer ou de desserrer le maillage dans les différentes régions du domaine de calcul. Ainsi, suivant la direction z, une fonction "symétrique" permet d'affiner le maillage au voisinage de la tête du piston et de la culasse, et suivant la direction r une progression géométrique fournit un maillage serré au voisinage de la paroi de la chambre et assez large au centre.

III.4.1.1 Définition du maillage

Maillage suivant z:

La largeur de la ième cellule du maillage suivant z est la suivante :

$$dz(i) = \frac{L(z)e^{\left[4a\frac{i(nz-i)}{nz^{2}}\right]}}{\sum_{k}e^{\left[4a\frac{k(nz-k)}{nz^{2}}\right]}} \qquad i \in [0, 1, \dots, nz]$$
(III.6)

L(z) est la hauteur séparant la culasse de la tête du piston à un instant t, nz est le nombre de plans suivant la direction axiale et a est une variable qui permet de choisir l'écart souhaité entre les cellules au voisinage de la paroi et celles au centre de la chambre.

Maillage suivant r:

La largeur de la ième cellule suivant r est la suivante :

$$dx(i) = \frac{Rr^{i}(1-r)}{\sum_{k} r^{k}} \qquad i \in [0, 1, ..., nx]$$
(III.7)

Dans cette expression R représente le rayon du piston, nx est le nombre de cellules suivant la direction radiale et r est la raison de la progression géomètrique définie par :

$$r = \left(\frac{dx\min}{dx\max}\right)^{1/nx}$$
(III.8)

dxmin et dxmax représentent respectivement la taille de la plus petite cellule et de la plus grande.

En résumé, le maillage non-équidistant de la chambre est rendu possible par l'utilisation des relations (III.5) et (III.6) et par la donnée des paramétres suivants : nx, nz, a et $\frac{dx \min}{dx \max}$.

Ce maillage a été introduit dans KIVA II moyennant la modification de quelques sousprogrammes. Ainsi, nous avons pu disposer d'un maillage plus adéquat qui nous a permis, chaque fois qu'il était souhaitable de le faire, de raffiner la maille de calcul pour une meilleure résolution.

Les figures III.22.a et III.23.b illustrent les deux types de maillages non-équidistants utilisés.







Figure III.22.b : Maillage M3 de la chambre de combustion nombre de cellules suivant r / nombre de cellules suivant z : 18 x 40

III.4.2 Influence du maillage sur le calcul

Pour ne pas alourdir ce paragraphe, nous nous sommes contentés d'étudier l'influence du maillage sur le calcul en considérant le seul cas d'une compression non adiabatique de 47 ms.

III.4.2.1 Résultats et discussion

Les différents résultats présentés dans ce paragraphe sont issus du modèke $k - \varepsilon$ standard auquel est adjointe une loi de paroi. Les conditions d'étude ainsi que les conditions initiales et aux limites sont les mêmes que dans le cas du maillage uniforme.

Nous avons testé deux séries de maillage, le premier (maillage M2) avec le même nombre de noeuds que le maillage uniforme. Et le deuxième (maillage M3) beaucoup plus raffiné avec un nombre de noeuds de 779 en début de compression et 342 à l'approche du PMH.

III.4.2.1.1 Champ de vitesse

Le maillage progressif M3 permet de calculer avec plus de précision la vitesse de l'écoulement, notamment au voisinage des parois. On peut s'en rendre compte, en comparant les figures III.8 et III.23. La zone tourbillonnaire déjà observée dans le cas du maillage uniforme est mise davantage en évidence dans ce cas.

III.4.2.1.2 Température

Le maillage M3, permet d'évaluer avec plus de précision les gradients de température au voisinage des parois dès que les pertes thermiques commencent à entrer en jeu (voir figure III.24). De plus, il permet de mieux matérialiser la région au centre de la chambre (déjà observée dans le cas du maillage uniforme M1) qui n'est pas affecté par les échanges thermiques et qui évolue de manière quasi-adiabatique. Par ailleurs, ce maillage nous a permis de localiser avec davantage de certitude les températures maximale et minimale dans la chambre et ce pendant les phases de compression et de post-compression. Ainsi, nous constatons que (figure III.24) la température maximale est atteinte à chaque instant de la chambre. Alors qu'en post-compression celle-ci est atteinte au centre de la moitié de la chambre de combustion. La température minimale, quant à elle, est observée à chaque instant, pendant les deux phases de compression et de post-compression, au voisinage de la paroi latérale de la chambre de combustion.



échelle : 1 cm \rightarrow 16 m/s

échelle : 1 cm \rightarrow 1.6 m/s



échelle : 1 cm \rightarrow 1.2 m/s



Figure III.23 : Champ de vitesses à différents instants

compression non adiabatique de 47 ms, modèle k – ε et loi de paroi, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage non uniforme M3 fdc : fin de compression



Figure III.24 : Isothermes en K à différents instants compression non adiabatique de 47 ms, modèle k – ε et loi de paroi, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage non uniforme M3 fdc : fin de compression

CONCLUSION PARTIELLE

A l'issue de ce chapitre, nous disposons d'un ensemble d'informations concernant la manière dont évolue un écoulement de fluide soumis à une compression dans la MCR. En effet, la simulation du mouvement des particules gazeuses dans la chambre en fonction du temps de compression lors de la compression et de la post-compression, a été effectuée. Un résultat intéressant a été retenu; il concerne l'apparition en fin de compression aux abords du piston et de la paroi latérale, d'une zone de forte turbulence. Celle-ci a tendance à se déplacer simultanément vers le centre de la chambre et la culasse, après l'arrêt du piston au PMH. Nous avons aussi pu obtenir des informations sur l'évolution de certaines grandeurs physiques de l'écoulement moyen, en particulier la température et la pression.

Dans le but d'avoir une idée plus complète du problème, nous devons confronter les différents résultats numériques obtenus à ceux issus de l'expérience. Ceci fera l'objet du chapitre IV.

Par ailleurs, une première approche du comportement de la turbulence subissant une compression a été accomplie en se contentant, dans un premier temps, de tester un modèle de sous-mailles (sub-grid scale) et un modèle $k - \varepsilon$ standard. Les résultats issus de ces deux modèles ne sont pas contradictoires. Ce qui nous amène à poser des questions sur la vraie nature de ces résultats, et par là même à essayer de tester d'autres modèles, existant dans la littérature, qui permettent de prendre en compte la particularité de la compression dans une machine à compression rapide (voir à ce sujet le chapitre V).

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

W.P. PRESS, B.P. FLANNERY, S.A. TEUKOLSKY & W.T. VETTERLING "Numerical Recipes : The art of scienific computing" Cambridge University Press, (1986).

J.F. GRIFFITHS, D. ROSE, M. SCHREIBER, J. MEYER &K.F. KNOCHE "Application of CFD modelling of autoignition at high pressure in a cylinder" Comb. and Flame, (1992).

[3] J.P. NOUGIER

"Méthodes de calcul numérique" Ed. Masson, (**1991**).

[4] E. GÜNTSCH & R. FREIDRICH

"Compressing turbulence in a cylinder" Int. Symp. on Experimental and Computational Aerothermodynamics of Internal Flows, Prague, (1993).

[5] J.W. DEARDORFF

"A numerical study of three dimensional turbulent channel flow at large Reynolds number"

J.F.M., 41, pp: 453-480, (1970).

[6] U. SCHUMANN

"Introduction to the modelling of turbulence : Direct and Large Eddy Simulation of Turbulence"

Von Karman Institute, Lecture Series 1987-06, (1987).

[7] B.E. LAUNDER & D.B. SPALDING

"The numerical computation of turbulent flows"

Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 3, pp : 537-566, (1974).

CHAPITRE IV

CONFRONTATION ENTRE SIMULATION NUMÉRIQUE ET EXPÉRIENCE. CARACTÉRISATION DU CHAMP DE TEMPÉRATURE

CHAPITRE IV

CONFRONTATION ENTRE SIMULATION NUMÉRIQUE ET EXPÉRIENCE. CARACTÉRISATION DU CHAMP DE TEMPÉRATURE

IV.1 INTRODUCTION

Les tests expérimentaux réalisés, consistent à suivre, d'un état initial à un état final, l'évolution d'un mélange gazeux soumis à une compression dans un milieu fermé. Cette évolution est suivie essentiellement par la mesure de la pression, au cours du temps, dans la chambre de combustion. La méthode utilisée permet d'accéder à l'évolution temporelle de la variation de pression et à une évolution de la température de coeur qui en est déduite par calcul (cf. chap. I). Cependant, elle ne fournit aucun renseignement, à un instant donné, sur la répartition spatiale de la température. La connaissance du champ de température pourrait, en effet, nous renseigner sur d'éventuelles hétérogènéités pouvant survenir pendant ou après la compression. A titre d'exemple, plusieurs chercheurs soupçonnent l'existence, à partir d'un certain temps de compression, de "points chauds" dans le champ de température. Ceux-ci peuvent être à l'origine du processus de démarrage d'une autoinflammation en "couronne" dans le cas d'un mélange réactif (cf. chap. I, § I.4.1).

Une simulation numérique de l'évolution du mélange gazeux dans le temps et dans l'espace, se présente donc comme un moyen très pratique permettant d'appuyer l'expérience d'une part, et de la remplacer là où elle fait défaut d'autre part.

Dans ce chapitre, nous tenterons, dans la mesure du possible, de confronter nos résultats numériques issus de la version modifiée de KIVA II aux résultats expérimentaux. Ensuite, nous aborderons une étude sur la répartition spatiale de la température à chaque instant de la compression et de la post-compression. Des comparaisons avec des résultats issus d'autres travaux seront proposées.

IV.2 ETUDE EN SYSTÈME ADIABATIQUE

Lorsque le mélange fluide est supposé évoluer adiabatiquement, les valeurs de la pression et de la température obtenues au PMH doivent être indépendantes du temps de compression utilisé. Ces valeurs peuvent être calculées théoriquement à partir des relations I.1, I.2 et I.3 du chapitre I.

Nous avons voulu nous assurer que cette hypothèse est bien validée par le programme. A cet effet, nous avons effectué des calculs de l'écoulement, pour trois vitesses différentes de compression : 29, 47 et 86 ms, en imposant des conditions d'adiabaticité aux différentes parois de la chambre. L'évolution de la pression et de la température moyennes (moyenne spatiale) pour les trois vitesses est représentée sur les figures IV.1 et IV.2.

Nous pouvons constater qu'effectivement les valeurs de la pression et de la température obtenues au PMH sont indépendantes du temps de compression. Cependant, ces valeurs diffèrent sensiblement de celles obtenues théoriquement comme on peut le constater dans le tableau IV.1. Ceci est dû, en partie, à un manque de précision dans le calcul de la vitesse du piston en fin de compression. En effet, sur la figure IV.3 nous représentons l'évolution temporelle de la pression moyenne pour un temps de compression de 47 ms. La vitesse du piston a été déterminée à l'aide de trois méthodes différentes : différences amont (cas 1), différences aval (cas 2) et différences centrées (cas 3).

Nous pouvons constater sur le graphique que la pression au PMH varie en fonction du schéma aux différences adopté. Cependant, celle qui correspond le mieux à la pression théorique est obtenue dans le cas du schéma aux différences centrées. Ce résultat n'est pas surprenant, dans la mesure où les différences centrées permettent une approximation au second ordre et donc une meilleure précision dans le calcul.

D'autres sources d'erreurs liées aux schémas numériques adoptés peuvent également contribuer aux différences observées.

En réalité, l'hypothèse adiabatique n'est d'aucun intérêt pratique dans le cas de notre problème, puisqu'elle n'est pratiquement jamais vérifiée. Cependant, elle a été envisagée comme un cas limite permettant de vérifier que les valeurs de la pression et de la température déterminées expérimentalement ou numériquement doivent toujours être inférieures aux valeurs adiabatiques.





compression adiabatique pour les trois temps : 29, 47 et 86 ms, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, modèle k-ɛ standard et loi de paroi, maillage M2



Figure IV.2 Evolution de la température moyenne adiabatique

compression adiabatique pour les trois temps : 29, 47 et 86 ms, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, modèle k-ɛ standard et loi de paroi, maillage M2



Figure IV.3 Influence du calcul de la vitesse du piston à l'approche du PMH sur l'évolution de la pression moyenne

compression adiabatique de 47 ms, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, modèle k-ε, maillage M2

	Pression adiabatique en bar	Température adiabatique en K
Théorique	9.4	850
Numérique	9.34	824

Tableau IV.1 Pression et température adiabatiques au PMH



VI.3 CONFRONTATION CALCUL ET EXPERIENCE

L'expérience montre que même pour une vitesse considérée comme rapide (20 ms), la pression déterminée au P.M.H s'avère inférieure à la pression théorique. Ceci, signifie que les échanges thermiques aux parois de la chambre influencent assez rapidement les caractéristiques thermodynamiques du fluide. Il s'ensuit qu'une étude objective de l'écoulement du fluide dans la MCR, doit être envisagée en adoptant l'hypothèse de la non-adiabaticité du milieu étudié.

IV.3.1 Evolution de la pression

La pression est la seule grandeur expérimentale caractérisant le milieu non réactif mesurée lors des expériences en MCR. La comparaison des valeurs mesurées aux valeurs calculées numériquement revêt donc un intérêt de tout premier plan.

Nous déterminons pendant chaque cycle de calcul la moyenne spatiale de la pression considérée comme une pression optimale qui règne dans la chambre à chaque instant. Sur les figures IV.4, IV.5 et IV.6 sont représentées les pressions expérimentales et calculées pour trois temps de compression, allant du plus court au plus long : 29 ms, 47 ms et 86 ms.

Nous pouvons constater sur ces figures, que durant la phase de la compression l'évolution de la pression calculée correspond bien à l'évolution de la pression mesurée. Par contre en fin de compression et après la compression on assiste à une différence notable qui dépend du temps de compression considéré.

La différence la moins importante entre la pression calculée et la pression mesurée, en fin de compression, est obtenue pour le temps de compression le plus rapide (29 ms). Cependant, dans ce cas la pression calculée demeure plus proche du cas adiabatique que de l'expérience. De plus, pendant un intervalle de temps de la post-compression (équivalent au temps de compression), l'expérience montre une chute importante de la pression alors que la simulation numérique indique une diminution très lente.

En ce qui concerne les autres vitesses : 47 et 86 ms, nous pouvons formuler les mêmes remarques que les précédentes. Néanmoins, nous constatons, en plus, que lorsque la vitesse de compression est lente (cas 86 ms), l'écart entre les pressions expérimentale et numérique au PMH devient très important.

Par ailleurs, l'examen des courbes expérimentales montre que plus la compression est rapide plus la pression au PMH est élevée et plus la chute de pression après le PMH est rapide surtout dans les premières ms suivant l'arrêt du piston. Par contre, la simulation numérique indique une évolution linéaire de la pression en post-compression quasi-identique pour les trois temps de compression. Nous avons reporté dans le tableau IV.2 les valeurs expérimentales et numériques des pressions au PMH, ainsi que la surestimation (en %) de la pression par le code.



Figure IV.4 Evolution de la pression moyenne pour un temps de compression de 29 ms compression non adiabatique, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, modèle k-ɛ standard, maillage M2



Figure IV.5 Evolution de la pression pour un temps de compression de 47 ms compression non adiabatique, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, modèle k-ɛ standard, maillage M2



Figure IV.6 Evolution de la pression pour un temps de compression de 86 ms compression non adiabatique, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, modèle k-ɛ standard, maillage M2

Temps de compression (en ms)	29	47	86
(P _{PMH} en bar) / Expérience	8.5	8.05	7.4
(P _{PMH} en bar) / Numérique	9.15	9.10	9.01
% de surestimation de P _{PMH}	7.6	13.	21.

Tableau IV.2 Valeurs de la pression au PMH en fonction du temps de compression

IV.3.2 Evolution de la température

Bien que nous ne disposions pas de mesures expérimentales de la température au sein de la MCR, nous nous proposons dans ce paragraphe de comparer l'évolution de la température moyenne calculée par le code à la température estimée à partir des mesures de pression selon l'expression I.4, température désignée sous le non de "température de coeur".

Remarquons tout d'abord que la température moyenne calculée en faisant la moyenne des températures obtenues, à chaque pas de temps, dans chaque cellule du maillage est toujours supérieure à la température moyenne homogène $T_{m,h}$ obtenue à partir de l'équation I.5, ce qui est tout à fait logique.

Temps de compression en ms	29	47	86
T _m calculé (KIVA II) en K	805	803	794
T _{m,h} en K	770	729	670

Tableau IV.3 Comparaison des températures moyennes au PMH obtenues à partir de KIVA II ou par la loi des gaz parfaits en supposant le milieu homogène (Eq. I.5 chap I)

L'évolution temporelle des valeurs obtenues par le code est représentée sur la figure IV.7 simultanément à l'évolution de la température de coeur déduite de l'expérience en utilisant l'expression I.4. Les valeurs correspondantes au PMH sont reportées dans le tableau IV.4. Nous constatons une évolution similaire des courbes et une corrélation relativement bonne entre les valeurs calculées par KIVA II et celles déduites de I.4. Ce résultat assez inattendu, compte tenu des divergences observées au niveau des courbes de pression doit, cependant être considéré comme fortuit.



Figure IV.7 Confrontation de la température moyenne à la température de coeur pour les temps de compression 29, 47 et 86 ms.

compression non adiabatique, modèle k-ɛ standard et loi de paroi, maillage M2, vitesse du piston basée sur l'expérience

Temps de compression en ms	29	47	86
T _m (KIVA II) en K	805	803	794
T _c calculé en K	828	816	798

 Tableau IV.4 Comparaison au PMH de la température moyenne obtenue par KIVA II et la température de coeur déduite de l'expression I.4 du chap. I

IV.3.3 Influence du maillage sur le calcul de P et T

L'influence du maillage sur le calcul de l'évolution de la pression et de la température moyennes (figures IV.8 et IV.9) a été réalisée dans le cas d'une compression en 47 ms.



Figure IV.8 Evolution de la pression moyenne en fonction du maillage

compression non adiabatique de 47 ms, modèle k-e standard et loi de paroi, vitesse du piston



Figure IV.9 Evolution de la température moyenne en fonction du maiilage compression non adiabatique de 47 ms, modèle k-ɛ standard et loi de paroi, vitesse du piston basée sur les données expérimentales

Nous constatons que les deux maillages considérés (M_2 et M_3) n'ont pas d'influence sur l'évolution de la pression et la température moyennes pendant la phase de la compression. Par contre, après le PMH nous observons une influence non négligeable du maillage. Un maillage plus fin conduit à une meilleure prédiction de la pression en post-compression et laisse apparaître une décroissance de la pression suivant deux lois linéaires successives comme il a été observé expérimentalement. Cependant, les valeurs prédites par le code sont encore loin des valeurs observées expérimentalement.

IV.3.4 Estimation de P et T dans le cas de l'utilisation d'une vitesse moyenne de compression

Comme nous l'avons signalé dans le paragraphe IV.2, la valeur de la pression calculée dépend sensiblement du schéma aux différences adopté pour le calcul de la vitesse instantanée du piston. Ce problème ne se posant plus dans le cas d'une vitesse moyenne nous avons voulu tester ce modèle qui a été retenu également par d'autres auteurs [1, 2, 3, 4]. Les résultats sont reportés sur les figures IV.10 et IV.11 dans le cas d'une compression en 47 ms. Nous constatons dans ce cas une mauvaise prédiction de la pression pendant la phase de compression. Cependant, au PMH la valeur calculée de la pression est plus proche de la valeur expérimentale. Par contre, en post-compression, la décroissance de la pression reste toujours trop faible par rapport à l'expérience. Quant à la température elle évolue dans le même sens que la pression.

IV.3.5 Discussion

L'ensemble des résultats obtenus à partir de KIVA II montre en règle générale une surestimation des valeurs de la pression d'autant plus importante que la vitesse de compression est lente. Ceci est probablement dû à une sous-estimation des transferts thermiques pris en compte dans le modèle adopté (annexe IV, [5], [6], [7]).

Afin d'avoir une idée de l'évolution des pertes thermiques aux parois, nous avons calculé le coefficient de transfert des pertes thermiques moyen en fonction du temps de compression. Celui-ci est représenté sur la figure IV.12 pour les trois vitesses de compression considérées. Ce coefficient atteint son maximum lorsque la vitesse de compression est maximale. Il diminue considérablement quand on arrive au PMH et tend vers une valeur identique de l'ordre de 35 w m⁻² K⁻¹ dans les trois cas quand la turbulence du milieu devient de plus en plus faible.

Les pertes de chaleur se produisant aux parois, il est probable qu'un maillage plus fin permettrait de rendre compte dans de meilleures conditions des phénomènes observés.



Figure IV.10 Evolution de la pression moyenne en fonction de la loi de vitesse du piston

compression non adiabatique de 47 ms, modèle k-e standard et loi de paroi, maillage M2



Figure IV.11 Evolution de la température moyenne en fonction de la loi de vitesse du piston

compression non adiabatique de 47 ms, modèle k-c standard et loi de paroi, maillage M2



Figure IV.12 Evolution du coefficient de transfert thermique moyen en fonction du temps de compression

compression non adiabatique de 29, 47 et 86 ms, modèle k-ɛ standard et loi de paroi, vitesse du piston basée sur l'expérience, maillage M2

IV.4 CARACTERISTIQUES DU CHAMP DE TEMPERATURE

La température est un paramètre important à considérer dans les études cinétiques des mécanismes chimiques postulés pour rendre compte des phénomènes d'autoinflammation. Les caractéristiques du champ thermique sont donc intéressantes à connaître même dans le cas d'un mélange non réactif.

Dans ce paragraphe nous considérerons les résultats obtenus par le calcul en dehors de toute confrontation expérimentale. Nous envisageons essentiellement l'évolution du champ de température dans la phase de post-compression quand le piston est arrivé au PMH, c'est à dire dans la chambre de combustion proprement dite.

Le code nous fournit dans chaque cellule du maillage la température du milieu avec une précision d'autant plus grande que le maillage est fin. Nous disposons donc de nombreux résultats qui seront exploités de la manière suivante :

Nous apporterons tout d'abord une attention particulière à l'évolution de la température au centre de la chambre de combustion et suivant l'axe des hublots latéraux (r = 0,...,2.5 cm; z = 21 cm), c'est à dire dans une zone où des mesures par thermocouple à réponse rapide ou par diagnostic laser peuvent être pratiquées. Enfin, nous examinerons la cartographie du champ de température dans son ensemble.

IV.4.1 Comparaison de la température au centre de la chambre de combustion avec les températures maximales et moyennes

Les résultats sont reportés sur les figures IV.13, IV.14 et IV.15 pour les trois temps de compression (29, 47, 86 ms) en période de compression et de post-compression.

Pendant la période de compression et pour les vitesses de compression les plus rapides (29 et 47 ms) la température maximale qui se situe au voisinage du piston (du côté de l'axe de la chambre de combustion) est supérieure à la température au centre de la chambre de combustion de 20 K au plus. Par contre, lorsque la compression est plus lente (86 ms), la température maximale se situe toujours au centre de la chambre de combustion.

Au PMH, dans les trois cas, la température maximale se situe quasiment au centre à 5 K près environ.

En période de post-compression, nous observons dans les trois cas :

- que la température maximale demeure au centre à 5 K près pendant 15 ms environ.

- puis une diminution plus rapide de la température au centre par rapport à la température maximale, alors que cette dernière et la température moyenne évoluent quasiment de façon parallèle.

Ces résultats traduisent l'hétérogèneité du champ de température et un déplacement, en fonction du temps, de la zone où la température est maximale.



Figure IV.13 Comparaison entre température moyenne, température au centre et température maximale pour un temps de compression de 29 ms

compression non adiabatique, modèle k-ɛ standard et loi de paroi, vitesse du piston basée sur l'expérience, maillage M2



Figure IV.14 Comparaison entre température moyenne, température au centre et température maximale pour un temps de compression de 47 ms

compression non adiabatique, modèle k-ɛ standard et loi de paroi, vitesse du piston basée sur

l'expérience, maillage M2



Figure IV.15 Comparaison entre température moyenne, température au centre et température maximale pour un temps de compression de 86 ms

compression non adiabatique, modèle k-ɛ standard et loi de paroi, vitesse du piston basée sur l'expérience, maillage M2

IV.4.2 Evolution de la température dans les différents plans z en fin de compression

La figure IV.16 matérialise en fin de compression la variation de la température en fonction du rayon dans 10 plans z de la chambre dans le cas de la compression de 47 ms.

Pour les plans sans contact avec la paroi et notamment pour les plans les plus centraux, nous constatons une quasi uniformité de la température jusqu'au voisinage de la paroi latérale. La température maximale n'est pas atteinte au plan central mais dans le plan 2. L'écart entre la température maximale et celle au centre n'excède pas 5 à 6 K.



Figure IV.16 Evolution de la température en fin de compression dans différents plans z en fonction de r

compression non adiabatique de 47 ms, modèle k-ɛ standard et loi de paroi, vitesse du piston basée sur l'expérience, maillage M2

plan k (= 1,...10) signifie le k^{ème} plan z en partant du piston vers la culasse

IV.4.3 Evolution temporelle de la température en post-compression dans le plan central de la chambre de combustion

Les figures IV.17, IV.18 et IV.19 montrent que pour les trois vitesses de compression le refroidissement des gaz en post-compression varie en chaque point du plan central de la même façon qu'au centre de la chambre (cf § IV.4.1), à savoir : une décroissance suivie d'une remontée momentanée de la température. Les effets sont plus ou moins amplifiés suivant la position le long du rayon, l'effet le plus important se situant dans la zone tourbillonnaire révélée lors de l'analyse du champ de vitesse (cf § III.3.4.4.1, chap. III).



Figure IV.17 Evolution de la température dans le plan central de la chambre de combustion à différents instants de la post-compression

compression non adiabatique de 29 ms, modèle k-ɛ standard et loi de paroi, vitesse du piston basée sur l'expérience, maillage M2



Figure IV.18 Evolution de la température dans le plan central de la chambre de combustion à différents instants de la post-compression

compression non adiabatique de 47 ms, modèle k-ɛ standard et loi de paroi, vitesse du piston

basée sur l'expérience, maillage M2



1474 S. 21. († 157



Figure IV.19 Evolution de la température dans le plan central de la chambre de combustion à différents instants de la post-compression

compression non adiabatique de 86 ms, modèle k-ɛ standard et loi de paroi, vitesse du piston basée sur l'expérience, maillage M2

IV.4.4 Cartographie du champ de température

Les figures IV.20, IV.21 et IV.22 représentent la cartographie du champ de température au PMH et dans la période de post-compression. Cette cartographie a été obtenue en attribuant une couleur par tranche de 10 K, et en considérant comme origine dans chaque cas, la température maximale atteinte (817 K pour 29 ms, 814 K pour 47 ms et 808 K pour 86 ms)

Pour les trois vitesses de compression, nous pouvons constater l'existence en fin de compression d'une région (située au centre de la chambre) où la température quasi homogène peut être assimilée à la zone de température de coeur définie au chapitre I. Les gradients de température sont ressentis surtout au voisinage du piston et de la paroi latérale de la chambre, alors qu'au voisinage de la culasse, la température n'est pas trop affectée, surtout pour les vitesses de compression les plus élevées.

L'importance de cette région de température quasi homogène en fin de compression dépend de la vitesse de compression. Dans le cas des vitesses de compression les plus rapides cette région occupe environ les 3/4 de la chambre. Dans le cas d'une compression lente (86 ms) les gradients de température au voisinage du piston sont plus importants et la région de "température de coeur" est réduite et se trouve entourée par des zones froides localisées au voisinage des différentes parois de la chambre.

A ce stade, nous pouvons résumer la situation de la manière suivante : A partir d'un certain temps de compression, le champ de température, initialement homogène, subit des hétérogèneités dues aux effets des pertes thermiques. Ces dernières affectent, surtout, les gaz situés au voisinage de la paroi latérale et de la tête du piston. En fin de compression, on observe clairement l'existence d'une région, située au centre du coté de l'axe de la chambre et de la culasse, qui a évolué d'une manière quasi-adiabatique pendant la compression. Elle représente une zone qui a été le moins affecté par les pertes thermiques. Son importance diminue lorsque la vitesse de compression est lente. Ceci parait raisonnable, puisque plus la compression est lente plus le temps de séjour des gaz dans la chambre est grand et plus les pertes thermiques prennent de l'importance.

Dans la période de post-compression la zone de température maximale située au centre de la chambre subit une profonde modification. Celle-ci diminue rapidement et d'autant plus que la vitesse de compression est plus rapide. Au bout de 20 ms par exemple, alors que pour une compression de 29 ms, la zone de température maximale initiale a disparu, celle-ci persiste encore pour une vitesse de 47 ms et est encore bien développée pour une compression effectuée en 86 ms.

L'examen des différentes figures montre qu'en fonction du temps il y a isolement d'une zone "en couronne" qui se refroidit plus lentement que le reste de la chambre.

Il parait donc clairement que le mouvement des gaz engendré par la compression (cf chap III) balaie les gaz frais au voisinage des parois et les poussent vers le centre de la chambre . En même temps les gaz chauds se trouvent repoussés vers les parois. Ce mouvement de recirculation des gaz se fait autour d'une zone de la chambre qui demeure modérément affectée et garde une température relativement importante. Cette zone "en couronne" qui a tendance à se déplacer vers le haut de la culasse, correspond à la zone tourbillonnaire décrite au chapitre III.





CHAPITRE IV

798 - 808

788 – 798 778 – 788 768 – 778

758 - 768 748 - 758

738 - 748

728 - 738

718 - 728 708 - 718

698 - 708 688 - 698

678 - 688 668 - 678

668



CONCLUSION PARTIELLE

L'étude effectuée en système adiabatique nous a permis de constater que les valeurs de pression et température moyennes calculées par KIVA II sont inférieures à celles que l'on peut déduire du calcul "théorique". De plus, les résultats montrent une sensibilité importante à la manière dont on détermine la vitesse instantanée du piston, particulièrement à l'approche du piston du PMH.

En système non adiabatique le code conduit à une surestimation des valeurs des pressions moyennes par rapport aux valeurs expérimentales. Cette surestimation est constatée surtout en fin de compression et elle est d'autant plus importante que la vitesse de compression est lente. Ceci est probablement dû, en partie, à une sous-estimation des transferts thermiques par la loi de paroi adoptée. Par ailleurs, l'utilisation d'un maillage plus fin montre une amélioration du calcul de la pression en post-compression. Cependant, les valeurs prédites par le calcul demeurent encore loin des valeurs observées expérimentalement.

Lorsqu'on adopte une vitesse moyenne du piston on obtient une mauvaise prédiction de la pression pendant la phase de compression et une évolution similaire au cas d'une vitesse expérimentale en post compression. Néanmoins, la valeur de la pression obtenue au PMH est plus proche de la valeur expérimentale.

En dehors de la confrontation expérimentale, le code nous a permis de caractériser le champ de température. La cartographie de ce dernier permet de mettre en évidence la zone de "température de coeur" qui évolue d'une position centrale en fin de compression à une position "en couronne" en post compression. Cette couronne est localisée à chaque instant de la post compression au même endroit que la zone de forte turbulence prédite (voir chap III).

Références bibliographiques

- J.F GRIFFITHS, Q. JAIO, M. SCHREIBER, J. MEYER & K.F. KNOCHE
 "Development of thermokinetic models for autoignition in a CFD code : experimental validation and application of the results to rapid compression machine"
 24th. Symp.(Int.) Comb., pp : 1809-1815, (1992).
- J.F. GRIFFITHS, D. ROSE, M. SCHREIBER, J. MEYER & K.F. KNOCHE
 "Application of CFD to the modelling of autoignition at high pressure in a cylinder"
 I. Mech. E, C448/030 : 29, (1992).
- J.F. GRIFFITHS, D. ROSE, M. SCHREIBER, J. MEYER & K.F. KNOCHE
 "Novel features of end-gas autoignition revealed by computational fluid dynamics" Comb. and Flame, 91, pp : 209-212, (1992).
- [4] J.F. GRIFFITHS, Q. JAIO, W. KORDYLEWSKI, M. SCHREIBER, J. MEYER & K.F. KNOCHE "Experimental and numerical studies of ditertiary butyl peroxide combustion at high pressures in a rapid compression machine" Comb. and Flame, 93, pp : 303-315, (1993).
- [5] B.E. LAUNDER & D.B. SPALDING
 "Mathematical models of turbulence" Academic Press, New York, (1972).
- [6] H. SCHLICHTING
 "Boundary layer theory"
 6th ed., Mc Graw-Hill, New York, (1968).
- J. M. ORTEGA & W. C. RHEINBOLDT
 "Iterative solution of nonlinear equations in several variables" Academic Press, New York, (1970).
CHAPITRE V

MODÉLISATION DE LA TURBULENCE DANS LA CHAMBRE DE COMBUSTION DE LA MCR

CHAPITRE V

MODÉLISATION DE LA TURBULENCE DANS LA CHAMBRE DE COMBUSTION DE LA MCR

V.1 INTRODUCTION

L'amélioration du calcul des écoulements dans la MCR repose en partie sur la qualité des modèles de turbulence utilisés et notamment sur leur aptitude à prédire correctement les effets de la compression. Il est, actuellement, acquis que les modèles de turbulence classiques, incluant le $k - \varepsilon$ standard, ne permettent pas une bonne prédiction du comportement de la turbulence subissant une compression (cas du moteur à piston par exemple). Certains auteurs, (Reynolds (1980), Morel et Mansour (1982) et récemment Coleman et Mansour (1991)), suggèrent la prise en compte de la théorie de la distorsion rapide "TDR" pour obtenir des modèles $k - \varepsilon$ "modifiés" permettant d'améliorer cette prédiction.

Dans ce chapitre, nous tenterons dans un premier temps de rappeler d'une manière succincte les différentes tentatives (numériques, expérimentales,...) réalisées par de nombreux auteurs pour une meilleure appréhension de la turbulence subissant une compression. Dans un second temps, quelques modèles choisis dans la littérature ont été testés après leur introduction dans le code. Les résultats qui en découlent seront présentés sous forme paramétrique et discutés.

V.2 LES DIFFERENTES APPPROCHES UTILISEES POUR L'ETUDE DE LA TURBULENCE SOUMISE A UNE COMPRESSION

L'étude d'écoulements turbulents subissant une compression, est d'un grand intérêt scientifique et technologique. A titre d'exemple, les effets de la compression sur la turbulence dans le cylindre d'un moteur peuvent modifier considérablement la nature du processus de combustion et globalement les performances du moteur. Cependant, ces écoulements sont tellement complexes qu'ils se prêtent difficilement aux méthodes de résolution analytique et qu'une approche numérique complète s'avère souvent nécessaire.

Dans ce qui suit, nous proposons un petit rappel sur les différentes approches utilisées jusque là, pour l'étude de la turbulence soumise à une compression.

V.2.1 L'approche théorique

Certains auteurs [1], [2], [3], [4] ont étudié théoriquement l'effet de la compression sur la turbulence en se basant sur la TDR. Cette dernière, a été utilisée sous l'hypothèse d'une compression extrêmement rapide qui implique que les interactions turbulentes non-linéaires sont peu importantes et le processus de dissipation très long pour être significatif. Ainsi, l'application de la TDR dans le cas d'une compression rapide a permis, par exemple, à Hoult et al. [3] d'obtenir un bon accord avec les mesures expérimentales par fil chaud de Witze [5] et Lancaster [6].

Il est clair que la "TDR" qui est une analyse linéaire et non-visqueuse de la turbulence permet de décrire un cas limite qui n'est pas souvent rencontré dans la pratique. Cependant, son utilité principale demeure la solution analytique qu'elle fournit. Celle-ci peut servir de base pour d'éventuelles comparaisons avec des résultats issus de différents modèles et simulations réalisés [7].

V.2.2 L'approche expérimentale

Pour une meilleure compréhension des effets de la compression sur la turbulence, d'autres auteurs ont eu recours à l'expérience. Les premières mesures expérimentales ont été obtenues à l'aide de la méthode d'anémomètrie à fil chaud. Cette méthode a permis à Winsor et al. [8] de mesurer les fluctuations de vitesse dans le cylindre d'un moteur; leurs résultats indiquent que la turbulence a tendance à subir un déclin pendant la compression. Lancaster [6] a utilisé lui aussi la même méthode pour étudier l'évolution de la turbulence dans un moteur monocylindrique, il a constaté que l'intensité de la turbulence diminue assez rapidement pendant la compression pour atteindre sa valeur minimale au voisinage du PMH. Il attribua ce résultat aux changements d'orientation que subit l'écoulement ainsi qu'à la dissipation visqueuse. En outre, il remarqua que le spectre d'énergie turbulente se déplace vers les faibles fréquences pendant la compression. Ces différents résultats lui ont servi d'appui pour confirmer à son tour que la turbulence subit un déclin pendant la compression. Par la suite, c'est la méthode de mesures par anémomètrie Laser-Doppler qui a été adoptée par de nombreux chercheurs pour étudier l'effet de la compression sur la turbulence. Arcoumanis et al. [9] ont utilisé cette méthode pour étudier l'évolution de la turbulence dans un moteur à quatre temps possédant un taux de compression de 3,5. Leurs résultats ont révélé que le niveau de la turbulence diminue considérablement pendant la première moitié de la course du piston; alors que pendant la deuxième partie de la course, un piston plat produirait un niveau de turbulence quasi-constant. En 1982, Richman [10] développa une méthode de diagnostic (FDE : Flow Diagnostics Engine) pour un moteur possédant un cylindre transparent fait en cristal-saphire. Ses visualisations lui ont permis de constater que la compression a pour effet de diminuer les échelles de la turbulence.

V.2.3 L'approche numérique

L'essor extraordinaire qu'ont connus les moyens de calcul depuis une vingtaine d'années, a permis à plusieurs chercheurs d'opter pour la modélisation numérique des écoulements turbulents. Les progrès considérables obtenus dans le cas d'écoulements turbulents incompressibles, dûs principalement à la simplicité relative des équations à fermer et à la nullité des divergences de la vitesse moyenne et de la vitesse fluctuante, ont permis des interprétations claires de certains mécanismes physiques, notamment celui de la redistribution dûe à la corrélation pression-déformation [11]. En revanche, les progrès en modélisation réalisés dans le cas des écoulements turbulents compressibles s'avèrent encore très modestes. Le fait est que les variations de la densité dans ce type d'écoulements rendent très difficile la fermeture des équations à cause du nombre important des corrélations liées aux fluctuations de la masse volumique qui s'y ajoutent. Pour illustrer cette situation, on peut se rendre compte (équation V.1) du nombre important d'inconnues à modéliser dans le cas des écoulements turbulents à densité variable, par rapport au cas isovolume (équation V.2) :

$$\overline{\rho U_i U_k} = \overline{\overline{\rho U_i}} \overline{\overline{U_k}} + \overline{\overline{\rho u_i' u_k'}} + \overline{\overline{\rho' u_k' U_i}}^{\frac{3}{2}} + \overline{\overline{\rho' u_i' U_k}}^{\frac{4}{2}} + \overline{\overline{\rho' u_i' u_k'}}^{\frac{5}{2}}$$
(V.1)

$$\overline{\rho U_i U_k} = \overline{\overline{\rho U_i}} \overline{\overline{U_k}} + \overline{\overline{\rho u_i' u_k'}}$$
(V.2)

En pratique, une connaissance de la nature et de l'origine de ces variations de densité peut mener quelques fois à des simplifications spécifiques des équations. Malheureusement, dans des situations d'applications concrètes (cas du moteur à piston par exemple) ces variations peuvent provenir simultanément de différents origines (compression d'ensemble, effets thermiques, inhomogènéité massique...) ce qui a pour conséquence d'accroître la difficulté du problème.

V.3 MODELISATION DE LA TURBULENCE DANS LE CAS DES MOTEURS A PISTON

Les premières tentatives de modélisation de l'effet de compression sur la turbulence dans le cas spécifique des moteurs à piston (cas le plus proche de la configuration de la MCR), consistaient à étendre le modèle $k - \varepsilon$ développé pour les écoulements incompressibles par Launder et Spalding [12], en ajoutant dans les termes de droite de l'équation de transport pour le taux de dissipation de k modélisée un terme représentant la compressibilité. La constante de modélisation relative au terme ajouté, découle naturellement d'une dérivation et elle est équivalente à 1; c'est le cas du modèle de Gosman et al. [13].

En 1980, Reynolds [14] constata que le modèle proposé par Gosman et Watkins prédit une augmentation de l'échelle de longueur de turbulence pendant la compression, quel que soit le taux de compression considéré. Il suggéra de modifier la modélisation de l'équation pour le taux de dissipation de k pour que ce modèle prédise correctement le cas simple d'une turbulence homogène soumise à une compression sphérique et rapide.

Les travaux de Reynolds ont été repris, par la suite, par Morel et Mansour [15]. Ces derniers ont généralisé son analyse, valable uniquement en compression sphérique, à une multitude de types de compression; en particulier, pour une compression axiale unidirectionnelle (cas du moteur à piston).

Récemment, l'examen des différents modèles proposés dans la littérature a permis à Coleman et Mansour [16-17] de constater que ces modèles ne prennent pas en compte les variations de la viscosité cinématique pendant la compression. Ils proposent alors un nouveau modèle $k - \overline{\omega}^2$. La démarche qu'ils ont utilisé consiste à formuler, tout d'abord, un modèle pour prédire une turbulence homogène et isotrope soumise à une compression sphérique et rapide. Les résultats issus de ce modèle sont comparés à ceux issus d'une simulation numérique directe. L'obtention d'un bon accord, leur permet d'espérer que ce modèle puisse être généralise pour prédire cerrectement le cas d'écoulements complexes.

V.4 MODELES ADOPTES

Dans le cadre de notre travail nous avons adopté deux modèles k-ɛ modifiés :

V.4.1 Modèle de Morel et Mansour

Ce modèle est basé sur l'extension des travaux de Reynolds à différents types de compression. L'approche adoptée, consiste à déterminer les constantes du modèle dans le cas de la compression rapide d'une turbulence homogène et isotrope. La rapidité est prise en compte pour négliger les effets de dissipation et rendre ainsi les équations plus simples.

V.4.1.1 Equations du modèle $k - \varepsilon$ de départ

Les équations du modèle $k - \varepsilon$ de départ sont celles proposées par Gosman et al. [13]. Celles-ci s'écrivent :

$$\overline{\rho}(\frac{\partial k}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial k}{\partial x_i}) = P_k - \overline{\rho}\varepsilon + \text{Diffusion}$$
(V.3)

$$\overline{\rho}(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i}) = \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon_1} P_k - C_{\varepsilon_2} \overline{\rho} \varepsilon) + \overline{\rho} \varepsilon \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_i} + \text{Diffusion}$$
(V.4)

 P_k est donné par l'expression II.30 du chapitre II, et C_{ϵ_1} et C_{ϵ_2} ont les mêmes valeurs que celles du modèle $k - \epsilon$ standard proposées dans le chapitre II. Par la suite on posera :

$$D = \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_i}$$
(V.5)

Comme il a déjà été signalé dans le paragraphe V.2, ce modèle n'est pas bien adapté au cas des écoulements compressibles. Cependant, il a été choisi pour la simplicité de sa formulation.

V.4.1.2 Cas d'une compression rapide / analyse de Reynolds

L'analyse de Reynolds consiste à appliquer le modèle $k - \varepsilon$ (équations V.3-V.4) pour étudier un écoulement subissant une compression rapide. Il exige du modèle une bonne reproduction du comportement de la turbulence homogène et isotrope subissant une telle compression.

Son étude a été effectuée, en prenant en compte les hypothèses suivantes :

1 La rapidité de la compression, considérée sphérique, entraîne l'élimination des termes de dissipation dans les équations.

2 Selon Hoult et al. [3], le moment angulaire de la turbulence est conservé dans le cas d'une compression sphérique. Ceci entraîne que le produit de l'échelle de longueur de turbulence par l'échelle de vitesse est constant pendant la compression :

$$lu' = \frac{k^2}{\varepsilon} = \text{ constante}$$
(V.6)

3 L'écoulement est supposé homogène, donc les termes de diffusion et de convection sont nuls.

En prenant en compte ces différentes hypothèses, on obtient :

$$\overline{\rho}\frac{\partial k}{\partial t} = -\frac{2}{3}\overline{\rho}kD \tag{V.7}$$

et

$$\overline{\rho}\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -\frac{4}{3}\overline{\rho}\varepsilon D \tag{V.8}$$

(V.8) est l'équation pour ε qui satisfait la contrainte (V.6).

Puisque l'équation (V.4) est réduite dans le cas particulier de la compression rapide à l'équation suivante :

$$\overline{\rho}\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} = \left(-\frac{2}{3}C_{\varepsilon_1} + 1\right)\overline{\rho}\varepsilon D \tag{V.9}$$

Reynolds suggère de remplacer l'équation (V.4) par une équation qui vérifie l'expression (V.8). Celle-ci s'écrit :

$$\overline{\rho}(\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial\varepsilon}{\partial t}) = \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon_1} P_k - C_{\varepsilon_2} \overline{\rho} \varepsilon) + (\frac{2}{3} C_{\varepsilon_1} - \frac{4}{3}) \overline{\rho} \varepsilon D + \text{Diffusion}$$
(V.10)

Morel et al. généralisent l'équation (V.10) de Reynolds en introduisant un coefficient C_{ϵ_1} comme inconnue :

$$\overline{\rho}(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial \varepsilon}{\partial t}) = \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon_1} P_k - C_{\varepsilon_2} \overline{\rho} \varepsilon) + (1 - C_{\varepsilon_3}) \overline{\rho} \varepsilon D + \text{Diffusion}$$
(V.11)

 C_{ϵ_3} est donné dans le cas particulier de la compression sphérique (cas traité par Reynolds) par son expression suivante :

$$C_{\varepsilon_3} = \frac{(7 - 2C_{\varepsilon_1})}{2} \tag{V.12}$$

V.4.1.3 Cas d'une compression axiale

Morel et Mansour ont repris les travaux de Reynolds en considérant le coefficient C_{ε_3} comme une inconnue à déterminer en fonction du type de compression. Ces auteurs ont constaté que le modèle proposé par Reynolds prédit une augmentation de k pendant la compression alors que le comportement de ε dépend fondamentalement de la valeur attribuée au coefficient C_{ε_3} . Pour mettre plus de lumière sur le problème et pour compléter ainsi les travaux de Reynolds, ils ont considéré une caractéristique supplémentaire de la turbulence, en l'occurrence l'échelle de longueur de turbulence qu'ils définissent par :

$$l = \frac{C_{\mu}^{\frac{3}{4}}k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon}$$
(V.13)

Ces auteurs montrent que la prédiction de l dépend aussi du coefficient C_{ϵ_3} , ils proposent de déterminer ce dernier en prenant en compte la contrainte supplémentaire suivante :

$$\rho^{p} l^{n} (\frac{k^{2}}{\epsilon})^{m} = \text{constante}$$
 (V.14)

Cette expression, généralisée à tous les types de compression, exprime la conservation du moment angulaire incluant la masse de l'élément fluide.

La différenciation des expressions (V.13) et (V.14) entraîne :

$$\overline{\rho}\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} = \frac{n + \frac{4}{3}m}{n + m}a\mu_t \frac{\varepsilon}{k}D^2 - (\frac{p + n + \frac{4}{3}m}{n + m})\overline{\rho}\varepsilon D$$
(V.15)

Cette expression est le cas général de l'équation de Reynolds V.8. m, n et p sont des paramètres à déterminer expérimentalement et a est une quantité qui représente le type de compression considérée (= 2 dans le cas de la compression axiale).

Pour déterminer les constantes du modèle qu'ils proposent, les auteurs procèdent à l'éclatement du terme de production dans l'équation V.4, celle-ci s'écrit alors :

$$\overline{\rho}(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i}) = \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon_1} P_1 + C_{\varepsilon_1} P_2 + C_{\varepsilon_1}) + \overline{\rho} \varepsilon D - C_{\varepsilon_2} \overline{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} + \text{Diffusion} \qquad (V.16)$$

avec :

$$P_{1} = 2\mu_{t}S_{ij}S_{ij}$$

$$P_{2} = -\frac{2}{3}\mu_{t}D^{2}$$

$$P_{3} = -\frac{2}{3}\overline{\rho}kD$$
(V.17)

 $C_{\epsilon_1}, C_{\epsilon_1}$ et C_{ϵ_1} sont des constantes du modèle à déterminer.

Dans le cas d'une compression rapide nous avons :

$$\overline{\rho}(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i}) = \frac{\varepsilon}{k} \left[\frac{2}{3} (1+a) C_{\varepsilon_1} \mu_t D^2 - \frac{2}{3} C_{\varepsilon_1} \mu_t D^2 - \frac{2}{3} C_{\varepsilon_1} \right] + \overline{\rho} \varepsilon D$$
(V.18)

La comparaison des équations (V.16) et (V.18) permet de fournir les valeurs suivantes :

$$C_{\varepsilon_{1}}' = C_{1} + a(C_{1} - \frac{3}{2} \frac{n + \frac{4}{3}m}{n + m})$$

$$C_{\varepsilon_{1}}'' = \frac{3}{2}(1 + \frac{p + n + \frac{4}{3}m}{n + m})$$
(V.19)

Avec ce choix de C_{ϵ_1} et C_{ϵ_1} le modèle génère des résultats qui satisfont la contrainte générale (V.15). Le paramètre C_{ϵ_3} est donné par l'expression suivante :

$$C_{\varepsilon_3} = \frac{2}{3} \left(C_{\varepsilon_1} - C_{\varepsilon_1} \right) \tag{V.20}$$

Dans l'absence de résultats expérimentaux pour la détermination de m, n et p, les auteurs font un choix simple qui suppose que l'échelle de longueur varie en fonction de la masse volumique de la manière suivante :

$$\overline{\rho}l^n = \text{constante}$$
 (V.21)

Finalement l'équation pour le taux de dissipation proposée par Morel et Mansour est la suivante :

$$\overline{\rho}(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i}) = \frac{\varepsilon}{k} \Big[2C_{\varepsilon_1} \mu_t S_{ij} S_{ij} - \frac{2}{3} C_{\varepsilon_1} \mu_t D^2 - \frac{2}{3} C_{\varepsilon_1} \overline{\rho} k D \Big] + \overline{\rho} \varepsilon D + \text{Diffusion} \quad (V.22)$$

La contrainte (V.21) permet de déduire les valeurs $C_{\epsilon_1}^{'}$ et $C_{\epsilon_1}^{''}$ pour une compression quelconque :

$$C'_{\epsilon_1} = C_1 + a(C_1 - 1.5)$$

 $C''_{\epsilon_1} = 3 + \frac{3}{2n}$
(V.23)

Dans le cas d'une compression uniaxiale les constantes du modèle de Morel et Mansour sont les suivantes :

$$C'_{\epsilon_1} = 1.32$$

 $C''_{\epsilon_1} = 4.50$ (V.24)

V.4.2 Modèle de Coleman et Mansour

Ce modèle repose en grande partie sur les travaux de Reynolds et Morel et al. Son originalité réside dans le fait qu'il tient compte de la variation de la viscosité cinématique, jusqu'au là négligée par les autres modèles, pour modéliser l'équation de transport pour ε . La modélisation est effectuée, en se basant sur la "TDR", dans le cas simple d'une turbulence homogène à faible nombre de Mach soumise à une compression sphérique et rapide. Les prédictions fournies par le modèle sont comparées ensuite aux résultats issus de la simulation numérique directe.

V.4.2.1 Modélisation de la compression rapide

L'objectif principal est la détermination d'une valeur appropriée du coefficient C_{ϵ_3} pour une meilleure prédiction d'une turbulence homogène soumise à une compression sphérique. Les auteurs considèrent comme équation de départ pour ϵ celle proposée par Reynolds. Celleci s'écrit :

$$\overline{\rho}(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i}) = \frac{\varepsilon}{k} \Big[C_{\varepsilon_1} P_k - C_{\varepsilon_2} \overline{\rho} \varepsilon \Big] + (1 - C_{\varepsilon_3}) \overline{\rho} \varepsilon D + \text{Diffusion}$$
(V.25)

Rappelons que le coefficient C_{ε_3} a été introduit par Reynolds dans l'équation (V.12) pour que l'équation pour ε soit exacte pour une compression sphérique et rapide. Dans ce cas le terme de production est $P_k = -2\overline{\rho}kD/3$, les termes de diffusion sont négligeables et l'quation (V.25) est réduite à :

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \left(-\frac{2}{3}C_{\varepsilon_1} + 1 - C_{\varepsilon_3}\right)D\varepsilon - C_{\varepsilon_2}\frac{\varepsilon^2}{k}$$
(V.26)

Pour mettre en évidence les variations de la viscosité cinématique, les auteurs utilisent l'équation pour l'enstrophie (intensité de fluctuation du tourbillon) à la place de l'équation pour ϵ . L'enstrophie est définie par [18] :

$$\omega^2 = \overline{\omega_i \omega_i} \tag{V.27}$$

Lorsqu'on se place dans l'hypothèse d'un écoulement homogène à faible nombre de Mach, l'enstrophie est liée au taux de dissipation de k par la relation suivante :

$$\omega^2 \equiv \frac{\varepsilon}{v} \tag{V.28}$$

Et l'équation représentant l'évolution de l'enstrophie s'écrit :

$$\frac{d\omega^2}{dt} = -\frac{4}{3}D\omega^2 + 2\overline{\omega_i\omega_ju_{i,j}} - 2\overline{\nu\omega_{i,j}\omega_{i,j}}$$
(V.29)

Sous l'hypothèse d'une compression rapide les deux derniers termes de droite sont négligeables devant le premier (voir [17]), l'équation (V.29) est réduite alors à :

$$\frac{d\omega^2}{dt} = -\frac{4}{3}D\omega^2$$
(V.30)

A ce stade les auteurs reprennent l'équation relative au taux de dissipation (V.26). L'injection de la relation (V.28) dans celle-ci nous fournit l'équation suivante :

$$\frac{d\omega^2}{dt} = \left[\left(-\frac{2}{3}C_{\epsilon_1} + 1 - C_{\epsilon_3} \right) D - \frac{1}{\nu} \frac{d\nu}{dt} - C_{\epsilon_2} \frac{\nu \omega^2}{k} \right] \omega^2$$
(V.31)

Sachant que le terme en C_{ϵ_2} est négligeable devant les autres puisque $\frac{Dk}{\epsilon} >> 1$ et $\frac{1}{\nu} \frac{d\nu}{dt}$ est de l'ordre de D, en comparant V.30 et V.31 nous obtenons :

$$C_{\varepsilon_3} = \frac{\left[7 - \frac{3}{D\nu} \frac{d\nu}{dt} - 2C_{\varepsilon_1}\right]}{3}$$
(V.32)

Dans le cas d'un gaz idéal à chaleur spécifique constante, la viscosité dépendant de la température est donnée par :

$$\mu(T) = \mu(T_0) \left(\frac{T}{T_0}\right)^n \tag{V.33}$$

Si en plus nous supposons que la compression est isentrope, on a :

$$\frac{1}{D\nu}\frac{d\nu}{dt} = 1 - n(\gamma - 1) \tag{V.34}$$

La prise en compte de V.33 et V.34 nous permet d'écrire à la place de V.32 la relation suivante :

$$C_{\epsilon_{3}} = \frac{\left[4 + 3n(\gamma - 1) - 2C_{\epsilon_{1}}\right]}{3}$$
(V.35)

V.5 ETUDE COMPARATIVE DES DIFFERENTS MODELES

V.5.1 Modèles testés

Nous présentons dans ce paragraphe (V.5) les résultats issus de différents tests des modèles k- ε suivants : modèle de Gosman et Watkins, modèle k- ε standard, modèle de Morel et Mansour et le modèle de Coleman et Mansour. Les constantes de modélisation relatives aux différents modèles sont rapportées dans le tableau V.1.

Modèle	C _{ɛ1}	C _{ɛ1}	$C_{\epsilon 1}''$	C _{E2}	C _{ɛ3}
k-ε de Gosman et al.	1.44	1.44	1.44	1.92	1.
k-ɛ standard	1.44	1.44	1.44	1.92	-1.0
k-ε de Morel et al.	1.44	1.32~1.4	3.5~4.5	1.92	1.
k-ε de Coleman et al.	1.44	1.44	1.44	1.92	$(4+3n(\gamma-1)-2C_{\varepsilon 1})/3$

Tableau V.1 Les constantes relatives aux différents modèles k-ɛ

Les conditions de calcul sont les mêmes que celles mentionnées au chapitre III (§ III.3). Cependant, les différents calculs ont été réalisés seuleument dans le cas non adiabatique (les mêmes fonctions de paroi de l'annexe IV ont été adoptées) et pour le maillage non uniforme M2.

Le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente initial est déterminé par la relation $\varepsilon_0 = \frac{C_{\mu}^{\frac{3}{4}}k_0^{\frac{3}{2}}}{l_0}$, où k₀ et l₀ sont considérés comme connus. Les modèles ont été testés en fonction des paramètres suivants : l'énergie cinétique turbulente initiale k_0 , le temps de compression et le type de vitesse de compression adopté pour le piston.

Les différents résultats présentés concernent, l'évolution en fonction du temps des valeurs sans dimension de k et l prises à chaque instant au centre de la chambre de combustion.

V.5.2 Influence de l'énergie cinétique initiale

Nous avons testé, dans un premier temps, les différents modèles en fonction de l'énergie cinétique turbulente initiale k_0 . Deux valeurs de celle-ci ont été prises en compte : $0.02 V_p^2$ et $0.1 V_p^2$.

Sur la figure V.1, nous représentons l'évolution de k prédite par les différents modèles dans le cas $k_0 = 0.02 V_p^2$. Nous pouvons constater, comme on pouvait s'y attendre, que le modèle de Gosman et Watkins surestime les valeurs de k par rapport aux autres modèles. Les modèles k- ε standard et Morel et al. prédisent une augmentation de k pendant la compression. Pour ces deux modèles, k atteint son maximum à l'approche du piston au PMH (ce maximum est plus important dans le cas du modèle k- ε standard) et il s'ensuit une diminution en post-compression qui est plus rapide dans le cas du modèle k- ε standard. Le modèle de Coleman et al., à l'inverse des autres modèles, prédit une évolution quasi-constante de k pendant une bonne partie de la phase de compression, suivie d'une diminution jusqu'à la fin de la compression où k atteint sa valeur minimale. En post-compression, k demeure constante pendant un intervalle de temps de l'ordre de 15 ms, puis elle augmente légèrement. Cette augmentation qui est surprenante et difficilement justifiable physiquement, dure quelques millisecondes ensuite k décroit à nouveau.

Sur la figure V.3, nous représentons l'évolution de k pour $k_0 = 0.1 V_p^2$. Pendant la phase de compression, nous pouvons constater que pour tous les modèles, k a tendance à subir un déclin et cela pendant un peu plus que la moitiè de la course du piston. Pendant la deuxième moitié de la course, le modèle de Gosman et al. prédit une augmentation assez rapide de k. Néanmoins, le maximum atteint toujours en fin de compression est très inférieur à celui atteint dans le cas $k_0 = 0.02 V_p^2$. Le modèle k- ε standard prédit une augmentation de k à l'approche du piston du PMH. Cependant, le maximum atteint en fin de compression est très inférieur à celui obtenu dans le cas $k_0 = 0.02 V_p^2$. Le même comportement est observé dans le cas du modèle de Morel et al., à la différence près que le maximum de k n'égale cette fois-ci même pas sa valeur initiale. En revanche le modèle de Coleman et al. prédit une diminution progressive de k pendant toute la phase de compression. Sa valeur minimale est atteinte en fin de compression. En post-compression, les quatres modèles prédisent le même comportement pour k que celui observé dans le cas $k_0 = 0.02 V_p^2$.

Sur les figures V.2 et V.4, nous représentons les valeurs sans dimension de l'échelle de longueur de turbulence l prédites par les quatres modèles de turbulence dans les deux cas $0.02 V_p^2$ et $0.1 V_p^2$. Dans ces deux cas, nous pouvons constater tout d'abord que le modèle de Gosman et al. prédit une augmentation de l pendant la compression. Les trois autres modèles fournissent des résultats plus réalistes, puisqu'ils prédisent une diminution continue de l du début jusqu'à la fin de la phase de compression. Cette diminution est d'autant plus rapide que l'énergie cinétique turbulente initiale est importante (cas $k_0 = 0.1 V_p^2$). La valeur minimale de l est atteinte, pour ces trois modèles, en fin de compression. Une légère augmentation est ensuite observée.



Figure V.1 Evolution de l'énergie cinétique turbulente k en fonction du temps au centre de la chambre de combustion pour différents modèles k- ε compression non adiabatique de 47 ms, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage M2, k₀ = $0.02 V_p^2$

6 A



Figure V.2 Evolution de l'échelle de longueur de turbulence l en fonction du temps au centre de la chambre de combustion pour différents modèles k-ε compression non adiabatique de 47 ms, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage M2, k₀ = 0.02V_p²



Figure V.3 Evolution de l'énergie cinétique turbulente k en fonction du temps au centre de la chambre de combustion pour différents modèles k- ε compression non adiabatique de 47 ms, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage M2, k₀ = 0.1V_p²



Figure V.4 Evolution de l'échelle de longueur de turbulence l en fonction du temps au centre de la chambre de combustion pour différents modèles k- ε compression non adiabatique de 47 ms, vitesse du piston basée sur les données expérimentales, maillage M2, k₀ = $0.1V_p^2$

V.5.3 Influence du temps de compression

L'influence du temps de compression sur le comportement de la turbulence dans la chambre de combustion de la machine a été effectuée en considérant une vitesse de compression plus rapide, en l'occurrence 29 ms. Nous pouvons constater sur la figure V.5, qu'une vitesse de compression plus rapide ne produit pas forcément des niveaux de turbulence plus élevés d'après les modèles k- ε standard, Morel et al. et Coleman et al. Le modèle de Gosman surestime toujours les valeurs de k par rapport aux autres modèles. Néanmoins, la valeur maximale atteinte en fin de compression dans ce cas est inférieure à celle obtenue dans le cas 47 ms.





V.5.4 Influence du type de compression

Nous avons aussi testé l'influence du type de vitesse de compression adopté pour le piston, sur le comportement de la turbulence. A cet effet, nous considérons ici le cas d'une vitesse moyenne de compression en 47 ms. Sur la figure V.6, nous pouvons constater que les différents modèles prédisent le même comportement pour l'énergie cinétique turbulente k. Cependant, les valeurs de cette dernière sont beaucoup moins élevées que celles prédites par les différents modèles dans le cas de la vitesse expérimentale. En outre, pour les modèles k- ε satndard et Morel et al., la valeur maximale de k est atteinte quelques millisecondes après la fin de la compression, ce qui parait a priori logique puisque le piston arrive au PMH avec une vitesse non nulle.



Figure V.6 Evolution de l'énergie cinétique turbulente k en fonction du temps au centre de la chambre de combustion pour différents modèles k-e

compression non adiabatique de 47 ms, vitesse moyenne du piston, maillage M2, $k_0 = 0.02 V_p^2$

CONCLUSION PARTIELLE

Dans le but de mieux appréhender l'évolution de la turbulence dans la chambre de combustion de la MCR, nous avons testé une série de modèles k- ε : le modèle de Gosman et Watkins, le modèle k- ε standard, le modèle de Morel et Mansour, et le modèle de Coleman et Mansour. Ensuite, nous avons procédé à une étude paramétrique et comparative de ces différents modèles.

Cette étude nous a révélée que les modèles k-ɛ standard et le modèle de Morel et Mansour prédisent le même comportement pour les caractéristiques de la turbulence. Le modèle de Gosman et Watkins qui prédit une augmentation de l'échelle de longueur de turbulence pendant la phase de compression n'est pas bien adapté à notre problème. En revanche, le modèle de Coleman et Mansour qui prédit une décroissance de l'énergie cinétique turbulente pendant la phase de compression, et donc un comportement de k différent de celui prédit par les modèles k-ɛ standard et Morel et al., nous met dans une situation difficile. En effet, vue que nous ne possédons pas de données expérimentales, nous nous trouvons dans l'incapacité de juger de la validité ou non de chacun de ces modèles.

Références Bibliographiques

[1] G.I. TAYLOR

"Turbulence in a Contracting Stream" Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik, 15, pp : 91-96, (1935).

[2] G.K. BATCHELOR & I. PROUDMAN

"The Effect of Rapid Distortion of a Fluid in Turbulent Motion" Quart. Journ. Mech. and Applied Math., 7, Part 1, pp : 83-103, (1954).

[3] D. P. HOULT & V. W. WONG

"The Generation of Turbulence in Internal Combustion Engine" Symp. on Comb. Modelling Reciprocating Engines, Plenum Press, pp : 131-160, (1980).

[4] J.C.R. HUNT

"A Review of the Theory of Rapidly Distorted Turbulent Flows and its Applications" Fluid Dynamics Transactions, 9, pp : 121-152, (1978).

[5] **P.O. WITZE**

"Measurements of the Spatial Distribution and Engine Speed Dependence of Turbulent Air Motion in an I.C. Engine" SAE Transactions, 86, Paper No. 770220, pp : 1012-1023, (1977).

[6] D.R. LANCASTER

"Effects of Engine Variables on Turbulence in a Spark-Ignition Engine" SAE Paper 760159, (1976).

[7] C.T. WU, J.H. FERZIGER & D.R. CHAPMAN

"Simulation and Modelling of Homogeneous Compressed Turbulence" Report No TF-21, Thermosciences Div., Dept. of Mech Engrg., Stanford University, (1985).

[8] P.E. WINSOR & D.J. PATTERSON "Mixture Turbulence-A Key to Cyclic Variation" SAE Paper No. 730086, (1973).

[9] C. ARCOUMANIS, A.F. BICEN & J.H. WHITELAW "Squish and Swirl-Squish Interaction in Motored Model Engines" ASME Journal of Fluids Engineering, 105, pp : 105-112, (1983).

[10] R.M. RICHMAN & W.C. REYNOLDS

"The Flow Diagnostics Engine : A New System for Piston Research" Report FDE-1, Thermosciences Div., Dept. of Mech. Engrg., Stanford University, Stanford, CA., (1982).

[11] HA MINH HIEU

"Modélisation de la Turbulence : Ses Aspects Physiques et son Impact sur la Simulation Numérique des Ecoulements Réels" 11^{éme} Congrès Français de Mécanique, Lille, 4-9 Sept., (1993).

[12] B.E. LAUNDER & D.B. SPALDING

"Mathematical Models of Turbulence" Academic Press, (1972).

[13] A.D. GOSMAN & A.P. WATKINS

"A Computer Prediction Method for Turbulent Flow and Heat Transfer in Piston/Cylinder Assemblies"

Proceedings of a Symposium on Turbulent Shear Flows, Pennsylvania State University Press, pp : 5.23-5.30, (1977).

[14] W.C. REYNOLDS

"Modeling of Fluid Motions in Engines : An Introductory Overview" Symp. on Comb. Modeling in Reciprocating Engines, Plenum Press, pp : 41-66, (1980).

[15] T. MOREL & N.N. MANSOUR

"Modeling of Turbulence in Internal Combustion Engines" SAE Paper 820 040, (1982).

[16] G.N. COLEMAN & N.N. MANSOUR

"Simulation and Modeling of Homogeneous Compressible Turbulence under Isotropic Mean Compression" 8th Symp. of Turbulent Sheer Flours, Munich, Sept. 0, 11 (1991)

8th Symp. of Turbulent Shear Flows, Munich, Sept. 9-11, (1991).

[17] G.N. COLEMAN & N.N. MANSOUR "Modeling the Rapid Spherical Compression of Isotropic Turbulence" Phys. Fluids., A, 3, (9), pp : 2255-2259, (1991).

[18] J. COUSTEIX "Turbulence et Couche limite"

Cepadues-Editions, (1989).

CONCLUSION GÉNÉRALE

CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES

Une étude numérique d'écoulements turbulents non réactifs, évoluant dans la chambre de combustion d'une machine à compression rapide (MCR), a été réalisée et confrontée à certaines données expérimentales.

La machine à compression rapide considérée, a été conçue et développée au Laboratoire de Cinétique et Chimie de la Combustion de Lille afin d'étudier les phénomènes d'autoinflammation à l'origine du cliquetis dans les moteurs à allumage commandé. Elle est équipée de dispositifs de diagnostic permettant, outre la mesure des délais d'autoinflammation des hydrocarbures dans une large gamme de température (600 - 900 K), de pression (3 - 16 bar) et de richesse (0.8 - 1.2), de suivre l'évolution chimique des produits avant et durant l'autoinflammation.

Nous avons montré dans la première partie de ce travail qu'une meilleure connaissance de l'environnement dans lequel évoluent les phénomènes de cliquetis et d'autoinflammation, repose sur l'étude détaillée des écoulements subissant la compression dans la chambre de combustion de la MCR. A cet effet, dans le cadre de nos travaux, nous nous sommes intéressé principalement à l'étude des écoulements non réactifs dans le but de mieux appréhender l'évolution de certains mécanismes tels que : les champs aérodynamiques et scalaires (notamment de température), les transferts thermiques, la turbulence...

Ensuite, l'étude d'un écoulement de fluide non réactif, en l'occurrence de l'azote pur, a été effectuée en fonction de deux paramètres principaux : l'adiabaticité du milieu étudié et le temps de compression. Pour trois temps de compression (29, 47, 86 ms) correspondant à une bonne gamme de mesures, les lois expérimentales de déplacement du piston en fonction du temps ont été prises en compte et les courbes de pression ont été relevées pendant les phases de compression et de post-compression.

L'approche numérique que nous avons utilisé et qui a constitué la majeure partie de notre travail, a été basée sur la simulation numérique de l'écoulement considéré par une version du code KIVA II modifié et adapté à la configuration particulière de la machine. Les différentes simulations ont été réalisées en respectant la configuration géométrique de la chambre de combustion (19.9 cm de course, 5 cm de diamètre, 2.26 de hauteur pour la chambre et un taux de compression de 9.8). Cette dernière étant axisymétrique, nous avons, en conséquence, utilisé le code dans sa version bidimensionnelle pour économiser les coûts de calcul.

Les différents résultats numériques présentés concernent l'évolution de certaines grandeurs physiques des écoulements étudiés pendant les deux phases de compression et de post-compression. Ces résultats ont été obtenus en fonction de quelques paramètres tels que le temps de compression et l'adiabaticité et, dans un premier temps, pour deux modèles de turbulence à une et deux équations.

A chaque fois qu'il était possible, nous avons procédé systématiquement à la comparaison des résultats issus de nos prédictions numériques à ceux issus de l'expérience. Lorsque ces derniers faisaient défaut, nous avons comparé dans la mesure du possible nos résultats numériques avec d'autres existant dans la littérature.

L'approche numérique nous a permis de caractériser, avec succès, les champs de vitesse et de température. Ainsi, l'hypothèse de l'existence d'un "coeur adiabatique" émise par de nombreux chercheurs a été confirmée. Nous avons, par ailleurs, pu constater que ce "coeur adiabatique" qui évolue d'une position centrale en fin de compression à une position en couronne en post-compression est localisé à chaque instant au même endroit que la zone de forte turbulence.

En système non adiabatique, un bon accord a été obtenu entre les valeurs des pressions moyennes et expérimentales pendant la phase de compression. Néanmoins, en postcompression le code conduit à une surestimation des valeurs des pressions moyennes par rapport aux valeurs expérimentales. Cette surestimation qui est d'autant plus importante que la vitesse de compression est lente est liée, à notre avis, aux fonctions de paroi que nous avons utilisé. En conséquence, il serait souhaitable pour l'amélioration du calcul de la pression de redéfinir des fonctions de paroi plus réalistes.

La dernière partie de ce travail a été consacrée à une étude paramétrique de la turbulence dans la chambre de combustion de la MCR. Pour ce faire, plusieurs modèles k- ε "modifiés" ont été testés après leur introduction dans le code. Quelques caractéristiques de la turbulence telles que l'énergie cinétique turbulente k et l'échelle de turbulence l ont été présentées en fonction de quelques paramètres (énergie cinétique initiale, temps de compression,...). Malheureusement, il nous a été difficile de nous prononcer sur la validité de ces différents modèles d'autant plus que nous manquons de données expérimentales.

En conclusion, l'étude à caractère principalement numérique que nous avons réalisé nous a permis de constituer une base de données très utile dans la mesure où les données expérimentales font défaut.

Une suite logique à ce travail serait l'introduction de mécanismes chimiques dans notre version modifiée du code KIVA II, afin de simuler les délais d'autoinflammation de certains hydrocarbures aliphatiques saturés et de les comparer par la suite aux délais mesurés. A cet effet, nous projetons de tester dans un premier temps un mécanisme semi-global de type Keck (réf. [19] chap. I). Il serait important de vérifier si ce type de mécanismes peut rendre compte de l'influence de la charge, de la richesse et de la structure de l'hydrocarbure.

ANNEXES

ANNEXE II.1

FORMULATION MIXTE EULERIENNE-LAGRANGIENNE (A.L.E)

Soit D(t) un domaine en mouvement avec une vitesse w(t) dans un repère eulérien (fixe) \Re , et G(x_i,t) une caractéristique physique du fluide. Lorsqu'on suit le domaine D(t) dans son mouvement la dérivée particulaire de G et la dérivée de son intégrale de volume s'expriment par les relations suivantes :

$$\frac{dG}{dt}\Big|_{w} = \lim_{dt\to0} \left[\frac{G(x_{i} + vdt, t + dt) - G(x_{i}, t)}{dt}\right] = \left[\frac{\partial G}{\partial t} + w.gradG\right]$$
(AII.1.1)

$$\frac{d}{dt}\Big|_{W}\int_{V}GdV = \lim_{dt\to 0}\left[\frac{\int_{V'}GdV' - \int_{V}GdV}{dt}\right]$$
(AII.1.2)

V et V' représentent le volume initial et le volume à l'instant dt du domaine D.

Sachant que :

$$\int_{V'} dV' = \int_{V} J dV$$
(AII.1.3)

avec J le jacobien de la transformation défini par :

$$J = 1 + \vec{dv w} dt$$
 (AII.1.4)

et que l'intégration sur le volume V' peut s'écrire en première approximation :

$$\int_{V'} G dV' = \int_{V} \left[G + \frac{dG}{dt} \Big|_{w} dt \right] J dV = \int_{V} \left[G + \frac{dG}{dt} \Big|_{w} dt + G div \vec{w} dt \right] dV$$
(AII.1.5)

et prenant en compte (AII.1.1), nous obtenons à la place de (AII.1.2) l'expression suivante :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big|_{\mathrm{w}} \int_{\mathrm{V}} \mathrm{G}\mathrm{d}\mathrm{V} = \int_{\mathrm{V}} \left[\frac{\partial \mathrm{G}}{\partial t} + \overset{\rightarrow}{\mathrm{div}}(\mathrm{w}\mathrm{G}) \right] \mathrm{d}\mathrm{V}$$
(AII.1.6)

Le remplacement de w par u (vitesse du fluide) fournit la dérivée de l'intégrale de volume de G lorsqu'on suit le fluide dans son mouvement. Celle-ci s'écrit :

$$\frac{d}{dt}\Big|_{u}\int_{V}GdV = \int_{V}\left[\frac{\partial G}{\partial t} + \vec{div}(uG)\right]dV$$
(AII1.7)

Les relations (AII.1.6) et (AII.1.7) entraînent :

$$\frac{d}{dt}\Big|_{w}\int_{V}GdV = \frac{d}{dt}\Big|_{u}\int_{V}GdV + \int_{V}\vec{div}[(w-u)G]dV$$
(AII.1.8)

Soit Γ la résultante des termes sources de la gandeur G par unité de volume, l'équation de conservation pour G s'écrit :

$$\frac{d}{dt}\Big|_{U}\int_{V}GdV = \int_{V}\Gamma dV = \Psi$$
(AII.1.9)

Finalement nous obtenons :

terme instationnaire $\underbrace{\frac{d}{dt}}_{W}\int_{V} G dV = \widehat{\Psi} + \underbrace{\int_{V} \operatorname{grad} (G(W-u)) dV}_{V} \quad (AII.1.10)$

Les relations (AII.1.9) et (AII.1.10) représentent ensemble la formulation mixte eulérienne-lagrangienne. Nous voyons bien que cette formulation permet de décomposer l'opérateur différentiel temporel en deux termes; ce qui permet en conséquence d'effectuer le calcul en deux étapes B et C : 1/ L'étape B purement lagrangienne (w = 0, on suit le fluide avec sa vitesse u) permet de calculer la variation de la grandeur G due aux termes sources (pression, diffusion,....) en utilisant la relation (AII.1.9).

2/ L'étape C eulérienne (prenant en compte le déplacement du maillage avec la vitesse arbitraire w) permet de calculer la variation de G due aux phénomènes de convection qui résultent de la différence entre la vitesse du fluide et celle du maillage.

Pour illustrer l'intérêt pratique de cette formulation, nous proposons de l'appliquer, par exemple, à l'équation de conservation de la quantité de mouvement (bien entendu nous procédons de la même manière pour les différentes équations de conservation). Il vient alors :

pour la phase B :

$$\frac{d}{dt}\Big|_{u}\int_{V}\rho u dV = \int_{V} \overrightarrow{div} \tau \, dV - \int_{V} \overrightarrow{grad} \, p \, dV$$
(AII.1.1)

et pour la phase C :

$$\left[\frac{d}{dt}\Big|_{w} - \frac{d}{dt}\Big|_{u}\right] \int_{V} \rho \, u \, dV - \int_{\Sigma} \rho \, u \, (w - u) \, n \, ds = 0 \tag{AII.1.12}$$

ANNEXE II.2 Détermination du paramètre PGS dans le code KIVA II

Le paramètre α , appelé paramètre pgs, est déterminée dans le code KIVA II de telle manière que les perturbations de pression δp_{α} soient faibles devant la pression moyenne \overline{p} . Ceci se traduit par l'expression suivante :

$$\frac{\delta \mathbf{p}_{\alpha}}{\overline{\mathbf{p}}} \le 0.04 \tag{AII.2.1}$$

L'algorithme permettant de calculer α est le suivant :

Nous calculons tout d'abord $\frac{\delta p_{\alpha}}{\overline{p}}$ pendant chaque cycle n de la façon suivante :

$$\left(\frac{\delta p_{\alpha}}{\overline{p}}\right)^{n} = \underset{ijk}{\operatorname{Max}} \frac{\left|p_{ijk}^{B} - \overline{p}^{n}\right|}{\overline{p}^{n}}$$
(AII.2.2)

 p_{ijk}^{B} est la valeur de la pression dans une cellule (ijk) calculée pendant la phase lagrangienne B. \overline{p}^{n} est la pression moyenne correspondant à un cycle n du calcul, celle-ci est définie par :

$$\overline{p}^{n} = \frac{\sum_{ijk} p^{B}_{ijk} V^{B}_{ijk}}{\sum_{ijk} V^{B}_{ijk}}$$
(AII.2.3)

 V_{ijk}^{B} est le volume d'une cellule (ijk) durant la phase lagrangienne B.

La méthode pgs a pour effet d'augmenter les fluctuations de pression par un facteur α^2 . Ceci étant, $\frac{\delta p_{\alpha}}{\overline{p}}$ est donc proporionnel à α^2 :

$$\frac{\delta p_{\alpha}}{\overline{p}} \propto \alpha^2 \tag{AII.2.4}$$

Soit α^* la valeur de α qui permet de prendre en compte une fluctuation de pression relative maximale, en l'occurence 0.04. Si $\alpha^* = \alpha^{n+1}$, alors nous avons d'après la relation (AII.2.4):

$$\frac{\alpha^{*}}{\alpha^{n}} = \left[0.04 \left(\frac{\delta p_{\alpha}}{\overline{p}}\right)\right]^{\frac{1}{2}}$$
(AII.2.5)

Cette relation permet de calculer les valeurs successives du paramètre α relatives à chaque cycle de calcul. Cependant, elle génère de sévères oscillations à cause de l'hypothèse de départ qui consiste à prendre $\alpha^* = \alpha^{n+1}$. Pour éviter ces oscillations les auteurs de KIVA II introduisent une relaxation qui permet d'obtenir une évolution plus lisse du paramètre α :

$$\alpha^{n+1} = \begin{cases} \alpha^{n} & \text{si } \alpha^{*} < \alpha^{n} \\ \alpha^{n} + \frac{\Delta t}{\tau_{r}} (\alpha^{*} - \alpha^{n}) & \text{si } \alpha^{*} > \alpha^{n} \end{cases}$$
(AII.2.6)

Ainsi, si $\alpha^* > \alpha^n$, α peut atteindre sa valeur α^* souhaitée avec un temps de relaxation τ_r . Ce dernier est pris dans Kiva II comme le maximum de $20\Delta t^n$ (Δt est le pas temps principal) et de 4 fois le temps caractéristique des ondes acoustiques se propageant à travers le domaine de calcul de longueur L. Il vient :

$$\tau_{\rm r} = \max\left\{20\,\Delta t^{\rm n}, \frac{4\,L\alpha^{\rm n}}{\bar{\rm c}}\right\} \tag{AII.2.7}$$

où

$$\overline{\mathbf{c}} = \sqrt{\frac{1.4\,\overline{\mathbf{p}}}{\overline{\boldsymbol{\rho}}}} \tag{AII.2.8}$$

ANNEXE II.3 Schéma de convection "Quasi Second Order Upwind"

Pour mieux comprendre les qualités du schéma de convection "Q.S.O.U", nous proposons de montrer sa supériorité par rapport à une une famille de schémas de convection classiques présentés sur la figure AII.3.1 pour la densité ρ en monodimensionnel.



Figure 1 : différences amont



Figure 2 : différences centrées







Dans ces figures, les points (•) représentent les densités au pas de temps précédent et les traits continus les profils de densité. Pour chaque schéma, l'aire se trouvant entre les points A et B est le profil correspondant à la masse convectée à travers la section qui se déplace du point A au point B, et la surface hachurée représente la densité totale.

Avant d'abordrer ces différents schémas, nous commencons par rappeler quelques définitions.

Soit ρ_i la valeur de la densité ρ au point x_i . La fonction ρ est dite :

:

:

monotone croissante si : $x_1 < x_2 \Rightarrow \rho_1 \le \rho_2$ (AII.3.1)

monotone décroissante si

$$\mathbf{x}_1 < \mathbf{x}_2 \Rightarrow \rho_1 \ge \rho_2 \tag{AII.3.2}$$

faiblement monotone si

$$\begin{cases} \rho_i^n \le \rho_{i+1}^n \le \rho_{i+2}^n \\ x_i^n \le x_{i+1}^n \le x_{i+2}^n \end{cases} \implies \rho_i^n \le \rho_{i+1}^n \le \rho_{i+2}^n \qquad (AII.3.3)$$

fortement monotone si

$$\begin{cases} \rho_{i}^{n} \leq \rho_{i+1}^{n} \leq \rho_{i+2}^{n} \leq \rho_{i+3}^{n} \\ x_{i}^{n} \leq x_{i+1}^{n+1} \leq x_{i+2}^{n+1} \leq x_{i+3}^{n} \end{cases} \implies \rho_{i}^{n} \leq \rho_{i+1}^{n} \leq \rho_{i+2}^{n} \leq \rho_{i+3}^{n} \quad (AII.3.4)$$

La monotonie représente un grand avantage pour les schémas de convection, puisqu'elle assure la régularité de la fonction au voisinage des interfaces comme nous pouvons le constater sur la figure AII.3.1.

Revenons, maintenant, aux différents schémas représentés sur la figure AII.3.1 afin de discuter les caractéristiques de chacun d'eux :
1 Schéma aux différences amonts (figure 1)

Ce schéma consiste à prendre en compte une valeur constante de la fonction ρ à l'intérieur de chaque cellule (profil plat) et attribue une valeur dans la cellule amont à l'interface entre deux cellules voisines. Les profils étant plats, les pents sont donc nulles et la monotonie est forte. Ce schéma est du premier ordre en espace mais il est diffusif.

2 <u>Schéma aux différences centrées</u> (figure 2)

Ce schéma est basé sur la prise en compte d'un gradient centré. La pente $\frac{\partial \rho}{\partial x}$ dans chaque cellule est définie par :

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial x} \right|_{i} = \frac{\rho_{i+1} - \rho_{i-1}}{2\Delta x}$$
(AII.3.5)

Ce schéma est stable et précis au second ordre en espace. Cependant, il n'est pas faiblement monotone puisque les profils de densité dans les régions à fort gradient peuvent présenter des "undershoots" ou des "overshoots". En effet, sur la figue 2, le profil de densité dans la cellule i+1 présente des valeurs plus petites que ρ_i^n et en conséquence ρ_{i+1}^{n+1} (moyenne du profil sur la surface hachurée) est plus petit que ρ_i^n

3 Schéma de Van Leer¹ (figure 3)

Le schéma de Van Leer permet de corriger le problème posé par les différences centrées en limitant la pente $\frac{\partial \rho}{\partial x}\Big|_i$ à une valeur assez petite pour que le profil de densité dans la cellule i ait des valeurs comprises entre ρ_{i-1}^n et ρ_{i+1}^n . Si ρ_i^n n'est pas compris entre ρ_{i-1}^n et ρ_{i+1}^n , alors $\frac{\partial \rho}{\partial x}\Big|_i$ est nulle. Les changements qui en résultent pour le profil dans la cellule i+1 est montré dans la figure 3.

¹B. Van Leer

[&]quot;Toward the Ultimate Conservative Difference Scheme, V. A Second-Order Sequel to Goudonov's Method" J. of Comp. Phys., 32, pp : 101-136 (1979).

Ce schéma est faiblement monotone et précis au second ordre. Cependant, il n'est pas fortement monotone. En effet, si le côté gauche de la cellule i passe du point C au point D (figure 3) nous aurons $\rho_i^{n+1} > \rho_{i+1}^{n+1}$ alors que les valeurs $\rho_{i-1}^n, \rho_i^n, \rho_{i+1}^n$ et ρ_{i+2}^n sont monotones croissantes.

4 Schéma Q.S.O.U (figure 4)

Basé sur le schéma de Van Leer, le schéma "Quasi Second Order Upwind" a été conçu pour satisfaire la condition d'un profil monotone et pour être par conséquent fortement monotone. Il peut aussi être appelé schéma du gradient minimum puisque si ρ_i^n est compris entre ρ_{i-1}^n et ρ_{i+1}^n alors la valeur de la pente est la suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial x}\Big|_{i} = \min\left[\frac{\rho_{i+1}^{n} - \rho_{i}^{n}}{\Delta x}, \frac{\rho_{i}^{n} - \rho_{i-1}^{n}}{\Delta x}\right]$$
(AII.3.6)

$$0 \le \frac{\partial \rho}{\partial x}\Big|_{i-1} \le \frac{\rho_i^n - \rho_{i-1}^n}{\Delta x} \quad \text{et} \quad 0 \le \frac{\partial \rho}{\partial x}\Big|_{i+1} \le \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_i^n}{\Delta x}$$
(AII.3.7)

Nous pouvons constater à partir de ces relations que les profiles de densité sont monotones croissants dans les cellules i-1, i et i+1.

Ce schéma est précis au second ordre en espace seulement lorsque $\frac{\rho_{i+1}^n - \rho_i^n}{\Delta x}$ est une constante indépendante de i. Néanmoins, il devient quasiment du secod ordre lorsque $\frac{\rho_{i+1}^n - \rho_i^n}{\Delta x}$ varie lentement. Si $\frac{\rho_{i+1}^n - \rho_i^n}{\Delta x}$ est nulle, le schéma QSOU est réduit alors à un schéma aux différences amonts (figure 1).

Dans ce qui suit nous décrivons le fonctionnement de ce schéma dans le cas monodimensionnel et pour des cellules de maillage de dimension variable.

Soit:
$$\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$$
 et $\Delta \rho_i = \rho_{i+1} - \rho_i$

On commence par calculer tout d'abord les valeurs des pentes dans chaque cellule :

$$\frac{\partial \rho}{\partial x}\Big|_{i} = \begin{cases} \operatorname{signe}(\Delta \rho_{i}) \min\left(\frac{|\Delta \rho_{i}|}{\Delta x_{i}}, \frac{|\Delta \rho_{i-1}|}{\Delta x_{i-1}}\right) & \operatorname{si} \quad \Delta \rho_{i} \Delta \rho_{i-1} > 0 \\ 0 & \operatorname{si} \quad \Delta \rho_{i} \Delta \rho_{i-1} < 0 \end{cases}$$
(AII.3.8)

Ensuite, la valeur de la densité ρ_{α} utilisée pour le calcul du flux de densité à travers la face α entre la cellule i et i+1 est donnée par :

$$\rho_{\alpha} = \begin{cases} \rho_{i} + \frac{\partial \rho}{\partial x} \Big|_{i} (x_{\alpha} - x_{i}) \left(1 - \frac{\delta V_{\alpha}}{V_{i}} \right) & \text{si } \delta V_{\alpha} > 0 \\ \rho_{i+1} - \frac{\partial \rho}{\partial x} \Big|_{i+1} (x_{i+1} - x_{\alpha}) \left(1 + \frac{\delta V_{\alpha}}{V_{i+1}} \right) & \text{si } \delta V_{\alpha} < 0 \end{cases}$$
(AII.3.9)

Dans cette expression x_{α} permet de localiser la face α sur l'axe x, V_{α} est le flux de volume (pris positif si la cellule i est à l'amont) et V_i est le volume de cette cellule.

Il y a plusieurs possibilités d'extension de cette méthode au cas tridimensionnel. L'une de ces possibilités consiste à supposer que le flux d'une quantité ρ dans chacune des directions ne dépendant que du gradient dans cette direction. Considérons la détermination des quantités ρ_{α}^{ν} , où ρ est l'une des quantités centrées dont on veut calculer le flux convectif, ν le nombre de sous-cycle convectif et α est la face commune aux cellules (i,j,k) et (i+1,j,k). La dérivée de ρ dans la direction i (opération analogue pour les autres directions) est fournie par la relation AII.3.8, il vient :

$$\frac{\partial \rho}{\partial s}\Big|_{i}^{\nu} = \begin{cases} \operatorname{signe}(\Delta \rho_{i}^{\nu}) \min\left(\frac{\left|\Delta \rho_{i}^{\nu}\right|}{\Delta x_{i}}, \frac{\left|\Delta \rho_{i-1}^{\nu}\right|}{\Delta x_{i-1}}\right) & \operatorname{si} \quad \Delta \rho_{i}^{\nu} \Delta \rho_{i-1}^{\nu} > 0 \\ 0 & \operatorname{si} \quad \Delta \rho_{i}^{\nu} \Delta \rho_{i-1}^{\nu} < 0 \end{cases}$$
(AII.3.10)

avec :

$$\Delta \rho_{i}^{v} = \rho_{i+1,j,k}^{v} - \rho_{i,j,k}^{v}$$

$$\Delta x_{i} = x_{i+1,j,k}^{c} - x_{i,j,k}^{c}$$
(AII.3.11)

où $x_{i,j,k}^{c}$ est la moyenne des quatres positions de la face α .

 ρ_{α}^{ν} est obtenue par extension de la relation (AII.3.9) :

$$\rho_{\alpha}^{\nu} = \begin{cases} \rho_{i,j,k}^{\nu} + \frac{\partial \rho}{\partial s} \Big|_{i,j,k}^{\nu} \Big| x_{\alpha} - x_{i,j,k}^{c} \Big| \left(1 - \frac{\delta V_{\alpha}}{V_{i,j,k}^{\nu}} \right) & \text{si } \delta V_{\alpha} > 0 \\ \\ \rho_{i+1,j,k}^{\nu} - \frac{\partial \rho}{\partial s} \Big|_{i+1,j,k}^{\nu} \Big| x_{\alpha} - x_{i+1,j,k}^{c} \Big| \left(1 + \frac{\delta V_{\alpha}}{V_{i+1,j,k}^{\nu}} \right) & \text{si } \delta V_{\alpha} < 0 \end{cases}$$
(AII.3.12)

 $V_{i,j,k}^{\nu}$ est le volume de la cellule (i,j,k) après ν sous cycles convectifs, les x_{α} sont les nouvelles positions des quatres sommets de la face α et δV_{α} est le flux de volume associé à la face α . Ce dernier est positif si le volume de la cellule (i+1,j,k) augmente, dans ce cas la cellule (i,j,k) est la cellule amont. Dans le cas contraire c'est la cellule (i+1,j,k) qui est la cellule amont.

Dans le cas où la face α se trouve sur les frontières du domaine de calcul (paroi solide par exemple), une description particulière est nécessaire. En effet, dans ce cas la dérivée de la fonction ρ doit être prise égale à 0 :

$$\frac{\partial \rho}{\partial s}\Big|_{i,j,k}^{v} = 0 \tag{AII.3.13}$$

Pour l'évaluation du flux de quantité de mouvement à travers les différentes interfaces des cellules de quantités de mouvement, on a besoin des valeurs du vecteur vitesse u_{β}^{ν} sur ces interfaces. De la même manière que pour les quantités centrées, on commence par calculer les dérivées de u dans les différentes directions. Il vient pour la direction i :

$$\frac{\partial u}{\partial s}\Big|_{i,j,k}^{\nu} = \begin{cases} \operatorname{signe}(\Delta u_{i}^{\nu}) \min\left(\frac{\left|\Delta u_{i}^{\nu}\right|}{\Delta x_{i}}, \frac{\left|\Delta u_{i-1}^{\nu}\right|}{\Delta x_{i-1}}\right) & \operatorname{si} \quad \Delta u_{i}^{\nu} \Delta u_{i-1}^{\nu} > 0 \\ 0 & \operatorname{si} \quad \Delta u_{i}^{\nu} \Delta u_{i-1}^{\nu} < 0 \end{cases}$$
(AII.3.14)

avec :

$$\Delta u_{i}^{\nu} = u_{i+1,j,k}^{\nu} - u_{i,j,k}^{\nu}$$

$$\Delta x_{i} = x_{i+1,j,k}^{n+1} - x_{i,j,k}^{n+1}$$
(AII.3.15)

Si le sommet (i,j,k) est sur la frontière, la valeur de la dérivée est nulle.

Le calcul de u_{β}^{ν} pour les vitesses aux interfaces s'effectue de la même manière que pour les quantités centrées. Néanmoins, dans ce cas il est plus convenable de baser le calcul des flux de quantité de mouvement sur le taux de flux massique que sur le taux de flux volumique. Il vient alors :

$$u_{\alpha}^{\nu} = \begin{cases} u_{i,j,k}^{\nu} + \frac{\partial u}{\partial s} \Big|_{i,j,k}^{\nu} \frac{\left| x_{n+1,j,k}^{n+1} - x_{i,j,k}^{n+1} \right|}{2} \left(1 - \frac{(\delta M_{\beta}^{c})^{\nu}}{(M_{\beta}^{0})^{\nu}} \right) & \text{si} \quad (\delta M_{\beta}^{c})^{\nu} > 0 \\ u_{i+1,j,k}^{\nu} - \frac{\partial u}{\partial s} \Big|_{i+1,j,k}^{\nu} \frac{\left| x_{n+1,j,k}^{n+1} - x_{i,j,k}^{n+1} \right|}{2} \left(1 + \frac{\delta V_{\alpha}}{V_{i+1,j,k}^{\nu}} \right) & \text{si} \quad (\delta M_{\beta}^{c})^{\nu} < 0 \end{cases}$$
(AII.3.16)

où $(\delta M_{\beta}^{c})^{\nu}$ est le flux de masse à travers la face β pendant le sous cycle de calcul ν et $(M_{\beta}^{0})^{\nu}$ la masse de la cellule de quantité de mouvement. Le flux $(\delta M_{\beta}^{c})^{\nu}$ est pris positif si la masse associée au point (i+1,j,k) est augmenté par le déplacement de la face β et négatif dans le cas contraire.

ANNEXE III LA MÉTHODE D'INTERPOLATION "CUBIC SPLINES"

L'interpolation "Cubic Splines" est une approximation polynômiale utilisant des polynômes cubiques entre chaque paire de points qui sont régulièrement ou irrégulièrement espacés et dont les coordonnées sont connues.

Soit f une fonction définie sur [a,b] avec $a = x_0 < x_1 \dots < x_n = b$, S est l'"interpolante cubic plines" de f si elle satisfait les conditions suivantes :

- 1/ S est un polynôme cubique, noté S_j sur les sous-intervalles $[x_j, x_{j+1}]$ avec j = 0, 1, ..., n-1;
- 2/ S(x_j) = f(x_j) j = 0, 1,....n;
- 3/ $S_{i+1}(x_{i+1}) = S_i(x_{i+1})$ j = 0, 1,.....n-2, exprime la continuité de S en chaque point;

4/ $S'_{j+1}(x_{j+1}) = S'_j(x_{j+1})$ j = 0, 1,.....n-2, exprime la continuité de la dérivée première de S en chaque point;

5/ $S'_{j+1}(x_{j+1}) = S''_j(x_{j+1})$ j = 0, 1,.....n-2, exprime la continuité de la dérivée seconde de S en chaque point;

6/ Conditions aux limites sur les bords de l'intervalle [a, b].

L'"interpolante" S est alors obtenue, en l'écrivant sous la forme suivante :

$$S_j(x) = a_j + b_j(x - x_j) + c_j(x - x_j)^2 + d_j(x - x_j)^3$$
 $j = 0, 1, ..., n-1$ (AIII.1)

Les paramètres a_j, b_j, c_j et d_j sont à déterminer à partir des conditions 2-6 écrites ci-dessus.

Nous avons, tout d'abord, en appliquant la condition 2 :

$$\mathbf{a}_{\mathbf{j}} = \mathbf{S}_{\mathbf{j}}(\mathbf{x}_{\mathbf{j}}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}_{\mathbf{j}}) \tag{AIII.2}$$

et l'application de la condition 3 entraîne :

$$a_{j+1} = S_{j+1}(x_{j+1}) = S_j(x_{j+1}) = a_j + b_j \Delta x_j + c_j \Delta x_j^2 + d_j \Delta x_j^3 \quad j = 0, 1, \dots, n-2$$
(AIII.3)

avec :

$$\Delta x_j = x_{j+1} - x_j$$
 $j = 0, 1, ..., n-1$ (AIII.4)

Si en plus, nous écrivons $a_n = f(x_n)$ alors (AIII.3) est valable pour j = 0, 1, ..., n-1.

D'une manière similaire, $b_n = S'(x_j)$ et $S'_j = b_j + 2c_j(x - x_j) + 3d_j(x - x_j)^2$ entraînent :

$$b_j = S'_j(x_j)$$
 $j = 0, 1, ..., n-1$ (AIII.5)

L'application de la condition 4 implique :

$$b_{j+1} = b_j + 2c_j \Delta x_j + 3d_j \Delta x_j^2$$
 $j = 0, 1, ..., n-1$ (AIII.6)

En posant $c_n = S''(x_n)/2$ et en appliquant la condition 5, nous obtenons :

$$c_{j+1} = c_j + 3d_j\Delta x_j$$
 $j = 0, 1, ..., n-1$ (AIII.7)

La valeur de d_i déduite de la relation (AIII.7) s'écrit :

$$\mathbf{d}_{j} = \frac{1}{3\Delta \mathbf{x}_{j}} (\mathbf{c}_{j+1} - \mathbf{c}_{j}) \tag{AIII.8}$$

En prenant en compte AIII.8, les équations (AIII.3) et (AIII.6) s'écrivent :

$$a_{j+1} = a_j + b_j \Delta x_j + \frac{\Delta x_j^2}{3} (2c_j + c_{j+1})$$
 $j = 0, 1, ..., n-1$ (AIII.9)

et

$$\mathbf{b}_{j+1} = \mathbf{b}_j + \Delta \mathbf{x}_j (\mathbf{c}_j + \mathbf{c}_{j+1})$$
 j = 0, 1,..., n-1 (AIII.10)

La relation (AIII.9) nous permet d'écrire :

$$\begin{cases} b_{j} = \frac{1}{\Delta x_{j}} (a_{j+1} - a_{j}) - \frac{\Delta x_{j}}{3} (2c_{j} + c_{j+1}) \\ b_{j-1} = \frac{1}{\Delta x_{j-1}} (a_{j} - a_{j-1}) - \frac{\Delta x_{j-1}}{3} (2c_{j-1} + c_{j}) \end{cases}$$
(AIII.11)

En substituant les relations (AIII.11) dans l'équation (AIII.10), on obtient le système d'équations linéaires suivant :

$$\Delta x_{j-1}c_{j-1} + 2(\Delta x_{j-1} + \Delta x_j) + \Delta x_jc_{j+1} = \frac{3}{\Delta x_j}(a_{j+1} - a_j) - \frac{3}{\Delta x_{j-1}}(a_j - a_{j-1})$$
(AIII.12)

Ce système doit être écrit pour j = 1, 2,..., n-1. On obtient donc n-1 équations linéaires entre les n+1 inconnues $c_0, c_1, ..., c_n$. Les $\{\Delta x_j\}_{j=0}^{n-1}$ et $\{a_j\}_{j=0}^n$ sont donnés réspectivement par les valeurs des $\{x_j\}_{j=0}^n$ et les valeurs de la fonction f en ces points. Il s'ensuit que deux valeurs c_0, c_n sont arbitraires, celles-ci sont données généralement comme conditions aux limites (condition 6 citée au début de l'annexe) de la manière suivante :

$$\begin{cases} S''(x_0) = 0. \\ S''(x_n) = 0. \end{cases} \implies \begin{cases} c_0 = 0. \\ c_n = 0. \end{cases}$$
(AIII.13)

Le système (AIII.12) est non seuleument linéaire mais présente aussi une matrice tridiagonale, sa solution est obtenue aisemment à l'aide d'un algorithme de Thomas.

Les valeurs des $\{c_j\}_{j=0}^{n}$ étant obtenus, on peut déterminer les constantes $\{b_j\}_{j=0}^{n-1}$ à partir de la relation (AIII.11) et $\{d_j\}_{j=0}^{n-1}$ à partir de la relation (AIII.8); et en conséquence, nous pouvons construire les polynômes cubiques $\{S_j\}_{i=0}^{n-1}$.

ANNEXE IV

ÉTUDE ASYMPTOTIQUE D'UNE COUCHE LIMITE THERMIQUE ET TURBULENTE. DÉTERMINATION DES FONCTIONS DE PAROI.

Les transferts thermiques aux parois de la chambre de combustion de la MCR influencent considérablement l'ensemble des phénomènes aérothermochimiques internes, en particulier, par leur action sur les caractéristiques thermodynamiques des gaz. Ces transferts thermiques sont assez complexes dans la mesure où ils se manifestent dans une large gamme de modes d'échanges (convection turbulente entre les gaz et la paroi, rayonnement des gaz chauds vers les parois, la conduction dans les parois de la chambre...). Devant une telle complexité, on se limite en général à l'étude de la convection turbulente entre les gaz et les parois.

A cet effet, on considère un domaine d'échange thermique materialisé par une couche limite trés peu épaisse de l'ordre du millimètre. Une modélisation numérique de l'écoulement dans cette couche pourrait fournir les éléments nécessaires pour un contrôle efficace des échanges thermiques. Cependant, le calcul nécessiterait un maillage tellement fin qu'il entraînerait un temps de calcul prohibitif. En conséquence, les fonctions de paroi (solutions analytiques des équations simplifiées de la couche limite) se présentent comme une alternative permettant de reproduire le comportement de la couche limite et de déduire les pertes de chaleur et les contraintes de cisaillement à la paroi.

Equations de la couche limite

Les équations simplifiées de la couche limite de type celles de Launder et al. (réf. [5], chap. IV) sont obtenues à partir des équations (II.16, II.17, II.18, II.31 et II.32) auxquelles on a imposé les hypothèses suivantes :

1 L'écoulement est quasi-permanent.

- 2 Le vecteur vitesse est parallèle à la paroi et ne varie que dans la direction normale à celle-ci.
- 3 Les nombres de Reynolds locaux sont considérés grands ($\mu >> \mu_1$).
- 4 Les nombres de Mach sont considérés petits, de telle manière que le taux de dissipation de k représente une source négligeable à l'énergie interne.
- 5 La chaleur spécifique à pression constante est supposée constante.
- 6 Les gradients de pression dans la direction de l'écoulement sont supposés négligeables.
- 7 Le paramètre $\xi = \frac{J_p P_r}{\rho u^* C_p T_p} \ll 1$ représentant la perte de chaleur sans dimension à la

paroi, est pris comme paramètre de perturbation pour l'obtention d'une solution d'approximation.

En prenant en compte toutes ces hypothèses les équations de la couche limite s'écrivent :

$$\frac{\partial}{\partial y}(\mu \frac{\partial u}{\partial y}) = 0 \tag{AIV.1}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) = 0 \tag{AIV.2}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\mu_{t}}{\sigma_{k}}\frac{\partial k}{\partial y}\right) + \mu_{t}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^{2} - \rho\varepsilon = 0$$
(AIV.3)

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\mu_{t}}{\sigma_{\varepsilon}}\frac{\partial\varepsilon}{\partial y}\right) + C_{\varepsilon 1}\frac{\varepsilon}{k}\mu_{t}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^{2} - C_{\varepsilon 2}\rho\frac{\varepsilon^{2}}{k} = 0$$
(AIV.4)

 $p = \rho RT = cste$ (AIV.5)

avec :

$$\mu_{t} = C_{\mu}\rho \frac{k^{2}}{\epsilon}$$

$$\lambda = \frac{\mu_{t}C_{p}}{P_{r}}$$
(AIV.6)

Remarque : Les différentes grandeurs u, T... représentent des moyennes statistiques. Les symboles de la moyenne statistique n'apparaissant pas dans cette annexe pour éviter toute confusion avec la notation propre à l'analyse "addimensionnelle" qui sera envisagée par la suite.

A la place de AIV.1-AIV.5 nous pouvons aussi écrire :

$$\mu \frac{\partial u}{\partial y} = \tau_p \tag{AIV.7}$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial y} = J_p \tag{AIV.8}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\mu_{t}}{\sigma_{k}}\frac{\partial k}{\partial y}\right) + \mu_{t}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^{2} - \rho\varepsilon = 0 \tag{AIV.9}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_{\epsilon}} \frac{\partial \epsilon}{\partial y}\right) + C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} \mu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} = 0$$
(AIV.10)

$$\mathbf{p} = \rho \mathbf{R} \mathbf{T} = \mathbf{cste} \tag{AIV.11}$$

Les fonctions de paroi sont obtenues à partir de la solution d'approximation du système AIV.7-AIV.11.

• Equations sans dimension

Les équations AIV.7-AIV.11 sans dimension sont obtenues en posant :

$$\overline{u} = \frac{u}{u^*}, \ \overline{T} = \frac{T}{T_p}, \ \overline{k} = \frac{k}{(u^*)^2}, \ \overline{\epsilon} = \frac{y\epsilon}{(u^*)^3} \ \text{et} \ \overline{\rho} = \frac{\rho}{\rho_p}$$
 (AIV.12)

La prise en compte des relations AIV.12 nous permet d'écrire à la place de AIV.7-AIV.11, les équations suivantes :

$$C_{\mu}\overline{\rho}\frac{\overline{k}^{2}}{\overline{\epsilon}}y\frac{\partial\overline{u}}{\partial y} = 1$$
 (AIV.13)

$$C_{\mu}\overline{\rho}\frac{\overline{k}^{2}}{\overline{\epsilon}}y\frac{\partial\overline{T}}{\partial y} = \xi$$
 (AIV.14)

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{C_{\mu}}{\sigma_{k}}\bar{\rho}\frac{\bar{k}^{2}}{\bar{\epsilon}}\frac{\partial\bar{k}}{\partial y}\right) + C_{\mu}\bar{\rho}\frac{\bar{k}^{2}}{\bar{\epsilon}}y\left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial y}\right)^{2} - \bar{\rho}\frac{\bar{\epsilon}}{y} = 0$$
(AIV.15)

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{C_{\mu}}{\sigma_{\epsilon}}\overline{\rho}\frac{\overline{k}^{2}}{\overline{\epsilon}}y\frac{\partial}{\partial y}(\frac{\overline{\epsilon}}{y})\right) + C_{\epsilon 1}C_{\mu}\overline{\rho}\overline{k}(\frac{\partial\overline{u}}{\partial y})^{2} - C_{\epsilon 2}\overline{\rho}\frac{\overline{\epsilon}}{y^{2}\overline{k}} = 0$$
(AIV.16)

$$\overline{\rho}\overline{T} = 1 \tag{AIV.17}$$

La pression p étant considérée constante : $\overline{p} = \frac{p}{\rho_p R T_p} = 1$.

Pour résoudre le système d'équations AIV.13-AIV.17, nous posons :

$$\begin{cases} \overline{u} = u_0 + \xi u_1 + \dots \\ \overline{T} = T_0 + \xi T_1 + \dots \\ \overline{k} = k_0 + \xi k_1 + \dots \\ \overline{\epsilon} = \epsilon_0 + \xi \epsilon_1 + \dots \\ \overline{\rho} = \rho_0 + \xi \rho_1 + \dots \end{cases}$$
(AIV.18)

La fonction de paroi pour la température est obtenue à l'aide du développement à l'ordre 1 en ξ et la combinaison des équations AIV.13 et AIV.14. Il vient :

 $T_1 = 1 + (u_0 + c_0)\xi$ avec $T_0 = 1$ (AIV.19)

c₀ est une constante dont la détermination sera discutée ultérieurement.

Les fonctions de paroi pour u, k et ε sont obtenues à l'aide de la résolution du système AIV.13-AIV.17 à l'ordre zéro. Ce dernier s'écrit :

$$C_{\mu}\rho_{0}\frac{k_{0}^{2}}{\varepsilon_{0}}y\frac{\partial u_{0}}{\partial y} = 1$$
 (AIV.20)

$$C_{\mu}\rho_{0}\frac{k_{0}^{2}}{\epsilon_{0}}y\frac{\partial T_{0}}{\partial y}=0 \tag{AIV.21}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{C_{\mu}}{\sigma_{k}} \rho_{0} k_{0}^{2} \varepsilon_{0} y \frac{\partial k_{0}}{\partial y} \right] + \frac{\partial u_{0}}{\partial y} - \rho_{0} \frac{\varepsilon_{0}}{y} = 0$$
(AIV.22)

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{C_{\mu}}{\sigma_{\epsilon}} \rho_0 k_0^2 \varepsilon_0 \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial y} - \frac{C_{\mu}}{\sigma_{\epsilon}} \frac{1}{y} \rho_0 k_0^2 \right] + C_{\epsilon 1} \frac{1}{y} \frac{\varepsilon_0}{k_0} - C_{\epsilon 2} \rho_0 \frac{\varepsilon_0^2}{y^2 k_0} = 0$$
(AIV.23)

Hypothèse supplémentaire :

 k_0 et ϵ_0 sont supposés constants, ce qui signifie que :

$$\frac{\partial k_0}{\partial y} = \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial y} = 0 \tag{AIV.24}$$

La relation AIV.17 entraı̂ne $\rho_0 T_0 = 1$, or $T_0 = 1$, ce qui permet d'écrire :

$$\rho_0 = 1 \tag{AIV.25}$$

Tenons en compte AIV.24 et AIV.25, nous obtenons à la place du système AIV.20-AIV.23 le système suivant :

$$y\frac{\partial u_0}{\partial y} = \frac{\varepsilon_0}{C_\mu k_0^2}$$
(AIV.26)

$$\frac{\partial T_0}{\partial y} = 0 \tag{AIV.27}$$

$$y\frac{\partial u_0}{\partial y} = \varepsilon_0 \tag{AIV.28}$$

$$\frac{C_{\mu}}{\sigma_{\epsilon}}k_0^2 = (C_{\epsilon 2} - C_{\epsilon 1})\frac{\epsilon_0^2}{k_0}$$
(AIV.29)

AIV.26 et AIV.27 permettent d'obtenir la fonction de paroi pour k :

$$k_0 = C_{\mu}^{-\frac{1}{2}} \tag{AIV.30}$$

Cette dernière expression injectée dans l'équation AIV.29 nous permet d'obtenir la fonction de paroi pour ε :

$$\varepsilon_0 = \left[C_{\mu}^{\frac{1}{2}} (C_{\varepsilon 2} - C_{\varepsilon 1}) \sigma_{\varepsilon} \right]^{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\kappa}$$
(AIV.31)

 κ étant la constante de Von Karmann qui est reliée aux autres constantes du modèle k- ϵ et dont la valeur standard est :

$$\kappa = 0.4327 \tag{AIV.32}$$

Cette valeur diffère légèrement de la valeur 0.40 généralement utilisée (réf. [6], chap IV).

Enfin, AIV.31 et AIV.28 nous permettent d'écrire :

$$u_0 = \frac{1}{\kappa} \ln y + B \tag{AIV.33}$$

La détermination de la constante B nécessite la prise en considération de la sous-couche laminaire visqueuse. Il vient alors à la place de (AIV.33) :

$$u_0 = \frac{1}{\kappa} \ln \frac{y_u^*}{v_l} + B \tag{AIV.34}$$

B est déterminée expérimentalement pour les parois lisses (réf [6], chap IV), sa valeur est la suivante :

$$B = 5.5$$
 (AIV.35)

Fonctions de paroi sous leurs formes dimensionnelles

Les fonctions de paroi pour u, k et ɛ sous leurs formes dimensionnelles s'écrivent :

$$\frac{u}{u^*} = \frac{1}{\kappa} \ln \frac{yu}{v_l} + B$$
(AIV.36)

$$k = C_{\mu}^{-\frac{1}{2}} (u^*)^2$$
 (AIV.37)

$$\varepsilon = \frac{1}{\kappa} \frac{(u^*)^3}{y} = \frac{1}{\kappa y} C_{\mu}^{\frac{3}{4}} k^{\frac{3}{2}}$$
(AIV.38)

Dans KIVA II, la relation (AIV.37) (équivalente à $\frac{dk}{dy} = 0$) constitue une condition à la limite pour l'équation de transport de l'énergie cinétique de turbulence k, et la relation (AIV.38) permet de déterminer le taux de dissipation de k aux centres des cellules du maillage proches de la paroi. A partir de ces deux relations on peut alors déterminer une échelle de longueur de turbulence par la relation suivante :

$$l = \frac{C_{\mu}^{4}}{\kappa} \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon}$$
(AIV.39)

Par ailleurs, L'équation (AIV.36) ne peut être résolue directement, car celà exigerait une solution itérative pour l'inconnue u^{*}. Pour pallier cette difficulté, on effectue le changement suivant (réf [7], chap IV) :

$$\frac{yu^*}{v_l} = C_{lp} (\frac{yu}{v_l})^{\frac{7}{4}}$$
 avec $C_{lp} = 0.15$ (AIV.40)

Il vient alors à la place de (AIV.36) :

$$\frac{u}{u^*} = \frac{1}{\kappa} \ln \left[C_{lp} \left(\frac{yu}{v_l} \right)^{\frac{2}{s}} \right] + B$$
(AIV.41)

Cette équation est facile à résoudre du moment que u et y sont connus. Cependant, elle n'est valable qu'en région logarithmique, c'est à dire pour $\frac{yu^*}{v_1} > 1$. Lorsque $\frac{yu^*}{v_1} < 1$, on est en sous-couche laminaire bien que l'écoulement n'y soit pas réellement laminaire. Dans ce cas on utilise la formule suivante :

$$\frac{\mathbf{u}}{\mathbf{u}_*} = \left(\frac{\mathbf{y}\mathbf{u}}{\mathbf{v}_1}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{AIV.42}$$

La transition entre (AIV.41) et (AIV.42) s'effectue pour le nombre de Reynolds critique $R_c = \frac{y_u}{v_1} = 114.$

La fonction de paroi pour la température dimensionnelle est obtenue à l'aide de la relation (AIV.19) dans la région logarithmique :

$$\frac{T}{T_{p}} = 1 + \frac{J_{p}P_{r}u^{*}}{C_{p}\tau_{p}T_{p}}(\frac{u}{u^{*}} + c_{0})$$
(AIV.43)

 c_0 est une constante dont la valeur doit être déterminée expérimentalement. Actuellement une bonne valeur expérimentale de cette constante est indisponible. Aussi, on se contente de la déterminer en considérant un profil de température laminaire dans la sous-couche limite visqueuse. Ce qui s'accomplit en supposant dans le cas où $\frac{yu}{v_1} < R_c$:

$$\frac{T}{T_{p}} = 1 + \frac{J_{p}P_{rl}u^{*}}{C_{p}\tau_{p}T_{p}}\frac{u}{u^{*}} = 1 + \frac{J_{p}}{\lambda_{l}T_{p}}y$$
(AIV.44)

où :

 λ_{l} est le coeifficient de conduction de chaleur laminaire, P_{rl} le nombre de Prandtl laminaire et $\frac{u}{u^{*}} = R_{c}^{\frac{1}{2}}$.

La combinaison de (AIV.43) et (AIV.44) fournit alors la valeur de c_0 suivante :

$$c_0 = R_c^{\frac{1}{2}} \left(\frac{P_{rl}}{P_r} - 1\right)$$
(AIV.45)

• Implantation numérique dans KIVA II

On considère une cellule typique adjacente à la paroi (voir figure AIV.1). Les noeuds e, f, g et h appartiennent à la paroi et les noeuds a, b, c et d au fluide.



Figure AIV.1 : Cellule typique adjacente à la paroi

Contrainte de cisaillement à la paroi

Pour évaluer la contrainte de cisaillement à la paroi, il faut connaitre la vitesse u tangente à la paroi à une distance y de celle-ci, et la viscosité cinématique laminaire v_1 .

La vitesse tangentielle est évaluée par :

$$\mathbf{u} = \left| \frac{1}{4} (\mathbf{u}_{\mathbf{a}} + \mathbf{u}_{\mathbf{b}} + \mathbf{u}_{\mathbf{c}} + \mathbf{u}_{\mathbf{d}}) \right|$$
(AIV.46)

Cette relation suppose que les composantes normales de la vitesse soient négligeables devant les composantes tangentielles, de telle manière que ces dernières représentent les modules des vitesses.

La distance y à la paroi est calculée par :

$$y = \left| \frac{1}{4} \left[(x_a - x_e) + (x_b - x_f) + (x_d - x_h) + (x_c - x_g) \frac{A_a}{|A_a|} \right]$$
(AIV.47)

A_a étant le vecteur air de la face pariétale de la cellule.

La viscosité cinématique est évaluée par :

$$v_1 = \frac{\mu_{air}(T)}{\rho}$$
(AIV.48)

 $\mu_{air}(T)$ est déterminée par la relation de Sutherland :

$$\mu_{air}(T) = \frac{A_1 T^{\frac{3}{2}}}{T + A_2}$$
(AIV.49)

 A_1 et A_2 sont des Constantes et ρ et T sont la masse volumique et la température de la cellule.

La contrainte de cisaillement τ_p est alors déterminée en utilisant la formule $u^* = \sqrt{\frac{\tau_p}{\rho_p}}$ et la relation (AIV.41) dans le cas où $\frac{yu}{v_l} \ge R_c$ ou la relation (AIV.42) dans le cas où $\frac{yu}{v_l} \le R_c$.

 τ_p étant déterminée, le produit $\tau_p A \Delta t$ fournit le changement total en un pas de temps de la quantité de mouvement du fluide dans la cellule pariétale. Ce changement est dû au frottement à la paroi. Pour chacun des noeuds e, f, g et h on attribue le 1/4 de ce changement. A titre d'exemple, le changement en vecteur quantité de mouvement pour le noeud e est :

$$M'_{e}\delta u_{e} = -\frac{1}{4}\tau_{p}A\Delta t \frac{u_{a}^{n}}{\left|u_{a}^{n}\right|}$$
(AIV.50)

M e est la masse du noeud e.

Flux de chaleur à la paroi

Le flux de chaleur J_p à la paroi est calculé à partir de (AIV.43) et (AIV.45) si $\frac{yu}{v_1} > R_c$, et à partir de (AIV.44) si $\frac{yu}{v_1} < R_c$.

La capacité calorifique à pression constante C_p est donnée par sa valeur dans la cellule pariétale. Alors que la température T est prise comme la moyenne entre la température dans la cellule pariétale et celle dans la cellule fluide juste au dessus. Le produit $J_p A \Delta t$ représente la perte d'énergie par unité d'aire à la paroi qui sera soustraite à l'énergie interne de la cellule.

En outre l'énergie cinétique dissipée par frottement à la paroi est déterminée par le produit $\tau_p u A \Delta t$. Celle-ci sera quant à elle ajoutée à l'énergie interne de la cellule.

LISTE DES FIGURES ET TABLEAUX

FIGURES

Figure I.1	:	Schéma de principe de la machine à compression rapide de Lille, P. 20
Figure I.2	:	Coupe axiale de la chambre d'étude et du piston compresseur, P. 22.
FIgure I.3	:	Coupe transversale de la chambre de combustion, P. 23.
Figure I.4	:	Courbes de pression (mélanges réactif et non réactif), P. 29.
Figure I.5	:	Autoinflammation d'un mélange n-pentane/"air" de richesse 1, P. 29.
Figure I.6	:	Délais d'autoinflammation du mélange n-butane/"air", P. 30.
Figure I.7	:	Courbes de pression et déplacement du piston, P. 35.
Figure I.8	:	Evolution de la pression mesurée, P. 36.
Figure I.9	:	Evolution de la température de coeur, P. 37.
Figure II.1	:	Type de cellule régulière du maillage, P. 57 .
Figure II.2	:	Volumes de contrôle, P. 57 .
Figure II.3	:	Volumes de contrôle pour les vitesses aux interfaces, P. 58.
Figure III.1	:	Profils de déplacement du piston compresseur calculés, P. 74.
Figure III.2	:	Profils de vitesse du piston compresseur calculés, P. 75.
Figure III.3	:	Maillage M1 de la chambre de combustion, P. 77.
Figure III.4	:	Evolution radiale de la vitesse axiale au centre de la chambre, P. 81.
Figure III.5	:	Champ de vitesse dans le cas laminaire, P. 83.
Figure III.6	:	Lignes de courant d'après Güntsch et al., P. 83.
Figure III.7	:	Champ de vitesse (cas 29 ms, modèle k-ε), P. 86.
Figure III.8	:	Champ de vitesse (cas 47 ms, modèle k-ε), P. 87.
Figure III.9	:	Champ de vitesse (cas 86 ms, modèle k-ɛ), P. 88.
Figure III.10	:	Champ de vitesse (cas 47 ms, modèle sgs), P. 89.
Figure III.11	:	Champ d'isothermes (cas 47 ms, modèle k-ε), P. 91.
Figure III.12	:	Champ d'isothermes (cas 47 ms, modèle sgs), P. 92.
Figure III.13	:	Isolignes d'énergie cinétique turbulente k (modèle k-ɛ), P. 94.
Figure III.14	:	Isolignes d'énergie cinétique turbulente k (modèle sgs), P.95.

Figure III.15	:	Isolignes du taux de dissipation de k (modèle k- ε), P. 96 .
Figure III.16	:	Isolignes du taux de dissipation de k (modèle sgs), P. 97.
Figure III.17	:	Isolignes de l'échelle de longueur de turbulence (modèle k-ε), P. 98.
Figure III.18	:	Isolignes de l'échelle de longueur de turbulence (modèle sgs), P. 99.
Figure III.19	:	Energie cinétique turbulente au centre de la chambre, P. 100.
Figure III.20	:	Taux de dissipation de k au centre de la chambre, P. 100.
Figure III.21	:	Echelle de longueur de turbulence au centre de la chambre, P. 101.
Figure III.22	:	Maillages M2 et M3 de la chambre, P. 103.
Figure III.23	:	Champ de vitesse (cas 47 ms, modèle k-ɛ, maillage M3), P. 105.
Figure III.24	:	Champ d'isothermes (cas 47 ms, modèle k-ɛ, maillage M3), P. 106.
Figure IV.1	:	Evolution de la pression moyenne adiabatique, P. 111.
Figure IV.2	:	Evolution de la température moyenne adiabatique, P. 111.
Figure IV.3	:	Evolution de la pression moyenne en fonction de la vitesse du piston
Figure IV 4	•	Evolution de la pression movenne (cas 29 ms) P 114
Figure IV 5	•	Evolution de la pression moyenne (cas 47 ms), P 115
Figure IV.6	•	Evolution de la pression moyenne (cas 86 ms), P. 115
Figure IV.7	•	Confrontation de la température movenne calculée à la température de
	•	coeur. P. 117.
Figure IV.8	:	Evolution de la pression movenne en fonction du maillage, P. 118 .
Figure IV.9	•	Evolution de la température moyenne en fonction du maillage, P. 118 .
Figure IV.10	:	Evolution de la pression moyenne en fonction de la loi de vitesse du
-		piston, P. 120 .
Figure IV.11	:	Evolution de la température moyenne en fonction de la loi de vitesse du
		piston, P. 120 .
Figure IV.12	:	Evolution du coeifficient du transfert thermique moyen, P. 121.
Figure IV.13	:	Comparaison de diverses températures (cas 29 ms), P. 123.
Figure IV.14	:	Comparaison de diverses températures (cas 47 ms), P. 123.
Figure IV.15	:	Comparaison de diverses températures (cas 86 ms), P. 124.
Figure IV.16	:	Evolution de la température en fin de compression dans différents plans
		z en fonction de r, P. 125.
Figure IV.17	:	Evolution de la température dans le plan central de la chambre à
		différents instants de la post-compression (cas 29 ms), P. 126.
Figure IV.18	:	Evolution de la température dans le plan central de la chambre à
		différents instants de la post-compression (cas 47 ms), P. 126.
Figure IV.19	:	Evolution de la température dans le plan central de la chambre à
		différents instants de la post-compression (cas 86 ms), P. 127.
Figure IV.20	:	Cartographie de la température (cas 29 ms), P. 130.

Figure IV.21	:	Cartographie de la température (cas 47 ms), P. 131.
Figure IV.22	:	Cartographie de la température (cas 86 ms), P. 132.
Figure V.1	:	Evolution de l'énergie cinétique turbulente en fonction de différents
		modèles k- ε modifiés (cas 47 ms, k ₀ = 0.02 V _p ²), P. 149 .
Figure V.3	:	Evolution de l'énergie cinétique turbulente en fonction de différents
		modèles k- ε modifiés (cas 47 ms, k ₀ = 0.1 V _p ²), P. 151 .
Figure V.4	:	Evolution de l'échelle de longueur de turbulence en fonction de
		différents modèles k- ε modifiés (cas 47 ms, k ₀ = 0.1 V _p ²), P. 152 .
Figure V.5	:	Evolution de l'énergie cinétique turbulente en fonction de différents
		modèles k- ε modifiés (cas 29 ms, k ₀ = 0.02 V _p ²), P. 153 .
Figure V.6	:	Evolution de l'énergie cinétique turbulente en fonction de différents
		modèles k- ε modifiés (cas vitesse moyenne du piston de 47 ms, k ₀ =
		$0.02 V_p^2$), P. 154 .

TABLEAUX

Tableau I.1 :	Caractéristiques géométriques de la machine à compression rapide de
	Lille, P. 34 .
Tableau I.2 :	Conditions d'étude et valeurs des paramètres mesurées ou calculées au
	РМН, Р. 34 .
Tableau III.1 :	Conditions initiales retenues pour les différents cas tests, P. 76.
Tableau III.2 :	Type de maillage uniforme utilisé, P. 77.
Tableau III.3 :	Valeurs de la pression en fin de compression ($v_{op} = 0.01$), P. 79 .
Tableau III.4 :	Valeurs de la pression en fin de compression ($v_{op} = 0.02$), P. 79 .
Tableau III.5 :	Valeurs de la pression en fin de compression ($v_{op} = 0.04$), P. 79 .
Tableau III.6 :	Valeurs de la température en fin de compression ($v_{op} = 0.01$), P. 80 .
Tableau III.7 :	Valeurs de la température en fin de compression ($v_{op} = 0.02$), P. 80 .
Tableau III.8 :	Valeurs de la température en fin de compression ($v_{op} = 0.04$), P. 80 .
Tableau III.9 :	Constantes du modèle k- ε standard, P. 85 .
Tableau IV.1 :	Pression et température adiabatiques au PMH, P. 112.
Tableau IV.2 :	Pression au PMH en fonction du temps de compression, P. 116.
Tableau IV.3 :	Températures numérique et théorique au PMH, P. 116.
Tableau IV.4 :	Température numérique et température de coeur au PMH, P. 117.
Tableau V.1 :	Constantes relatives aux différents modèles k-ɛ, P. 146.