

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

Discipline ou spécialité :

Energétique et Transferts

Présentée et soutenue par :

M. ANTHONY ROBERT

le vendredi 27 juin 2014

Titre :

SIMULATION AUX GRANDES ECHELLES DES COMBUSTIONS ANORMALES DANS LES MOTEURS DOWNSIZES A ALLUMAGE COMMANDE

Ecole doctorale :

Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés (MEGeP)

Unité de recherche :

CERFACS (CERFACS)

Directeur(s) de Thèse :

M. THIERRY POINSOT

M. OLIVIER COLIN

Rapporteurs :

M. DENIS VEYNANTE, ECOLE CENTRALE PARIS

M. NORBERT PETERS, RHEINISCH-WESTFALISCHE TECH. HOCH.AACHEN

Membre(s) du jury :

M. FABRICE FOUCHER, UNIVERSITE D'ORLEANS, Président

M. OLIVIER COLIN, INSTITUT FRANCAIS DU PETROLE (IFP), Membre

M. STEPHANE RICHARD, TURBOMECA, Membre

M. THIERRY POINSOT, INP TOULOUSE, Membre



Remerciements

On attend pendant trois ans l'écriture des remerciements, mais lorsque ce moment arrive, on se rend compte que la thèse est passée extrêmement vite, et que les personnes ayant contribué à ces travaux sont nombreuses.

Mes premiers remerciements vont aux membres du jury, le professeur Fabrice Foucher qui a accepté de présider ma soutenance, mais également le professeur Norbert Peters et Denis Veynante pour leur regard avisé et le travail minutieux de relecture de mon manuscrit.

Mes profonds remerciements s'adressent ensuite à Thierry Poinsot pour avoir accepté de diriger cette thèse. Ses conseils avisés m'ont toujours permis de progresser et d'orienter mes travaux dans la bonne direction. Je remercie également Olivier Colin pour avoir assuré la co-direction de cette thèse en étant toujours disponible pour répondre à mes nombreuses sollicitations, et en y apportant des réponses scientifiques toujours pointues.

Un énorme merci ensuite à Stéphane Richard pour sa confiance depuis mon arrivée en stage, et pour son encadrement durant ces trois années (même si il était présent dans mon jury sous la casquette de TURBOMECA qu'il a rejoint peu avant la fin de ma thèse). Sa motivation sans faille, ses explications claires, ses idées et ses connaissances aussi bien numériques que technologiques m'ont toujours impressionné et sorti de bien des galères. Son aide sans limite (jusqu'à la relecture minutieuse de ce manuscrit à distance) a largement contribué à la réussite de cette thèse.

Ces travaux de thèse ont été effectués dans le cadre d'une thèse CIFRE avec PSA Peugeot Citroën, et je tiens à remercier Benoït Enaux, Laurent Duchamps de la Geneste et Clément Dumand pour leur vision industrielle éclairée et la diffusion des résultats chez PSA.

Je tiens également à remercier l'ensemble des personnes d'IFP Energies nouvelles avec lesquelles



j'ai collaboré, à commencer par les personnes du département R102 "Systèmes Moteurs et Véhicules" dirigé par Antonio Pires Da Cruz que je remercie pour sa confiance.
Mes remerciements les plus sincères vont tout d'abord à Lionel Martinez (alias M. DITurBC) qui m'a initié au diphasique. Ses remarques "là il y a un loup, faut creuser" ont rythmé une bonne partie de ma thèse. Merci également à Jean-Baptiste Michel, notre colocataire officieux de CB-309 qui est toujours prêt à répondre aux questions très pertinentes des thésards, à la team GIT (Nicolas Gillet et Anthony Velghe) pour leur disponibilité et sans qui les calculs AVBP ne se seraient jamais lancé, mais aussi à David Maligne, Julian Kashdan et Loic De Francqueville toujours prêts à me fournir ou à m'expliquer des résultats expérimentaux. Nombreuses sont encore les personnes d'IFPEn qui ont contribué à cette thèse et que je remercie à commencer par Christian Angelberger, Olivier Laget, Benjamin Reveille, Mickael Pomes, Cécile Péra ...

Je remercie les membres du projet ICAMDAC, et j'adresse de prompt remerciement aux personnes du CERFACS et notamment Antony Misdariis pour nos très nombreux et fructueux échanges vu la complémentarité de nos deux thèses, mais aussi Olivier Vermorel et Gabriel Staffelbach pour leur disponibilité.

Je remercie enfin les thésards qui m'ont permis de terminer cette thèse dans le temps imparti (sans eux j'aurais été largement en avance). Mais que de bons moments passés au troisième étage ! !
CB-309 restera "THE PLACE TO BE" comme disent les anciens que j'ai côtoyé durant la première partie de ma thèse : Pauline, Julien (notre GUN à tous), Carlo (M. MA QUE CAZZO, qui n'arrête pas de vanter la beauté de la Sardaigne ... tout ça car il n'a jamais vu la Corse !), Stéphane C. (alias M. WARRAMER) grâce à qui les "Elphes noirs de la nuit" n'ont plus de secret pour moi, mais aussi Jean-Baptiste MC (alias JB La stat) toujours prêt à nous lancer dans des discussions (presque) enrichissantes sur des statistiques que le commun des mortels n'aurait pu débusquer.
D'autres thésards ont rejoint le bateau (enfin la galère) au cours de ma thèse, et notamment Betty qui s'est rapidement imposée comme la maman du 3^{ieme} étage, Nicolas (le scientifique de CB-309 et créateur du Iafratien) grâce à qui je connais "la première victime de la guerre", Adam la monocellule ou encore ROUXB le gratton. Merci également à tous les autres thésards et stagiaires que j'ai côtoyé : Gorka, karl, Jordan, Eddy, Viken, Antoine, Damien, Sophie, Oguz, Bejoy, Jan, Emre, Haifa, Federico, Lama, ...

Je voudrais également remercier tous mes amis qui ne liront probablement jamais ces lignes, mais qui comptent beaucoup et notamment les ADEOUES dont la "maxitude" n'a aucun égal ! ! ! ! ! ! !

Je remercie enfin l'Aveyron, le centre du monde, dont la magnificence n'est pas due qu'à son viaduc. J'espère avoir convaincu toutes les personnes que j'ai croisé que c'était une endroit à ne pas manquer ... en tout cas j'ai tout fait pour !

Pour finir, mes derniers remerciements vont à mon épouse Cyntia qui a subi ces trois années de thèse et m'a toujours soutenu, à mes soeurs et à mes parents à qui je dois beaucoup. C'est à vous que je dédie cette thèse.



Résumé

Le moteur à allumage commandé fortement downsizé est une des solutions les plus prometteuses utilisée par les constructeurs automobiles pour augmenter le rendement et réduire les émissions de CO_2. Cependant, les conditions thermodynamiques plus sévères rencontrées dans ces moteurs favorisent l'apparition de combustions anormales (cliquetis et rumble) qui sont difficiles à analyser expérimentalement vu les risques encourus par le moteur. La méthode Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) s'est imposée depuis plusieurs années pour l'étude des moteurs à piston dans l'industrie, mais elle n'est pas la plus appropriée pour étudier des phénomènes locaux et sporadiques comme les combustions anormales qui n'affectent pas le cycle moyen simulé en RANS. Grâce à l'utilisation d'un code compressible LES et au développement d'une version améliorée des modèles ECFM-LES (Extended Coherent Flame Model) et TKI (Tabulated Kinetics of Ignition) qui permet un découplage total entre les taux de réaction liés à la propagation de la flamme et à l'auto-inflammation, ces travaux mettent en évidence pour la première fois la capacité de la LES à décrire le phénomène de cliquetis dans une configuration réaliste d'un moteur à allumage commandé. Contrairement aux études précédentes [S. Fontanesi and S. Paltrinieri and A. D'Adamo and G. Cantore and C. Rutland, SAE Int. J. Fuels Lubr., 2013-01-1082, pp. 98-118][G. Lecocq, S. Richard, J.-B. Michel, L. Vervisch, Proc. Combust. Inst. 33 (2011) 3105-3114], une étude quantitative du cliquetis est réalisée grâce à des post-traitements spécifiques et similaires pour les résultats expérimentaux et numériques. La LES est capable de prédire la variabilité de la pression cylindre, la fréquence mais également l'angle moyen d'apparition de l'auto-inflammation sur un balayage d'avance à l'allumage. Une analyse 3D démontre également que le cliquetis se déclenche à différents endroits, mais principalement dans la moitié de la chambre sous les soupapes d'échappement. De plus, l'intensité du cliquetis est proportionnelle à la masse de gaz frais brûlée en auto-inflammation pour les faibles intensités, alors qu'une croissance beaucoup plus forte est observée pour les intensités les plus élevées. Ceci suggère que des facteurs supplémentaires interviennent comme la localisation du cliquetis ou les interactions entre l'acoustique interne et l'auto-inflammation. L'utilisation d'un code LES compressible permet une visualisation directe de ces interactions mettant en évidence que les faibles intensités sont liées à des auto-inflammations locales sans couplage alors qu'une transition de la déflagration vers la détonation est possible en moteur automobile et correspond aux intensités les plus fortes.

Mots-clés
Simulation aux grandes échelles, LES, Moteur essence, Downsizing, Combustions anormales, cliquetis, rumble





Abstract

Highly boosted spark ignition engines are more and more attractive for car manufacturers in terms of efficiency and CO_2 emissions reduction. However, thermodynamic conditions encountered in these engines promote the occurrence of abnormal combustions like knock or super-knock, which are experimentally difficult to analyze due to the risks of engine damages. The Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) method mainly used in industry for piston engines is not the most appropriate as knock does not always affect the mean cycle captured by RANS. Using an accurate LES compressible code and improved versions of ECFM-LES (Extended Coherent Flame Model) and TKI (Tabulated Kinetics of Ignition) models allowing a full uncoupling of flame propagation and auto-ignition reaction rates, this work demonstrates for the first time that LES is able to describe quantitatively knocking combustion in a realistic downsized SI engine configuration. Contrary to previous studies [S. Fontanesi and S. Paltrinieri and A. D'Adamo and G. Cantore and C. Rutland, SAE Int. J. Fuels Lubr., 2013-01-1082, pp. 98-118][G. Lecocq, S. Richard, J.-B. Michel, L. Vervisch, Proc. Combust. Inst. 33 (2011) 3105-3114], a quantified knock analysis is conducted based on a specific post-processing of both numerical and experimental data. LES is able to predict the in-cylinder pressure variability, the knock occurrence frequency and the mean knock onset crank angle for several spark timings. A 3D analysis also demonstrates that knock occurs at random locations, mainly at the exhaust valves side. Knock intensity is found proportional to the fresh gases mass burned by auto-ignition at low knock intensities, while an exponential increase at the highest intensities suggests the influence of additional factors like the knock location in the cylinder or complex behavior of knocking combustion. A direct LES study of acoustic and autoignition interactions is then achieved. The LES visualizations allows showing that low knock intensities are only linked to local autoignition, but a deflagration to detonation transition occurs in such engine operating conditions and is responsible for the highest knock intensities.

Keywords

Numerical simulation, LES, Spark ignition engine, Downsizing, Abnormal combustions, Knock, Super-knock



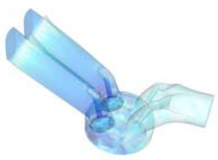


TABLE DES MATIÈRES

Notations utilisées **13**

1 Introduction **21**
1.1 Le fonctionnement des moteurs essence . . . 22
1.2 Le concept de “downsizing” . . . 24
1.3 Qu’est-ce que les combustions anormales ? . . . 26
1.4 Etude expérimentale des combustions anormales . . . 30
1.5 Apport de la simulation pour l’étude du cliquetis et du rumble . . . 33
1.6 Objectifs de la thèse . . . 38

2 Modélisation LES de la combustion turbulente **41**
2.1 Système d’équations de la LES . . . 41
2.2 Les modèles de turbulence . . . 44
2.2.1 Le modèle de Smagorinsky . . . 44
2.2.2 Le modèle dynamique de Germano . . . 44
2.2.3 Le modèle Sigma . . . 45
2.3 Fermeture du tenseur de diffusion des espèces et du flux de chaleur . . . 46
2.4 Les modèles de combustion . . . 47
2.4.1 Les modèles de flamme de prémélange . . . 47
2.4.1.1 Le modèle TFLES . . . 47
2.4.1.2 Le modèle ECFM-LES . . . 50



2.4.2 Le modèle d'auto-inflammation TKI-LES . . . 55
2.5 Le modèle d'allumage ISSIM-LES . . . 58
2.5.1 Modélisation du noyau initial de gaz brûlés . . . 58
2.5.2 Croissance du noyau et propagation de la flamme . . . 59

3 Développements d'outils et méthodologies 63
3.1 Développement des modèles ECFM-LES, TKI-LES et ISSIM-LES . . . 64
3.1.1 Dissociation des phénomènes d'AI et de flamme de prémélange grâce au découplage total des variables d'avancement. . . . 64
3.1.2 Modification des termes liés à la densité de surface de flamme . . . 67
3.1.3 Cas tests de validation . . . 67
3.1.3.1 Validation du modèle TKI-LES par rapport à des résultats en chimie complexe . . . 68
3.1.3.2 Validation dans un cas faisant intervenir l'ensemble des modèles ECFM-LES, TKI-LES et ISSIM-LES . . . 70
3.2 Développement d'une stratégie numérique ESO_2 . . . 73
3.2.1 Numerical methods and turbulence modeling for LES of piston engines : impact on flow motion and combustion . . . 73
3.2.2 Introduction . . . 74
3.2.3 Test case description and approach . . . 75
3.2.3.1 Methodology . . . 76
3.2.3.2 Engine configurations . . . 76
3.2.3.3 Numerical set-up . . . 78
3.2.4 High order numerical schemes impact on LES OF ICE . . . 78
3.2.4.1 LW - TTGC - TTG4A comparison for LES of ICE . . . 79
3.2.4.2 TFLES and efficiency function . . . 84
3.2.4.3 Restitution times . . . 90
3.2.5 Evaluation of sub-grid-scale models . . . 90
3.2.5.1 In-cylinder trapped mass . . . 90
3.2.5.2 Intake and compression in-cylinder flow . . . 90
3.2.5.3 Combustion stroke . . . 96
3.2.5.4 Restitution times . . . 98
3.2.6 Evaluation of a new hybrid approach . . . 98
3.2.6.1 Flow motion during combustion . . . 99
3.2.6.2 Flame propagation process . . . 99
3.2.6.3 CPU time . . . 102
3.2.7 Conclusion . . . 104
3.2.8 Acknowledgments . . . 105



3.2.8.1 Static models . . . 106
3.2.8.2 Dynamic procedure . . . 106
3.3 Outils d'analyse du couplage acoustique / chimie . . . 107

4 La base de données expérimentale ICAMDAC 113
4.1 Les points de fonctionnement choisis . . . 114
4.2 Caractérisation de l'aérodynamique : la configuration optique . . . 115
4.3 Analyse des combustions anormales : configuration opaque . . . 119
4.4 Mise en place de post-traitements commun entre LES et expérience. . . . 121

5 Simulation LES en moteur entraîné 127
5.1 Mise en place des calculs LES . . . 127
5.1.1 Réalisation des maillages . . . 127
5.1.2 Conditions limites . . . 129
5.1.3 Configuration numérique . . . 130
5.2 Résultats LES pour le point rumble . . . 130
5.2.1 Masse enfermée . . . 130
5.2.2 Validation de la pression cylindre . . . 131
5.2.3 Comparaison de l'aérodynamique interne . . . 131
5.3 Résultats LES pour le point cliquetis . . . 138
5.4 Conclusions sur les résultats en moteur entraîné . . . 141

6 Etude LES du cliquetis 143
6.1 Configuration numérique . . . 143
6.2 Première comparaison sur le point de référence (AVA = -8°V) . . . 147
6.3 Réalisation d'un balayage d'avance à l'allumage . . . 149
6.3.1 Stratégie mise en place pour limiter le temps de calcul . . . 149
6.3.2 Comparaisons des résultats pour les différentes AVA . . . 150
6.3.3 Analyse 3D des spots de départ en AI . . . 153
6.4 Analyse de la transition vers la détonation . . . 156
6.4.1 abstract . . . 156
6.4.2 Introduction . . . 157
6.4.3 Quantification of knock using LES . . . 158
6.4.3.1 LES model and solver . . . 158
6.4.3.2 Knock statistics from LES . . . 158
6.4.3.3 Definition of the knock regimes . . . 159
6.4.4 Deflagration to detonation transition analysis using Bradley's diagram . . . 161
6.4.4.1 Bradley's theory on DDT . . . 161



6.4.4.2 Application to the LES cycles . . . 162
6.4.4.3 Detonation indicator for direct visualization . . . 164
6.4.4.4 Limitations of the a priori analysis . . . 164
6.4.5 Analysis of interactions between autoignition spots and pressure waves . . . 166
6.4.5.1 Moderate knock . . . 166
6.4.5.2 Transition from strong knock to super-knock . . . 172
6.4.5.3 Super-knock . . . 179
6.4.6 Conclusions . . . 187

7 Etude LES du rumble **189**
7.1 Configuration numérique . . . 189
7.2 Résultats numériques à l'AVA de référence . . . 190
7.3 Analyse des interactions onde de pression/AI . . . 192
7.4 Conclusions . . . 194

8 Conclusions et Perspectives **199**
8.1 Conclusions . . . 199
8.2 Perspectives . . . 203

A LES prediction and analysis of knocking combustion **217**

B Mise en place d'un calcul de probabilités d'AI en LES **227**



LISTE DES SYMBOLES

Abréviations

AI	Auto-Inflammation
AOA	Avancesssss à l'Ouverture Admission
AOE	Avance à l'Ouverture Echappement
aTDC	after Top Dead Center
AVA	AVance à l'Allumage
AVI	AVance à l'Injection
BDC	Bottom Dead Center
BDD	Base De Données
bTDC	before Top Dead Center
CA	Combustions Anormales
CAD	Crank Angle Degree
CCV	Cycle-to-Cycle Variations
CERFACS	Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique
CFD	Computational Fluid Dynamics
CPE	Contre Pression Echappement
CSI	Consommation Spécifique Indiquée
DDT	Deflagration to Detonation Transition



DV	Degré Vilebrequin
ECFM	Extended Coherent Flame Model
EGR	Exhaust Gas Recirculation
FG	Fresh Gases
FP	Flamme de Prémélange
FSD	Flame Surface Density
GB	Gaz Brûlés
GF	Gaz Frais
ICAMDAC	Instabilités et Combustions Anormales dans les Moteurs Downsizés à Allumage Commandé
ICE	Internal Combustion Engine
IFPEN	IFP Energies nouvelles
IR	Intermédiaire Réactionnel
ISSIM	Imposed Stretch Spark Ignition Model
LES	Large Eddy Simulation
LW	Lax-Wendroff
MAC	Moteur à Allumage Commandé
PDF	Probability Density Fonction
PF	Premixed Flame
PIV	Particle Image Velocimetry
PMB	Point Mort Bas
PMH	Point Mort Haut
PMI	Pression Moyenne Indiquée
POD	Proper Orthogonal Decomposition
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
RFA	Retard à la Fermeture Admission
RFE	Retard à la Fermeture Echappement
SGS	Sub-Grid Scale
SI	Spark Ignition
ST	Spark Timing
TDC	Top Dead Center



TFLES	Thickened Flame model for LES
THI	Turbulence Homgène et Isotrope
TRF	Toluene Reference Fuel
TTG	Two step Taylor Galerkin

Lettres grecques

$\alpha(x,t)$	Coefficient de transition entre l'allumage et la propagation de la flamme
β	Constante du terme de courbure de sous-maille
χ_{EGR}	Fraction molaire de gaz brûlés dans le prémélange carburé
ΔP	Ecart de pression par rapport à la moyenne dans le cylindre
Δ ou $\widehat{\Delta}$	Taille de filtre LES
$\delta\mathcal{A}$	Aire élémentaire
$\delta\mathcal{V}$ ou ∂V	Volume élémentaire
δ_{ij}	symbole de Kronecker ($\delta_{ij}=1$ si i=j, $\delta_{ij}=0$ sinon)
Δ_x	Pas de maillage
$\dot{\omega}$	Taux de réaction moyen
$\dot{\omega}_c$	Taux de réaction moyen ou filtré associé à la variable d'avancement
$\dot{\omega}_e$	Terme source pour l'équation de l'énergie
$\dot{\omega}_F$	Taux de réaction
$\dot{\omega}_j$	Terme source associé à l'espèce chimique j de la réaction considérée
η_ε	Fonction d'efficacité du paramètre ε
η_ξ	Fonction d'efficacité du paramètre ξ
Γ	Fonction d'efficacité
γ	Rapport des chaleurs spécifiques ($\gamma=\frac{C_p}{C_v}$)
λ ou λ_{th}	Diffusivité thermique laminaire
λ_t	Diffusivité thermique turbulente
μ	Viscosité dynamique du gaz ou du fluide considéré
μ_t	Viscosité dynamique turbulente
∇T	Gradient de température local à travers le front de flamme
ν	Viscosité cinématique du gaz ou du fluide considéré



ν_l	Viscosité cinématique laminaire
ν_t	Viscosité cinématique turbulente de sous-maille à l'échelle Δ_x
Ω	Domaine de calcul
$\overline{\Sigma}$ ou $\overline{\Sigma}_{\widetilde{c}}$	Densité de surface de flamme filtrée
ϕ	Richesse du mélange
ρ	Masse volumique du gaz considéré
ρ^b	Masse volumique des gaz brûlés
ρ^u ou ρ_0	Masse volumique des gaz frais
Σ	Densité de surface locale
Σ^*	Densité de surface de l'iso-surface $c = c^*$
Σ^{lam}	Contribution laminaire ou résolue de la densité de surface
σ_1, σ_2 et σ_3	Valeurs propres du tenseur des gradients de vitesses
σ_c	Facteur de contrôle de l'épaisseur
τ	Délai d'auto-inflammation
τ	Taux d'expansion thermique de la réaction ($\tau = \frac{\rho_u}{\rho_b} - 1$)
τ_e	Temps d'excitation de l'AI
τ_{ij}	Tenseur des contraintes visqueuses
τ_t	Temps associé à l'échelle intégrale
ε	Réactivité du point chaud
$\widehat{\nu_t}$	Viscosité cinématique turbulente de sous-maille à l'échelle $\widehat{\Delta}$
ξ	Paramètre de couplage du diagramme de détonation
Ξ ou Ξ_{sgs}	Plissement de sous-maille
Ξ^0	Plissement de la flamme non épaissie
Ξ^1	Plissement résolu (pour une flamme épaissie)
ξ_l	Limite inférieure de la zone de détonation
ξ_u	Limite supérieure de la zone de détonation

Lettres latines

$\mathbb{R}$	indice de détonation
$\overline{\mathbf{n}}$	Normale aux iso-surfaces résolues de c



$\overline{f}$	Partie moyenne de la quantité Q
n	Normale aux iso-surfaces de c
u	Vecteur vitesse local des gaz
erf	Fonction erreur, définie par erf$(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2)dt$
$\widetilde{f}$	Moyenne de Favre ($\widetilde{Q} = \frac{\overline{\rho Q}}{\overline{\rho}}$)
$\widetilde{S_{ij}}$	Taux de déformation imposé aux échelles résolues
a	Vitesse du son
c	Variable d'avancement globale
C_σ	Constante du modèle de turbulence Sigma
c_Σ	Variable d'avancement dédiée à la flamme de prémélange
c_{ai}	Variable d'avancement dédiée à l'auto-inflammation
C_k, C_K	Constante de Kolmogorov
C_p	Chaleur spécifique à pression constante
C_{res}	Terme de courbure résolue
C_{S_D}	Constante du modèle dynamique de Germano
C_{sgs}	Terme de courbure de sous-maille
C_S	Constante de Smagorinsky
C_v	Chaleur spécifique à volume constant
D, D_j	Diffusivité des espèces chimiques, de l'espèce j
D_{CJ}	Vitesse de Chapman-Jouguet
D_c	Diffusivité de la variable d'avancement (=D_F)
d_S	Surface élémentaire
d_V	Volume élémentaire
E	Fonction d'efficacité du modèle TFLES (plissement de sous-maille)
E_a	Energie d'activation de la réaction
e_t	Energie totale massique
F	Combustible
F	Facteur d'épaississement du front de flamme
f	Fluctuation associée à la moyenne de Favre
f	Quantité de l'écoulement



f'	Fluctuation associée à la moyenne de Reynolds
h	Enthalpie moyenne massique
h^b	Enthalpie massique des gaz brûlés
h^u	Enthalpie massique des gaz frais
J_k^e	Flux de chaleur dans la direction k
J_k^j	Flux de diffusion de l'espèce j dans la direction k
K	Nombre d'onde adimensionné
k	Energie cinétique turbulente par unité de masse
k_{sgs}	Energie cinétique turbulente de sous-maille
l	Echelle de longueur des structures de la turbulence
l_f	Epaisseur réelle de la flamme de prémélange
l_t	Echelle intégrale de la turbulence
n	Nombre de dimensions du problème
n, n_{res}	Nombre de points nécessaire à la résolution du front de flamme
P	Pression (Pa)
P_0	Pression de référence (p_0 = 1 atm)
P_{CJ}	Pression de Chapman-Jouguet
P_{res}	Terme de propagation résolue
Q_0	Dégagement de chaleur par unité de masse de combustible
R	Constante des gaz parfaits (8.3143 $J.mol^{-1}.K^{-1}$)
$r(t)$	rayon moyen de la flamme à l'instant t
r^b	rayon moyen de gaz brûlés
R_{ij}	Tenseur de Reynolds issu de la décomposition du tenseur de Reynolds de sous-maille
S_D	Vitesse locale d'une isosurface de c
S_l	Vitesse de flamme laminaire
S_l^0	Vitesse de flamme laminaire de référence
$S_{propagation}$	Vitesse de propagation
S_{res}	Terme d'étirement résolu
S_{sgs}	Terme d'étirement de sous-maille
S_T	Vitesse de propagation turbulente



T	Température (K)
t	Temps (s)
T^b	Température des gaz brûlés
T^u ou T_{ug}	Température des gaz frais
T_0	Température de référence (T_0=298K)
T_a	Température d'activation de la réaction
T_{ik}	Tenseur de Reynolds de sous-maille
T_{res}	Terme de transport résolu
T_{sgs}	Terme de transport de sous-maille
u	Vitesse locale de l'écoulement
u'	fluctuation turbulente de sous-maille
u'_Δ	Fluctuation de vitesse associée au filtre LES de longueur Δ
u_k	Composante du vecteur vitesse **u** suivant la direction k
V^b	Volume moyen de gaz brûlés
W_i	Masse molaire de l'espèce i
Y_F	Fraction massique en combustible
Y_F^{AI}	Fraction massique en combustible consommée par l'AI
Y_F^{FP}	Fraction massique en combustible consommée par la flamme de prémélange
Y_j	Fraction massique de l'espèce chimique j
Y_{O_x}	Fraction massique en comburant
Da	Nombre de Damhöhler ($Da = \frac{\tau_t}{\tau_c}$)
N_{swirl}, N_{tumble}	Nombres de swirl et de tumble
Pr	Nombre de Prandtl ($Pr = \frac{\nu}{(\frac{\lambda_{th}}{\rho C_p})}$)
Pr_t	Nombre de Prandtl turbulent
Re	Nombre de Reynolds de l'écoulement
Re_t	Nombre de Reynolds turbulent ($Re_t = \frac{u' l_t}{\nu}$)
Sc	Nombre de Schmidt ($Sc = \frac{\nu}{D} = \frac{\mu}{\rho D}$)
Sc_k	Nombre de Schmidt associé à l'espèce chimique k
Sc_t	Nombre de Schmidt turbulent





CHAPITRE

1

Introduction

Depuis de nombreuses années, le moteur Diesel a été plébiscité par les consommateurs du fait de son rendement élevé comparé à un moteur essence (et donc de sa faible consommation), mais également de la faible taxation du gazole permettant de réduire les prix à la pompe.
La demande du public n'est cependant pas la seule raison expliquant la plus forte maturité des moteurs Diesel. En effet, les législations contraignant les constructeurs automobiles à réduire l'impact environnemental de leurs véhicules étaient initialement concentrées sur les oxydes d'azote (NOx), les hydrocarbures imbrûlés et les suies. Le moteur essence satisfaisait ces normes assez facilement grâce à la mise en place d'une catalyse 3 voies contrairement au moteur Diesel pour lequel des avancées technologiques ont été nécessaires afin de réduire les émissions à la source, en améliorant la combustion. Cependant, les émissions étant encore trop importantes, il a été nécessaire de faire des efforts de recherche & développement pour mettre en place par exemple le filtre à particules (permettant limiter les émissions des particules fines déclarées cancérigènes pour l'homme (groupe 1) [9, 1]) ou les catalyseurs SCR pour traiter les NOx à l'échappement.

Depuis le début des années 2000, la situation a évolué, et les émissions sur le CO_2 sont au coeur de préoccupations notamment de normes européennes qui, en complément des normes EURO, imposent à chaque constructeur un seuil moyen d'émission de CO_2 à respecter sur l'ensemble de ses ventes. La figure 1.1 représente la moyenne des émissions de chacun des constructeurs par rapport à leurs ventes de voitures neuves en 2012. Le seuil applicable en 2015 est matérialisé, et on constate déjà que même si certains constructeurs satisfont cette future norme depuis 2012 (Volvo, PSA Peugeot Citroën ou encore Toyota), d'autres en sont encore loin comme Mazda qui doit réduire ses émissions de CO_2 d'environ 10%. De plus, la norme 2015 n'est qu'une première étape de ce qui attend les constructeurs en 2020 avec des objectifs très ambitieux. Même si l'estimation pour 2020 présentée sur la figure 1.1 reste basée sur la masse moyenne des véhicules vendus en 2012, aucun constructeur n'approche cet objectif, et des avancées technologiques en rupture devront être mises sur le marché pour satisfaire ces exigences euro-



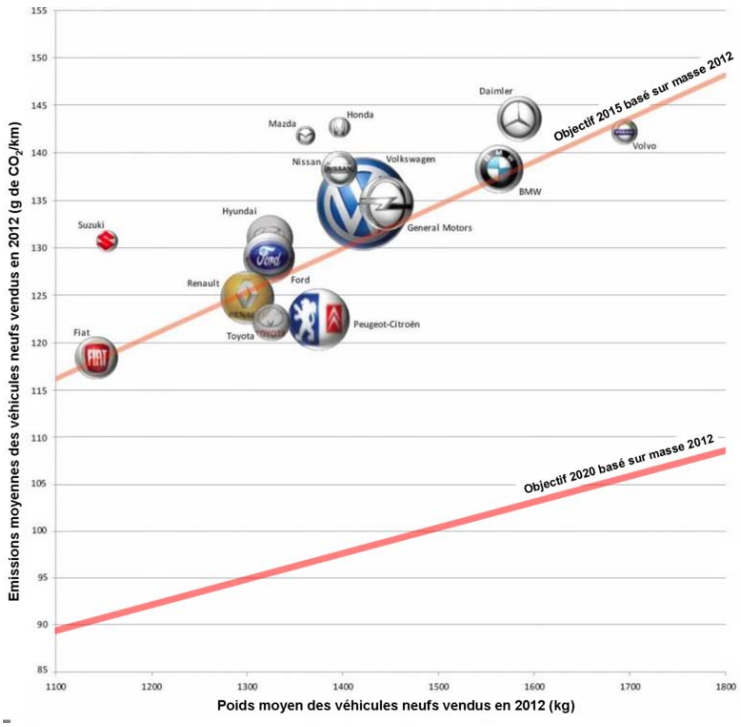


FIG. 1.1: Réglementations 2015 et 2020 sur les émissions de CO_2 par constructeur en fonction de la masse moyen de leurs véhicules neufs vendus en 2012 (inspirée de © Transport & Environment).

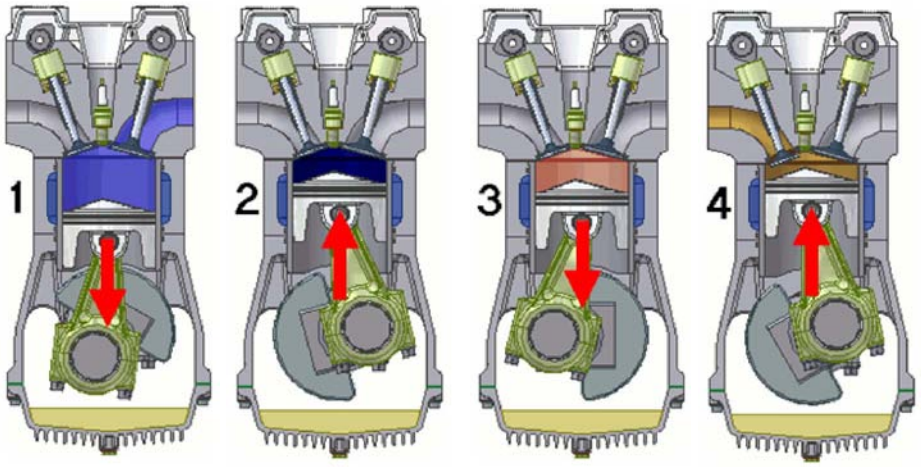
péennes.
Ces normes ont ainsi modifié l'objectif des constructeurs qui est maintenant de limiter la consommation des véhicules, car elle est directement liée aux émissions de CO_2. Les moteurs essence sont particulièrement impactés à cause de leur principal inconvénient par rapport aux moteurs Diesel, leur faible rendement. De nouvelles technologies sont apparues comme par exemple l'injection directe en moteur essence ou les moteurs à fort "downsizing" qui sont détaillés au §1.2 et permettent d'augmenter le rendement du moteur grâce à une augmentation de la charge. Cependant, ces nouvelles conditions d'utilisation favorisent l'apparition de combustions anormales décrites au §1.3, et qui sont l'objet d'étude de ces travaux de thèse visant à en améliorer la compréhension.

1.1 Le fonctionnement des moteurs essence

Dans cette partie, le fonctionnement d'un moteur essence 4 temps est abordé, avant de détailler les spécificités des moteurs à fort "downsizing" au §1.2. Chaque cycle moteur se divise en quatre phases :

- ✓ **L'admission (Fig. 1.2a) :** durant cette phase, le piston descend et les soupapes d'admission s'ouvrent permettant de remplir la chambre de combustion avec l'air frais (ou un mélange air-carburant dans un moteur à injection indirecte). Si la technique de recirculation des gaz d'échap-





(a) Admission (b) Compression (c) Détente (d) Echappement

FIG. 1.2: Schématisation du fonctionnement d'un moteur essence 4 temps.

pement (EGR pour Exhaust Gas Recirculation) est utilisée, les gaz sont prélevés directement à l'échappement, ramenés à l'admission où ils sont mélangés et admis en même temps que les gaz frais (GF).

✓ **La compression (Fig. 1.2b) :** elle débute au Point Mort Bas (PMB), alors que les soupapes d'admission sont en train de terminer leur fermeture. En effet, l'inertie des gaz permet de continuer à admettre malgré la remontée du piston pendant quelques degrés vilebrequin vu la faible cinématique du piston. Une fois les soupapes d'admission complètement refermées, le piston continue sa remontée, comprimant les gaz frais dont la température et la pression augmentent. En bout de course, la position maximale du piston est appelée Point Mort Haut (PMH).

✓ **La détente (Fig. 1.2c) :** cette phase correspond à la descente du piston. Dans les moteurs fortement chargés, l'allumage se produit pendant la détente, quelques degrés vilebrequin après le PMH pour limiter l'apparition de combustions anormales (§ 1.3). La flamme initiée dans la chambre par la bougie se propage, consommant le mélange air-carburant. Le piston est alors repoussé vers le bas, récupérant le travail de la combustion.

✓ **L'échappement (Fig. 1.2d) :** quelques degrés vilebrequin avant que le piston n'atteigne le PMB, les soupapes d'échappement s'ouvrent. La pression encore élevée dans la chambre (de l'ordre de plusieurs bars) permet de débuter l'échappement alors que le piston termine sa descente. Une fois au PMB, le piston remonte permettant de pousser les gaz chauds à l'échappement.
Au voisinage du PMH, les soupapes d'échappement terminent leur fermeture alors que celles d'admission s'ouvrent, c'est la phase de croisement. Ce croisement permet de bien vidanger la chambre de combustion, les derniers gaz brûlés restant dans la chambre sont balayés par les gaz frais en cours d'admission.



Le principal avantage du moteur à allumage commandé sur le moteur Diesel est son fonctionnement à richesse 1. Ce fonctionnement à la stoechiométrie permet en effet l'utilisation d'une catalyse 3 voies dont la relative facilité d'application et l'efficacité de dépollution ont été prouvées depuis plusieurs années. Cet avantage s'avère également être une contrainte majeure car l'obtention d'un mélange à richesse 1 s'effectue par une gestion des gaz à l'admission à l'aide d'une vanne papillon. Celle-ci entraîne de fortes pertes par pompage lors des transvasements gazeux aux faibles et moyennes charges, pertes qui sont en grande partie responsables du faible rendement de ces moteurs sur cette plage de fonctionnement.

1.2 Le concept de "downsizing"

Une des techniques prometteuses pour lever ce verrou est l'utilisation du downsizing, schématisé sur la figure 1.3. Cette technologie consiste à réduire la cylindrée des moteurs en augmentant la puissance unitaire par l'utilisation d'une forte suralimentation.



FIG. 1.3: Schématisation du downsizing.

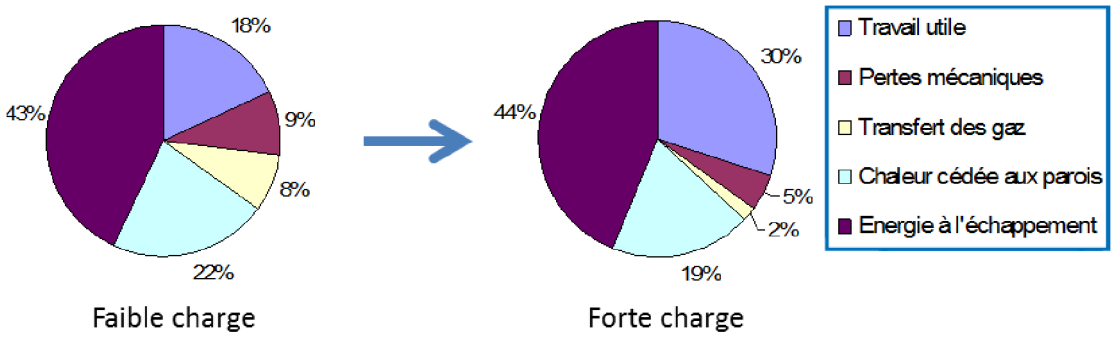


FIG. 1.4: Influence de l'augmentation de charge d'un moteur sur la répartition de l'utilisation de l'énergie générée par la combustion [116].

Le moteur fonctionne ainsi dans une plage de charge plus élevée, et la figure 1.4 représente la répartition de l'énergie au cours du cycle pour un moteur classique (à gauche) et un moteur forte charge



(à droite). Même si une légère différence est présente au niveau de la chaleur cédée aux parois, on remarque que les principaux bénéfices de l’augmentation de la charge s’effectuent au niveau des pertes mécaniques, mais surtout des pertes par pompage (transfert des gaz) lors de l’admission des gaz qui présentent une réduction de 12%. En effet, lors d’une utilisation à forte charge, l’ouverture de ce papillon est plus forte, ce qui limite les pertes de charge.
Le rendement de ce type de moteur est ainsi amélioré de façon non négligeable, pour atteindre des niveaux proches de ceux d’un moteur Diesel tout en évitant la production de suies.
Pour finir, le bénéfice du downsizing est également visible sur la figure 1.5 qui représente la consommation spécifique indiquée (CSI) en fonction de la charge à iso-régime. Le downsizing vise à augmenter la charge (comme présenté par la flèche rouge) pour se rapprocher de la valeur optimale qui correspond au point minimum sur la courbe de la CSI (noire).

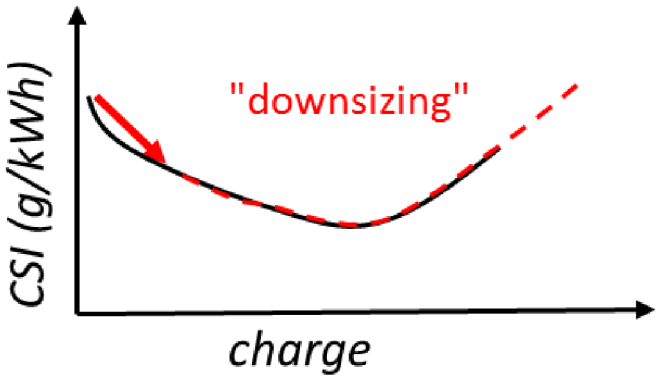


FIG. 1.5: Schématisation de l’évolution de la consommation spécifique indiquée (CSI) en fonction de la charge pour un point à iso-régime [116]. La flèche rouge schématise le gain obtenu grâce à l’utilisation du “downsizing” par rapport à un moteur faible charge.

Les deux principales caractéristiques de ce type de moteur sont :

- ✓ **une forte charge :** la charge d’un moteur est calculée grâce à la pression moyenne indiquée (PMI) qui correspond à la pression moyenne qu’il faudrait appliquer au piston pendant la détente pour égaler le travail moyen d’un cycle. La PMI est définie par l’expression :

$$PMI = \frac{\int -PdV}{Cylindree} \tag{1.1}$$

  avec P la pression et V le volume de la chambre de combustion.
  Un moteur atmosphérique avoisine une PMI de l’ordre de 10-11 bars, alors que la PMI d’un moteur forte charge comme les moteurs downsizés est de l’ordre de 20 bars.

- ✓ **une forte aérodynamique interne :** les conduits d’admission sont dessinés pour favoriser le mouvement aérodynamique de tumble schématisé sur la figure 1.6a. Ce mouvement d’enroulement du fluide est caractéristique des moteurs essences. Proche du PMH, il est complété par le squish (Fig. 1.6b) qui correspond à une chasse des gaz en fin de compression. Ces gaz se recentrent dans la chambre, permettant d’augmenter le niveau de turbulence au moment de l’allumage.
  A titre de comparaison, l’aérodynamique des moteurs Diesel est caractérisée par le mouvement de



swirl (Fig. 1.6c). Ce mouvement aérodynamique est peu présent en moteur essence, ce qui sera vérifié lors de la validation de l'aérodynamique interne de notre configuration (§5.2.3).



(a) Mouvement de tumble (b) Mouvement de squish (c) Mouvement de swirl

FIG. 1.6: Schématisation des principaux mouvements aérodynamiques présents en moteur automobile.

Cependant, du fait de conditions thermodynamiques plus sévères liées l'utilisation d'un turbocompresseur, l'application de cette technologie est limitée par l'apparition de combustions anormales que sont le cliquetis et le rumble (appelé également super-cliquetis). La description de ces phénomènes fait l'objet de la partie suivante.

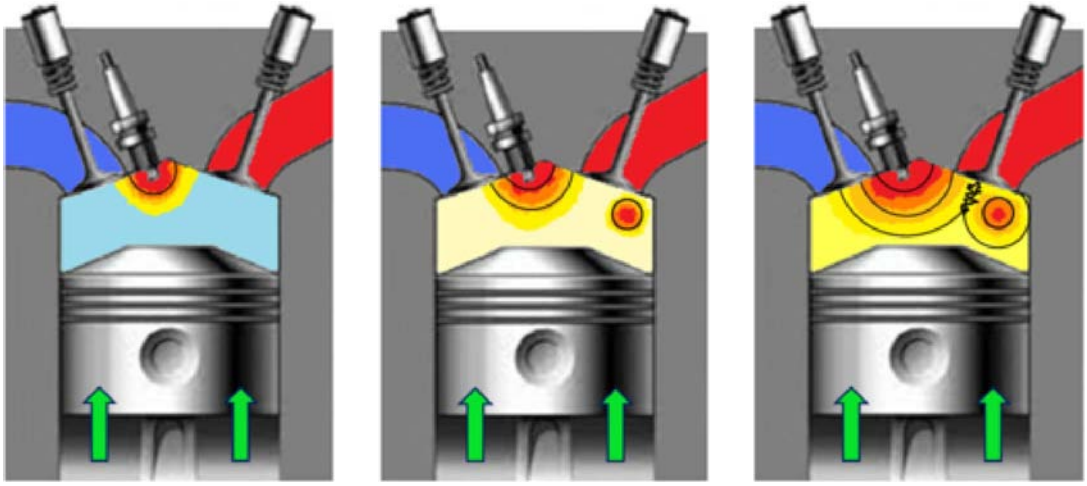
1.3 Qu'est-ce que les combustions anormales ?

Le terme de combustions anormales regroupe les phénomènes cliquetis et rumble, qui sont bien distincts, tant au niveau de leur déroulement, que de leurs effets sur le moteur :

✓ **Le cliquetis :**

Les cycles moteurs soumis à ce phénomène sont des cycles avec une combustion rapide. La bougie claque et allume le mélange air-carburant de manière tout à fait classique (Fig. 1.11a). Le front de flamme ainsi initié se propage rapidement dans la chambre, faisant augmenter la pression et la température dans les gaz frais. L'auto-inflammation (AI) d'une poche de gaz frais (GF) se produit alors que le front de flamme initié par la bougie n'a pas atteint cette région de la chambre (Fig. 1.11b et 1.11c). On retrouve également sur la figure 1.8 des visualisations expérimentales de plusieurs cycles sur lesquelles la flamme de prémélange, mais aussi l'auto-inflammation dans les gaz frais sont bien visibles. Ce phénomène dépend fortement de la vitesse de combustion, mais aussi de la composition du mélange et des stratifications en température, ce qui en fait un phénomène récurrent mais non cyclique.
Le dégagement de chaleur induit par l'uto-inflammation est brutal et engendre des fluctuations de





(a) Allumage par bougie (b) AI dans les gaz frais (c) Propagation des deux fronts de flamme

FIG. 1.7: Schématisation du phénomène de cliquetis en moteur automobile.

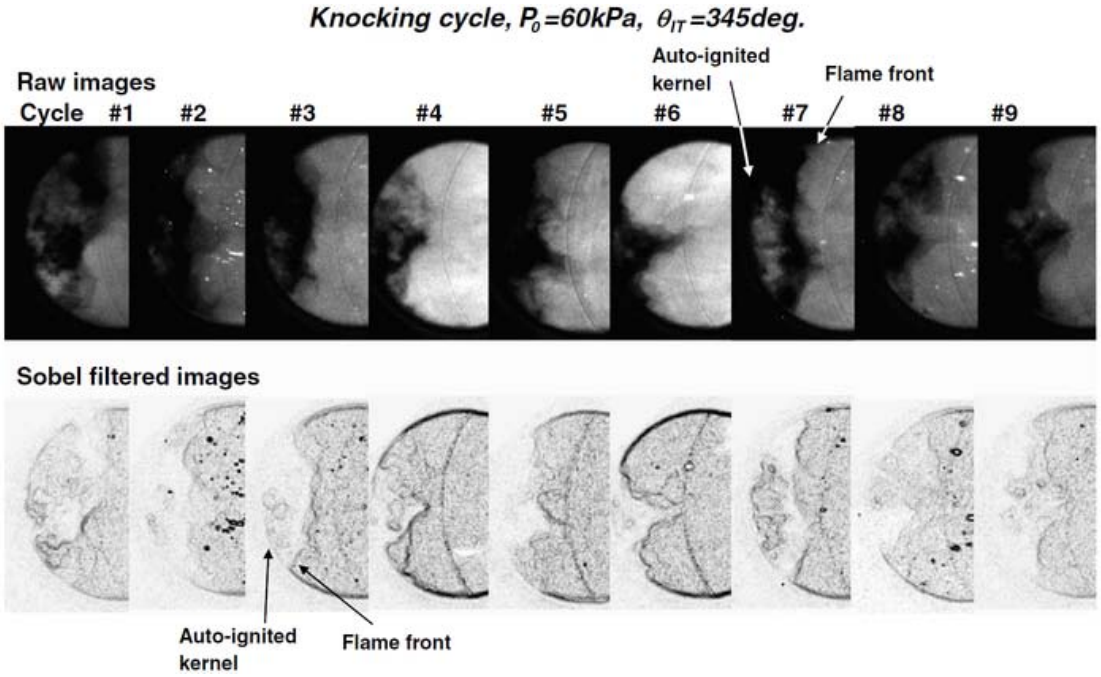


FIG. 1.8: Visualisations expérimentales de plusieurs cycles qui cliquètent [68].

pression et de température. La figure 1.9 permet de comparer le déroulement de la combustion pour un cycle sans combustion anormale (en haut) et pour un cycle avec cliquetis (en bas). Sur le cycle qui cliquète, les images A,B et C mettent bien en évidence la présence d'un front de flamme lié à la flamme de prémélange (FP) qui se propage dans la chambre. De plus, si on observe quelques



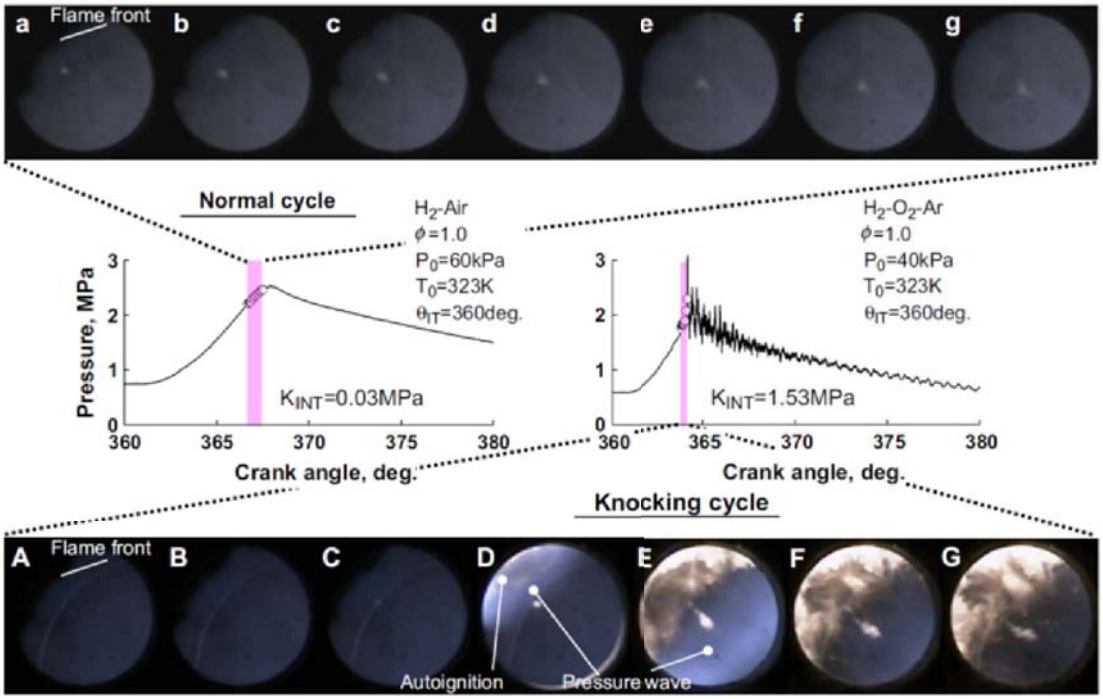


FIG. 1.9: Visualisations expérimentales et pression cylindre résultante d'une combustion normale (en haut) et d'un cycle avec du cliquetis (en bas) [67].

instants plus tard (image D), l'AI se déclenche, et on distingue la propagation d'ondes acoustiques (images D à G) dans la chambre, ondes qui ne sont pas présentes pour le cycle en combustion normale présenté en haut de cette figure.
L'enregistrement du signal de pression locale est également disponible sur la figure 1.9, et le cas avec combustion anormale présente des fluctuations caractéristiques du cliquetis qui résultent de la propagation et de la réflexion d'ondes acoustiques sur les parois du moteur. Ces pics de pression peuvent aboutir à une érosion à long terme des murs de la chambre de combustion ou du piston (Fig. 1.10).

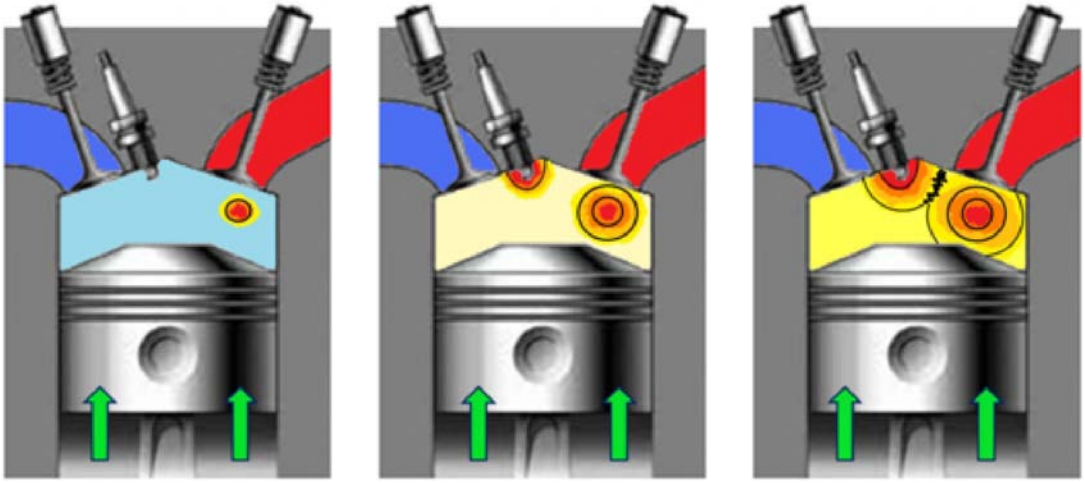
Des solutions existent actuellement pour limiter ce phénomène, comme par exemple une dégradation de l'avance à l'allumage (AVA) ou encore l'utilisation d'EGR. Cependant, elles s'apparentent à une dégradation du fonctionnement du moteur qui n'est plus utilisé dans sa plage optimale de fonctionnement. Ceci a un impact direct et néfaste sur les performances du moteur, sur sa consommation et ses émissions polluantes.

✓ **Le rumble :**
Ce phénomène appelé aussi super-cliquetis s'apparente à un cliquetis très intense dû à une auto-inflammation en masse des gaz frais. L'appellation de rumble est à un abus de langage car ce terme englobe souvent l'ensemble du processus de combustion qui aboutit à une AI en masse, et qui se déroule en trois phases :





FIG. 1.10: Erosion d'un piston due à du cliquetis.



(a) Préallumage (b) Allumage par bougie (c) Propagation des deux fronts de flamme

FIG. 1.11: Schématisation du phénomène de rumble en moteur automobile.

° **Pré-allumage :** les points de fonctionnement concernés par ce problème sont à faible régime et forte charge. Ainsi, avant même que la bougie ne claque pour allumer le mélange, les gaz frais s'auto-inflamment initiant dans la chambre une flamme de prémélange similaire à un allumage par bougie (Fig. 1.11a).

° **Propagation de flamme :** la flamme précédemment initiée se propage dans la chambre et selon l'instant auquel s'est produit le pré-allumage, l'instant de l'allumage peut être atteint. Dans ce dernier cas, deux fronts de flamme se propagent et entraînent une montée en pression et en température des gaz frais (Fig. 1.11b).

° **Rumble :** le pré-allumage mentionné précédemment intervient souvent de façon précoce



dans le cycle, et les gaz frais restants atteignent leur délai d'AI relativement tôt. Le pourcentage de gaz frais est alors plus important que dans le cas d'un cycle en cliquetis, aboutissant à un cliquetis très intense (Fig. 1.11c).

L'appellation rumble est issue du bruit de grondement mécanique résultant de vibrations de l'attelage mobile (notamment des paliers) induites par les oscillations de pression. En effet, les pressions dans la chambre de combustion peuvent atteindre trois à quatre fois la pression d'un fonctionnement normal (Fig. 1.12a). Ce phénomène très sporadique est de plus extrêmement difficile à prévoir et à limiter, mais les fluctuations de pression mentionnées précédemment peuvent aboutir à la destruction du moteur en quelques cycles comme le montre l'exemple des figures 1.12b.

A ce jour, malgré les efforts considérables entrepris pour tenter de mieux analyser ces deux phénomènes, la compréhension de leurs causes et des mécanismes physiques qui les caractérisent reste encore partielle. Les deux parties suivantes sont ainsi consacrées à un état de l'art des études expérimentales et numériques pour la compréhension du cliquetis et du rumble.

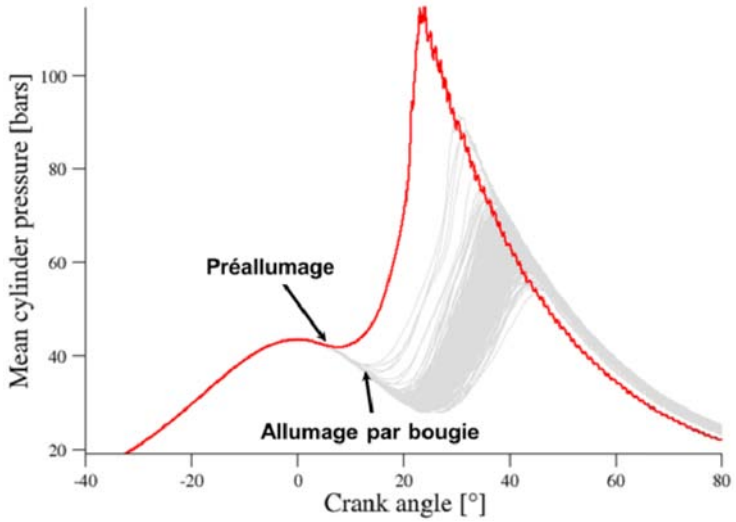
1.4 Etude expérimentale des combustions anormales

Le cliquetis et le rumble sont sujets à de nombreuses recherches expérimentales depuis de plusieurs décennies. L'ensemble de ces études a notamment permis de mieux comprendre les mécanismes globaux d'apparition de ces deux phénomènes qui ont été décrits rapidement au § 1.3.

Ainsi, il a été mis en évidence que le cliquetis est issu d'une auto-inflammation des gaz frais alors qu'une flamme de prémélange initiée par la bougie se propage dans la chambre. Ce phénomène apparait à forte charge et généralement pour les cycles ayant une combustion rapide comme l'ont mis en évidence Burluka et al. [16]. De plus, le mélange n'étant pas homogène, l'auto-inflammation est initiée en réalité à différents endroits, ce qui est confirmé par de nombreuses visualisations expérimentales issues de différents diagnostics optiques [8, 72, 73, 97, 98, 101]. De plus, Kawakara & al. [67, 68] mettent également en évidence la présence d'ondes acoustiques émises par l'AI des gaz frais dans la chambre de combustion grâce à des visualisations par caméra rapide (Fig. 1.8 et 1.9). Ces ondes sont responsables des fluctuations du signal de pression caractéristiques d'un fonctionnement moteur avec du cliquetis. Leur amplitude étant relativement limitée, elles ont l'avantage de permettre la détection de l'apparition du cliquetis grâce à une mesure et une analyse fine du signal de pression local. Les paramètres de contrôle moteur peuvent ainsi être adaptés en quelques cycles lors du fonctionnement moteur, et différentes techniques peuvent être mises en place pour limiter son apparition :

- ✓ une allumage plus tardif ou un enrichissement de la charge permettent par exemple de diminuer la pression et la température des gaz frais dans la chambre au moment de l'allumage. Cependant, ces modifications engendrent une dégradation du fonctionnement du moteur respectivement au niveau de son rendement et de ses émissions polluantes.
- ✓ une baisse du rapport volumétrique permet également de limiter l'échauffement des GF lors de la compression, mais s'accompagne d'une baisse du rendement ;
- ✓ l'injection directe peut jouer un rôle limitant dans l'apparition du cliquetis, car l'évaporation du carburant refroidit la charge [133].





(a) Influence du préallumage sur la pression cylindre expérimentale (Cycle rouge)



(b) Casse mécanique due à du rumble

FIG. 1.12: Influence du rumble sur la pression cylindre et dommages engendrés sur un piston

Si on s'intéresse maintenant au rumble, ce phénomène est connu depuis de nombreuses années et on retrouve ce terme notamment dans la classification des combustions anormales de Heywood [61]. Cependant, la signification de ce terme a évolué, car dans les années 50', il désignait une combustion initiée par des dépôts dans la chambre de combustion suite à des périodes de fonctionnement prolongées au ralenti sur des moteurs faible charge [39, 104, 106, 120]. Le fonctionnement des moteurs a fortement évolué en quelques décennies notamment au niveau de la charge, mais le terme de rumble ou "super cliquetis" est resté. Il caractérise à présent un cliquetis très intense qui est déclenché par une AI des



GF avant même que la bougie n'allume le mélange. Cette AI en masse résulte de l'augmentation de la température des gaz frais due à la propagation de la flamme initié par le préallumage et la bougie qui dans certains cas, a eu le temps d'allumer le mélange entre l'apparition du préallumage et du super-cliquetis. Le déclenchement de cette AI en masse entraine des niveaux de pression très élevés dans la chambre, et soumet le moteur à des contraintes locales très fortes de plusieurs centaines de bars. C'est donc le principal facteur limitant à l'exploitation du potentiel théorique des MAC avec un très fort "downsizing" [61, 137].
L'étude du rumble est donc directement liée à l'étude du préallumage et deux types ont été identifiés expérimentalement :

- ✓ le préallumage par surface chaude. Ce phénomène est bien connu des expérimentateurs car l'AI est déclenchée par une surface chaude dans le moteur. Cependant, ce n'est pas le plus dangereux pour la mécanique car une bonne conception en amont permet de l'éviter facilement en refroidissant les zones identifiées comme à risques, ou en utilisant une bougie avec un indice de température adapté. [37] L'apparition d'un cliquetis très intense est alors annihilée.

- ✓ le préallumage thermodynamique. Les conditions d'apparition du rumble dans les moteurs actuels (à bas régime et à forte charge) rendent la combustion extrêmement sensible à la moindre perturbation, et le préallumage dit thermodynamique correspond à une AI qui se déclenche dans l'écoulement à partir d'une perturbation aérodynamique ou thermochimique.

Des visualisations de ce phénomène ont été obtenues par Zaccardi & al. [141]. Malgré cela, les causes précises restent à établir et la plupart du temps, les moteurs automobiles mis sur le marché sont étudiés pour tourner sur une plage de fonctionnement éloignée des conditions d'apparition du rumble. En effet, si on essaye expérimentalement de s'en approcher pour l'étudier comme cela a été le cas dans la base de données (BDD) ICAMDAC, on s'expose à des pressions mesurées de plusieurs centaines de bars et donc à des casses moteur quasi immédiates.

Comme décrit précédemment, les études expérimentales ont montré que le déclenchement d'un type de combustions anormales n'est possible qu'à la seule condition d'avoir une AI dans les GF alors qu'une flamme issue de la bougie dans le cas du cliquetis ou initiée par le préallumage dans le cas du rumble se propage dans la chambre. Cependant, cette AI initiale est une condition nécessaire mais non suffisante, car de nombreux paramètres doivent être pris en compte, et ce sont eux qui déterminent l'intensité et la fréquence du cliquetis. En effet, les conditions thermodynamiques locales entourant le point chaud doivent être favorable pour que l'AI soit capable d'initialiser le développement d'une flamme car dans le cas contraire le dégagement de chaleur sera trop faible pour influencer le reste de la combustion. De même l'instant d'apparition de l'AI est important et Kawahara & al. [67] montrent que l'intensité du cliquetis augmente avec la masse de GF disponible au moment de l'AI. Enfin, différents travaux expérimentaux ont mis en évidence la présence d'interactions entre la combustion et les ondes acoustiques [73]. La présence d'ondes de chocs générées par l'AI dans certaines conditions a été visualisée en configuration académique avec des essais dans des chambres à volume contant ou des tubes à choc [2], mais également en moteur automobile [8, 54, 85]. Pan & al. [100] démontrent que différentes ondes acoustiques initiées à partir de différents spots d'AI peuvent interagir. En effet, les fronts d'onde se propagent l'un face à l'autre, ce qui faire chuter localement le délai et peut être à l'origine du développement d'une détonation. Ce phénomène est une explication aux très fortes pressions enregistrées durant le rumble,



et est confirmé par différentes visualisations notamment de Pöschl & al. [110] qui mesurent dans une machine à compression rapide des vitesses de propagation de flamme de l'ordre de 1400 m/s et un cliquetis très intense. De même, Kawahara & al. [67] mesurent une propagation de flamme approchant les 1150 m/s dans certaines conditions, ce qui est bien supérieur à la vitesse de propagation d'une flamme turbulente classique et suppose la mise en place d'un couplage entre l'auto-inflammation et les ondes de pression.

En résumé, plusieurs hypothèses ont été suivies ces dernières années pour tenter d'expliquer le déroulement des combustions anormales qui peuvent être engendrées par des surfaces chaudes, des dépôts sur les parois, des résidus d'huile ou encore hétérogénéités de mélange et de température. Cependant, un travail important reste à fournir pour positionner ces hypothèses entre elles. Pour cela, il est nécessaire de cibler certains mécanismes pour les étudier indépendamment les uns des autres dans des conditions maîtrisées, ce qui n'a pour l'instant pas été réalisé vu la complexité des études expérimentales. En effet, en plus de devoir diagnostiquer des phénomènes dans un milieu confiné, en mouvement et dans des conditions thermodynamiques drastiques, la compréhension des combustions anormales nécessite l'analyse de différents phénomènes physiques engendrés par un grand nombre de paramètres.
Un autre point important est que la majorité des recherches sont orientées vers l'étude des causes des combustions anormales, et non vers leur développement qui est d'autant plus difficile à suivre expérimentalement. Il semble cependant jouer un rôle majeur, car l'apparition d'une première AI ne définit en rien la suite des évènements et la mise en place d'une détonation pourrait être responsable de dégâts sur le moteur.
Ainsi, de gros efforts sont encore à fournir sur ces points-là, et la simulation peut avoir un rôle complémentaire dans cette démarche.

1.5 Apport de la simulation pour l'étude du cliquetis et du rumble

Compte tenu des difficultés évoquées précédemment, la simulation numérique semble avoir un réel potentiel de complémentarité avec les recherches expérimentales pour l'étude des combustions anormales. En effet, elle permet de dissocier et d'étudier séparément les différents mécanismes, et ainsi d'identifier le rôle de chacun dans leur apparition.

Une des approches numériques disponibles est la simulation 0D/1D qui possède un réel intérêt pour l'industrie automobile. Elle permet d'avoir accès à de nombreuses données moteur, comme les variations cycliques dues à l'utilisation d'EGR, la richesse globale ou encore les polluants avec des temps de calculs relativement raisonnables. Cette méthode a été appliquée à l'étude des combustions anormales, et deux approches différentes sont utilisées dans la littérature :

- ✓ la première utilise un indicateur empirique de cliquetis. Le délai d'auto-inflammation (AI) est déterminé en combinant à une intégrale de Livengood [84], soit un modèle AnB (basé sur une équation d'Arrhénius), soit de la chimie complexe tabulée pour obtenir la composition nécessaire au calcul de cette intégrale. Une fois la valeur de cette intégrale égale à un, le délai d'AI est atteint et différents indicateurs empiriques sont utilisés dans la littérature [65, 117]. Les principaux inconvénients de cette méthode résident dans le fait qu'elle nécessite une calibration importante pour chaque moteur étudié. De plus, les indicateurs de cliquetis ne sont pas directement comparables



avec les résultats expérimentaux. L'influence du cliquetis sur la pression cylindre n'est également pas prise en compte, ni son caractère sporadique.

✓ Une alternative a été proposée par Bougrine & al. [11]. Elle se base sur la réduction du modèle d'AI 3D TKI [25] qui, couplé à un modèle CFM-1D, permet de suivre les variables d'avancement de l'auto-inflammation et de la flamme de prémélange de manière découplées. Cependant, les stratifications en température dans les gaz frais ne sont toujours pas prises en compte, et il est difficile de mettre en place un indicateur de cliquetis fiable et comparable à l'expérience.

Ainsi, quelle que soit la méthode, la simulation 0D ne donne pas accès aux variations liées à la turbulence, ni aux stratifications en richesse dans la chambre de combustion. Le deuxième outil numérique disponible est la simulation 3D RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes), qui est aujourd'hui devenue un outil standard pour simuler des écoulements réactifs. Son coût de calcul relativement faible permet de simuler des configurations de taille industrielle (dont les moteurs à combustion interne), en résolvant les équations de Navier-Stokes moyennées. La simulation RANS est ainsi un outil efficace pour optimiser par exemple des chambres de combustion en se basant sur le cycle moteur moyen qu'elle permet d'obtenir. Différents travaux l'ont également utilisé pour prédire l'apparition du cliquetis.
Lafossas et al. [77] proposent en 2002 un modèle de cliquetis validé sur une large gamme de conditions moteur en faisant varier le régime, la charge, la richesse ou encore l'avance à l'allumage. La simulation RANS est ainsi capable de prévoir l'angle moyen d'apparition du cliquetis mesuré expérimentalement. Elle donne également accès à la localisation de l'AI dans la chambre, mais celle-ci n'est qu'une position moyenne qui rend pas compte de la localisation exacte des départs en AI. Le RANS permet enfin d'améliorer le design de la chambre en testant plusieurs aérodynamiques internes ou plusieurs positions de la bougie. Ces travaux mettent en évidence que l'augmentation de la turbulence lisse les gradients, alors que le placement de la bougie permet de modifier le déroulement de la combustion en laissant moins de temps aux zones les plus chaudes pour atteindre leur délai d'AI. Dans les deux cas, une diminution de la fréquence d'apparition du cliquetis est observée.

Eckert & al. [38] s'intéressent également au problème de cliquetis dans plusieurs configurations moteur. L'auto-inflammation est représentée ici par un modèle Shell [55, 56] implanté dans le code Kiva-3V. Ce modèle est un schéma cinétique simplifié pour l'AI, et le faible nombre d'espèces et de réactions offre la possibilité d'intégrer directement ce modèle dans un code de calcul CFD (même si le surcoût en temps de calcul n'est pas négligeable). Il reproduit de façon globalement satisfaisante les oscillations de pression engendrées par l'AI, et les tendances d'augmentation de l'intensité du cliquetis avec la décroissance du régime moteur. Cependant, une nuance doit être apportée sur ce point, car les fluctuations réelles engendrées par du cliquetis sont liées au couplage local entre la réaction d'AI et la pression. Cette information n'est pas disponible sur une moyenne, et le RANS ne permet donc pas de capter directement les fluctuations présentes sur un signal expérimental, mais un niveau moyen de fluctuations qui peut fortement varier par rapport à un signal réel. Un autre aspect est étudié par les auteurs, à savoir l'acoustique interne grâce à une analyse fréquentielle des signaux de pression. Les principaux modes acoustiques de la chambre de combustion présentent une bonne cohérence avec les résultats théoriques.

En 2005, Teraji et al. [128] proposent le modèle UCFM pour Universal Coherent Flamelet Model, et l'appliquent à la prédiction du cliquetis. Une analyse similaire aux travaux de Lafossas et al. [77] est proposée, avec une comparaison du délai d'apparition du cliquetis sur une plage de régimes, de charges et de richesses. Dans cette étude, une intégrale de Livengood [84] permet de prédire le délai d'AI, et une fois celui-ci atteint, la quantité de gaz frais (GF) restante est déterminée. Il est également possible de suivre



la quantité de carburant brûlée en AI à partir du dégagement de chaleur, permettant de déterminer une intensité de cliquetis. Basée sur les résultats numériques, une optimisation de la chambre de combustion est proposée en déplaçant la position de la bougie. Les constatations de Lafossas et al. [77] sur le rôle majeur de la position du cliquetis sont à nouveau validées numériquement dans cette étude.

Enfin, Corti et al. [29] proposent en 2009 une analyse détaillée du cliquetis basée sur de la CFD combinée à des outils de traitement du signal. Les auteurs reprennent le modèle AnB proposé par Lafossas et al. [77], ainsi qu'un jeu de paramètres relativement proches. Toutefois, ce modèle a été initialement calibré pour de l'essence et sur une plage de pression et température relativement restreinte. Chaque variation de carburant ou de conditions d'entrée (comme cela est le cas entre différents points moteur) nécessite de recalibrer entièrement le modèle avec un nouveau jeu de paramètres. La simulation RANS arrive dans ce cas à reproduire la pression cylindre ainsi que les fluctuations qui sont généralement utilisées pour prédire le cliquetis. Cependant, comme pour l'étude de Eckert & al. [38], l'obtention du cycle moyen liée à l'utilisation du RANS implique la prédiction d'oscillations de pression moyennes qui ne reflètent pas les fluctuations qui peuvent être générées cycle à cycle. Cette étude arrive toutefois à mettre en évidence le biais engendré les analyses basées sur la pression cylindre. En effet, les fluctuations sont fortement liées à la position relative entre le capteur et l'AI, et le signal enregistré sera sensiblement différent selon la localisation de l'AI. Pour pallier à ce problème, les auteurs proposent et valident une méthode innovante et indépendante de la position du capteur. Elle est basée sur l'analyse croisée entre l'amplitude maximale du dégagement de chaleur et des oscillations de pression, permettant ainsi d'anticiper les dommages que peut subir le moteur.

Le RANS peut également être utilisé pour mieux prédire l'origine du préallumage. Reveille et al. [112] analysent une configuration moteur dans laquelle une combustion anormalement rapide, mais non destructive et stable apparaît. D'après les résultats numériques, la combustion prémélangée seule ne peut expliquer la forte pression moyenne observée expérimentalement. Plus de la moitié du carburant est consommé par l'AI, ce qui laisse penser que ce point de fonctionnement est relativement proche d'un point rumble. Deux paramètres favorisant l'AI et donc le préallumage (si la charge du point étudié était légèrement augmentée) sont alors identifiés à savoir la température moyenne des gaz au PMH et la richesse du mélange.

Ewald et al. [38] s'intéressent également à la problématique du préallumage à l'aide d'une chaîne d'outils numériques. Une analyse éléments finis permet d'obtenir la bonne distribution de température sur les parois. Cette discrétisation est utilisée dans un calcul CFD à l'aide du code Star CD, permettant d'obtenir l'état thermodynamique avant le PMH, qui est ensuite analysé par un outil de prédiction du préallumage basé sur de la chimie complexe. Les auteurs s'intéressent aux deux causes identifiées selon eux comme facteur majeur dans l'apparition de ce phénomène, à savoir la charge (donc la température moyenne des gaz in fine comme déjà décrit dans [112]) et les températures parois. En analysant plusieurs points de fonctionnement, l'outil proposé permet de prédire le préallumage et notamment sa limite d'apparition, grâce à une variation de quelques degrés de la température moyenne des gaz utilisés en condition initiale.

Les deux études citées précédemment se focalisent sur l'apparition d'un préallumage stabilisé. En effet, une autre limitation forte liée à l'utilisation du RANS réside dans le fait que le cycle moyen n'est pas affecté par des phénomènes sporadiques, et notamment le rumble dont la fréquence d'apparition est de quelques évènements par millier de cycles. Ainsi, une étude directe n'est pas possible en RANS, et de nouvelles approches basées sur des fonctions de probabilités ont été développées récemment pour ex-



traire des probabilités sur l'apparition du préallumage à partir des simulations RANS.

Peters et al. [105] réalisent une étude basée sur une théorie raffinée de la turbulence appelée "dissipation element analysis". L'idée de mise en place d'une transition vers une détonation en moteur permettant d'expliquer les fortes pressions enregistrées expérimentalement est reprise par les auteurs. La mise en place de celle-ci nécessite cependant des conditions thermodynamiques bien particulières et notamment un faible gradient de température sur une distance assez conséquente. Les auteurs déterminent alors en s'appuyant sur la théorie qu'ils ont mise en place et sur le diagramme de Bradley & al. [14], une probabilité croisée entre le gradient de température et la longueur sur laquelle s'étend ce gradient. En utilisant des calculs RANS en moteur entraîné, une probabilité de préallumage est déterminée en chaque point du maillage, permettant in fine d'obtenir une probabilité maximale au cours du temps et la localisation dans la chambre des zones les plus soumises au préallumage. Ainsi, Peters et al. confirment l'hypothèse déjà évoquée [112], selon laquelle la température des GF est un facteur déterminant. Les températures initiales de l'écoulement ou les températures des parois influençant globalement la température de l'écoulement, et les auteurs mettent en évidence leur rôle majeur dans l'apparition du préallumage, contrairement à un point chaud qui ne réchauffe que localement les gaz. Ainsi le préallumage semble donc localisé dans les grosses structures turbulentes de l'écoulement où les gaz sont chauds et les gradients de température sont faibles. Le régime moteur ou l'indice d'octane sont également identifiés ici comme favorisant l'apparition de préallumage.
Linse et al. [83] utilisent une approche statistique différente pour déterminer une probabilité d'AI à partir de simulations RANS. La probabilité en chaque point de la chambre est dans ce cas issue de l'intégration de la fonction de densité de probabilité (ou PDF, Probability Density Fonction) de la variable d'avancement en AI considérée comme ayant une forme de gaussienne tronquée, ce qui représente une hypothèse forte. Les positions les plus critiques vis-à-vis du préallumage peuvent alors être identifiées, et l'analyse de l'influence des stratifications en richesse et en température met en évidence que dans ces zones, on retrouve une forte température des gaz frais, avec des mélanges plutôt riches en carburant et de larges fluctuations de la fraction de mélange. Le modèle prédit de plus avec une relative précision l'angle de départ en AI et la tendance d'augmentation du nombre de cycle en AI lorsque l'AVA augmente, même si il surestime par définition ce nombre de cycles.

En résumé, de nombreuses études numériques basées sur du RANS s'intéressent aux problématiques des combustions anormales. Cependant, l'approche RANS décrit uniquement le cycle moyen et ne donne accès qu'à des valeurs moyennes au cours du cycle (pression cylindre, dégagement de chaleur par exemple) ou à l'angle moyen de départ en AI. Cette approche ne peut en aucun cas fournir des informations sur la fréquence, l'intensité ou la position exacte des départs en cliquetis et rumble. Le RANS peut ainsi être utilisé pour l'étude des causes des combustions anormales, et notamment du rumble [38, 112]. Cependant, il a été mis en évidence expérimentalement que l'apparition de l'AI est nécessaire mais son évolution est le facteur déterminant pour connaître notamment l'intensité du cliquetis. Or, l'étude des interactions entre l'AI et l'acoustique ne peut pas être réalisée à partir du cycle moyen.

Ainsi, compte tenu du caractère sporadique et des difficultés de modélisation associées, une alternative naturelle au RANS est d'utiliser la simulation 3D aux grandes échelles (LES pour Large Eddy Simulation). En effet, la LES donne directement accès au fonctionnement instantané du moteur, et permet de reproduire les variations cycle à cycle (CCV) ou des phénomènes instationnaires. La LES permet



également d'analyser dans le détail les mécanismes physiques favorisant notamment les combustions anormales, contrairement au RANS qui fournit des indicateurs basés sur des modèles issus d'une compréhension a priori. Une grande partie de la physique est modélisée par le RANS, qui n'offre donc pas la capacité d'explorer en profondeur les phénomènes physiques.
Plusieurs études ont ainsi permis d'illustrer le potentiel de la LES pour prédire l'aérodynamique interne des moteurs à piston comme [33, 57, 131], mais la LES a également été utilisée par IFPEN et PSA Peugeot Citroën dans un monocylindre à allumage commandé carburé au propane gazeux. Ce travail pionnier a illustré la capacité du code AVBP [96] à reproduire des variabilités cycliques observées expérimentalement, et à proposer une analyse de leurs origines [118, 130, 136]. Ces travaux se sont poursuivis dans le cadre du projet SGEmac, qui a permis de dégager les éléments principaux d'une méthodologie LES pour les moteur à allumage commandé (MAC) [36, 50].

L'étude des combustions anormales en LES est plus récente, mais les premières tentatives d'application ont permis de confirmer le potentiel de cette méthode pour l'étude de tels phénomènes.
En 2011, Lecocq et al. [81] proposent un nouveau couplage entre les modèles ECFM-LES et TKI-LES implémentés dans le logiciel AVBP. Ce couplage permet de suivre le développement complet de la combustion, de l'AI elle-même jusqu'à la consommation des gaz frais par la flamme de prémélange initiée par l'AI. Après validation, les auteurs appliquent ces modèles à un moteur essence pour une première étude qualitative des combustions anormales. Les fluctuations de pression liées au cliquetis sont visibles sur le signal de pression numérique, et la LES permet ainsi de reproduire une tendance bien connue des motoristes : dégrader l'avance à l'allumage permet de limiter l'apparition du cliquetis. Enfin, un cas rumble est forcé grâce à une source locale de chaleur imposée dans la chambre. Ce cas test permet de mettre en évidence la capacité de la LES à initier une flamme à partir de l'AI. Cependant, les caractéristiques du point de fonctionnement n'étant pas assez chargées, la flamme initiée par l'AI se propage dans la chambre sans entraîner de nouvelles AI dans les gaz frais comme dans un cas avec un préallumage suivi de rumble. Même si les développements restent à faire notamment pour bien dissocier l'avancement lié à la propagation de flamme de celui de l'AI, cette étude est la première à démontrer le réel potentiel de la LES pour l'étude des combustions anormales.

En 2013, Fontanesi et al. [41, 42, 43] utilisent une approche appelée "Hybrid approach LES" [123] qui combine des modèles LES à des modèles RANS modifiés. Ils réalisent une simulation LES du fonctionnement d'un moteur essence à injection directe grâce au code Star-CD. Les délais d'AI sont tabulés grâce à un mécanisme chimique semi-détaillé basé sur un carburant modèle TRF (Toluene Reference Fuel) de l'essence. L'AI est alors suivie de manière passive, permettant simplement de détecter le moment où le délai est atteint, sans assurer la consommation du carburant par l'AI, ni le développement d'une flamme liée à cette AI. Ce point est une des limites majeures de ces travaux, car il n'est alors pas possible d'effectuer une analyse quantitative du cliquetis à partir des signaux de pression cylindre, ni une analyse des mécanismes de couplage entre l'auto-inflammation et les ondes de pression.
Une première étude [42] des combustions anormales a été menée en s'appuyant sur les validations de multi-cycles LES réalisées antérieurement [43], mais dans laquelle on peut toutefois noter que les différents cycles LES ne capturent pas bien les variations cycle à cycle car ils sont principalement situés dans la partie haute de l'enveloppe expérimentale. Basé sur un échantillon de trois cycles, la LES permet de reproduire les tendances d'apparition de l'AI, à savoir aucune détection de cliquetis à l'AVA expérimentale, mais une fréquence d'apparition plus élevée lorsque l'AVA augmente (sans comparaison expérimentale pour les fortes AVA). Une approche basée sur des PDF de délai d'AI tracées par quart



de chambre de combustion (chaque région englobant une soupape) permet aux auteurs de conclure que sur la configuration étudiée, la région sous les soupapes d'admission est plus sensible au cliquetis. En effet, le tumble résiduel au moment de l'allumage convecte la flamme vers l'échappement, les GF côté admission ont alors plus de temps pour atteindre leur délai d'AI avant d'être consommés par la flamme de prémélange.

Fontanesi et al. [41] réalisent une seconde étude en conservant le même ensemble de cycles LES comme référence. Deux phénomènes liés au CCV sont analysés grâce à de la Proper Orthogonal Decomposition (POD), à savoir la propagation de la flamme de prémélange et la localisation des endroits où apparaît le cliquetis. Cette analyse s'avère efficace pour l'étude des CCV mais beaucoup moins dans le cas de l'AI. En effet, la POD est difficilement applicable lorsque de nombreux modes secondaires sont présents dans des proportions similaires. Dans ce cas, une analyse à partir de PDF sur la position angulaire de l'AI dans la chambre donne des résultats plus convaincants, permettant aux auteurs de confirmer par la LES que les départs d'AI sont localisés à proximité des 4 soupapes et principalement du coté admission.

Pour conclure, les travaux précédents ont permis de mettre en évidence les avantages de la LES par rapport aux simulations 0D ou RANS pour l'analyse des combustions anormales. Cependant, aucune étude quantitative en LES n'a à ce jour été effectuée pour mieux comprendre leurs causes, mais également pour étudier les interactions entre l'auto-inflammation et les ondes de pression qui semblent jouer un rôle majeur dans leurs développements comme l'ont mis en évidence les études expérimentales [67, 110].

En effet, les verrous pour aboutir à une étude numérique quantitative sont encore nombreux. Il est nécessaire de disposer de modèles numériques permettant de prendre en compte les différents modes de combustions et leurs évolutions simultanées. De plus, la mise en place de comparaisons fines avec l'expérience nécessite de disposer d'une base de données expérimentale dédiée à l'étude de ces phénomènes, mais également de réaliser des simulations LES multi-cycles coûteuses en temps de calcul et enfin de mettre en place des post-traitements numériques spécifiques. L'ensemble de ces points-clefs est l'objet de ces travaux de thèse dont les principaux objectifs sont détaillés dans la section suivante.

1.6 Objectifs de la thèse

Les sections 1.4 et 1.5 ont mis en évidence les difficultés d'étude expérimentale des combustions anormales en moteur automobile, et le réel enjeu de la simulation numérique. La simulation LES semble le candidat idéal pour arriver à reproduire et analyser ces phénomènes qui sont localisées en temps et en espace, car elle permet de représenter le fonctionnement instantané du moteur et d'étudier séparément l'influence de chaque paramètre. Cependant à ce jour et comme évoqué précédemment, réaliser une simulation LES en configuration moteur reste un défi tant au niveau du temps de calcul nécessaire, que de la modélisation numérique.

En effet, réaliser de nombreux cycles consécutifs en LES nécessite plusieurs centaines de milliers d'heures de calculs, mais c'est une condition sine qua none pour pouvoir établir une comparaison fiable avec les résultats expérimentaux. De plus, la modélisation numérique doit être capable de suivre le déroulement de l'AI depuis son initialisation jusqu'à l'extinction de la flamme issue de l'AI. Basé sur les nombreuses expériences précédentes [34, 49, 81, 129] et sur le savoir-faire disponible à IFPEN, au CERFACS et chez PSA Peugeot Citroën, le code AVBP a été choisi pour réaliser les travaux présentés dans cette thèse. Ces



travaux s'inscrivent ainsi dans le contexte de mise en place de l'outil LES AVBP pour la simulation du fonctionnement d'un moteur automobile, et viennent dans la continuité des études précédemment citées.

Le **chapitre 2** débute par une présentation du système d'équations filtrées de la LES, et des différents termes à modéliser pour aboutir à une résolution de ces équations. Ainsi, les parties suivantes sont consacrées à la description des différents modèles utilisés dans ces travaux à commencer par la fermeture du terme de transport convectif de sous-maille mais également du tenseur de diffusion des espèces et du flux de chaleur. Pour simuler le fonctionnement d'un moteur automobile essence soumis à des combustions anormales, il est nécessaire de prendre en compte l'allumage par bougie, la propagation de la flamme, mais également l'AI. Les deux dernières parties sont ainsi consacrées à la présentation des modèles de combustion TFLES et ECFM-LES, du modèle d'AI TKI-LES et pour finir du modèle d'allumage ISSIM-LES.

Un des objectifs de la thèse est d'améliorer les modèles ECFM-LES, TKI-LES et ISSIM-LES et leur couplage, mais également de mettre en place les outils nécessaires à l'étude des combustions anormales (CA). C'est précisément l'objet du **chapitre 3** qui détaille dans une première partie la nouvelle méthode de couplage basée sur des avancements découplés qui a été mise en place durant cette thèse, ainsi que les validations qui ont été réalisées. Dans une deuxième partie de ce chapitre, les travaux réalisés sur le développement d'une méthode de résolution plus fine sont présentés. Cette méthode, appelée ESO_2 pour Engine Stroke Optimal Order, est basée sur des schémas numériques d'ordre élevé tout en restant compatible avec les contraintes d'une application de la LES en moteur à piston. Pour finir, des post-traitements spécifiques ont été mis en place pour la caractérisation des combustions anormales, notamment dans le but d'analyser les modes d'AI (transition vers la détonation ou la déflagration).

Le **chapitre 4** présente le projet ICAMDAC dirigé par IFP Energies nouvelles, dans lequel se sont inscrits ces travaux de thèse. Ce projet dédié à l'étude des combustions anormales regroupe plusieurs acteurs majeurs de la recherche en combustion en France au niveau expérimental mais également numérique. Une base de données expérimentale a été réalisée et pensée pour permettre une première comparaison quantitative entre les résultats LES et expérimentaux. Les différents points de fonctionnement choisis sont ainsi détaillés, mais également les principaux résultats expérimentaux obtenus au niveau de la caractérisation de l'aérodynamique et des combustions anormales.

La comparaison entre les résultats LES et l'expérience débute au **chapitre 5**, avec l'étude de l'aérodynamique interne. Dans cette partie, les résultats numériques sont analysés tant au niveau des champs de vitesses moyens qui sont comparés avec les champs PIV, que des profils de vitesses dans la chambre de combustion par exemple. Les conclusions aboutissent à une validation de la représentativité de la LES au niveau aérodynamique, permettant de passer aux calculs avec combustion.

Le premier point de fonctionnement étudié en combustion est un point typé cliquetis présenté au **chapitre 6**. Cette étude démontre la capacité de la LES à décrire les combustions anormales dans une configuration moteur suralimentée, en arrivant à reproduire sur une large gamme de variations paramétriques, les niveaux et les tendances observées lors de la réalisation des essais sur banc moteur, comme par exemple le pourcentage de cycles qui partent en cliquetis ou encore l'angle moyen de départ en AI. Une évolution non linéaire entre la masse brûlée en auto-inflammation et l'intensité du cliquetis nous a



poussé à réaliser une étude numérique des interactions entre les ondes de pression et l'auto-inflammation. Les conclusions mettent bien en évidence le rôle majeur des ondes de pression dans le déroulement des combustions anormales, et notamment la possibilité d'une transition vers la détonation dans certaines conditions.

Pour finir, le **chapitre 7** est consacré à l'étude d'un point dans des conditions de fonctionnement rumble. En utilisant les mêmes paramètres numériques que pour le point cliquetis, la LES est également capable de reproduire les résultats expérimentaux notamment au niveau de la pression cylindre locale dans la chambre. Le phénomène de rumble étant très sporadique, aucun des 15 cycles simulés en LES ne comporte de préallumage, et une étude à l'aide de probabilités est ainsi proposée et validée sur ce point de fonctionnement.

Tous ces résultats aboutissent à une analyse plus fine des différents mécanismes et de leur interaction favorisant l'apparition de combustions anormales dans un moteur à allumage commandé.



CHAPITRE

2

Modélisation LES de la combustion turbulente

Ce chapitre présente l'ensemble des modèles numériques utilisés dans AVBP au cours de cette thèse. Dans une première partie, les équations filtrées de la LES sont présentées. Ce système d'équations nécessite la modélisation de plusieurs termes, et les trois parties suivantes sont ainsi consacrées à la description des différents modèles de fermeture. On retrouve respectivement une présentation des modèles de turbulence, des fermetures liées aux termes de diffusion des espèces et de flux de chaleur ainsi que des modèles de combustion en flamme de prémélange ou en auto-inflammation. Pour finir, le principe et les équations du modèle d'allumage ISSIM-LES sont présentés.

2.1 Système d'équations de la LES

Le système d'équations utilisé en LES est obtenu par une opération de filtrage permettant de séparer les grandes et les petites échelles de la turbulence. Cette opération est réalisée grâce au produit de convolution de la quantité non-filtrée f avec un filtre spatial G_Δ de taille caractéristique Δ.

La quantité filtrée $\bar{f}$ s'écrit alors :

$$\bar{f}(x) = \int f(x')G_\Delta(x - x')dx' \tag{2.1}$$

où Δ est la largeur du filtre et x le vecteur position.

Après application du filtre, on peut donc décomposer f en sa partie dite résolue ou filtrée $\overline{f}$ et une partie dite de sous-maille f' qui correspond à l'effet des petites échelles. Cette décomposition s'apparente à celle de Reynolds pour les méthodes moyennées, et induit les mêmes problèmes lorsque l'écoulement



est compressible. Ainsi, par analogie avec la décomposition de Favre, on introduit le filtrage "au sens de Favre" :

$$\widetilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\overline{\rho}} \tag{2.2}$$

avec ses fluctuations associées f'' telles que :

$$f = \widetilde{f} + f'' \tag{2.3}$$

En pratique, le filtrage est lié au maillage utilisé. Plus il est fin et plus la taille du filtre diminue, le spectre de la turbulence est alors de mieux en mieux résolu. Ainsi, le filtrage n'intervient généralement pas explicitement dans les simulations, sauf dans les modèles de sous-maille fermant les termes non-résolus.

Les équations de transport filtrées utilisées dans les calculs LES sont donc :

Équation de continuité filtrée

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_k}{\partial x_k} = 0 \tag{2.4}$$

Équation de quantité de mouvement filtrée

$$\underbrace{\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_i}{\partial t}}_{I} + \underbrace{\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{u}_i}{\partial x_k}}_{II} + \underbrace{\frac{\partial \overline{\rho}(\widetilde{u_k u_i} - \widetilde{u}_k\widetilde{u}_i)}{\partial x_k}}_{III} = \underbrace{-\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_k}}_{IV} + \underbrace{\frac{\partial \overline{\tau_{ik}}}{\partial x_k}}_{V} \tag{2.5}$$

avec

$$\overline{\tau_{ik}} \approx \mu\left(\frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\mu\,\delta_{ij}\frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \tag{2.6}$$

De gauche à droite on trouve : le terme instationnaire filtré (I), le terme de transport convectif résolu (II), le terme de transport convectif non-résolu (III) que l'on va avoir à modéliser, le gradient de pression filtré (IV) et les contraintes visqueuses filtrées (V). Pour la suite de ce rapport, on adopte la notation T_{ik} pour le terme convectif non résolu, appelé aussi tenseur de Reynolds de sous maille :

$$T_{ik} = \widetilde{u_i u_k} - \widetilde{u}_i\widetilde{u}_k \tag{2.7}$$

Équation de l'énergie filtrée

$$\underbrace{\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{e_t}}{\partial t}}_{I} + \underbrace{\frac{\partial (\overline{\rho}\widetilde{e_t} + \overline{P})\widetilde{u_k}}{\partial x_k}}_{II} + \underbrace{\frac{\partial \overline{(\rho e_t + P)u_k} - \partial(\overline{\rho}\widetilde{e_t} + \overline{P})\widetilde{u}_k}{\partial x_k}}_{III} = \underbrace{\frac{\partial \widetilde{u}_i\overline{\tau_{ik}}}{\partial x_k}}_{IV} - \underbrace{\frac{\partial \overline{J_k^e}}{\partial x_k}}_{V} + \underbrace{\overline{\dot{\omega}_e}}_{VI} \tag{2.8}$$



A gauche, on reconnaît le terme instationnaire filtré (I), le transport convectif résolu (II) et le transport non résolu (III) qui devra être modélisé. A droite, apparaissent la dissipation visqueuse (IV), la diffusion thermique filtrée (V) et le terme source d'énergie lié aux réactions chimiques (VI) qu'il faudra fermer.

Équation des espèces filtrée

$$\underbrace{\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{Y_j}}{\partial t}}_{I} + \underbrace{\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{Y_j}}{\partial x_k}}_{II} + \underbrace{\frac{\partial \overline{\rho}(\widetilde{u_k Y_j} - \widetilde{u}_k\widetilde{Y_j})}{\partial x_k}}_{III} = \underbrace{\frac{\partial \overline{J_k^j}}{\partial x_k}}_{IV} + \underbrace{\overline{\dot{\omega}}_j}_{V} \tag{2.9}$$

Cette équation, valable pour toutes les espèces j, fait apparaître respectivement : un terme instationnaire filtré (I), un terme de transport convectif résolu (II), un terme de transport convectif non résolu (III), un terme de diffusion moléculaire filtré (IV) et un terme source d'espèces lié aux réactions chimiques (V). Les termes à fermer sont donc le terme de transport de sous-maille, le terme de diffusion moléculaire filtré et le terme source filtré.

Équation de la variable d'avancement filtrée

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u_k}\widetilde{c}}{\partial x_k} + \frac{\partial \overline{\rho}(\widetilde{u_k c} - \widetilde{u}_k\widetilde{c})}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho D_c \frac{\partial c}{\partial x_k}}\right) + \overline{\dot{\omega}}_c \tag{2.10}$$

Cette équation est analogue à celle des espèces et les termes à fermer sont : le terme de transport convectif non-résolu, le terme de diffusion (modélisé grâce à une fermeture de type gradient) et le terme source. La variable d'avancement n'est en pratique pas transportée mais est déduite de la fraction massique locale de carburant. Son équation de transport reste néanmoins intéressante puisqu'elle permet de dériver des modèles pour la fermeture des termes non-résolus de l'équation de transport des espèces.

Le système d'équations filtrées présenté précédemment a mis en évidence la présence de termes non fermés et représentant les phénomènes qui se déroulent en sous-maille. Ces termes nécessitent d'être estimés à l'aide de modèles de fermeture qui sont présentés dans les sections suivantes.



2.2 Les modèles de turbulence

Ces modèles (appelés par abus de langage modèles SGS pour Sub-Grid Scale) permettent de modéliser le terme de transport convectif de sous-maille (terme III de l'équation 2.5). Dans cette section, les modèles abordés sont ceux qui ont été choisis pour les calculs moteur LES de cette thèse à l'aide d'AVBP.

Ils sont basés sur le concept d'une viscosité turbulente ν_t, et utilisent l'approximation de Boussinesq. On peut alors écrire le terme de transport convectif non résolu T_{ij} comme :

$$T_{ij} = -2\nu_t \widetilde{S_{ij}^a} + \frac{2}{3} k_{sgs} \delta_{ij} \tag{2.11}$$

Il ne reste plus qu'à fermer le terme ν_t. C'est précisément l'objet des trois paragraphes suivants, avec la présentation des modèles de Smagorinsky (§ 2.2.1), Smagorinsky dynamique (§ 2.2.2) et sigma (§ 2.2.3).

2.2.1 Le modèle de Smagorinsky

Dans ce modèle, la viscosité turbulente est proportionnelle à une taille de maille et à une échelle de temps caractéristique de la turbulence. Smagorinsky [126] propose ainsi l'expression :

$$\nu_t = C_S^2 \Delta^2 \sqrt{2\widetilde{S_{ij}}\widetilde{S_{ij}}} \tag{2.12}$$

Δ représente la largeur du filtre introduite implicitement par le maillage, et $\sqrt{2\widetilde{S_{ij}}\widetilde{S_{ij}}}$ la partie symétrique du tenseur du gradient de vitesses. C_S est la constante de Smagorinsky dont la valeur peut être déterminée analytiquement. Par exemple, sous l'hypothèse d'une turbulence homogène et isotrope (THI) et d'une coupure spectrale dans la zone inertielle, Bailly & al. [7] montrent que la constante C_S est liée à la constante de Kolmogorov C_K par la relation :

$$C_S \approx \frac{1}{\pi} \left(\frac{3}{2} C_K \right)^{-\frac{3}{4}} \tag{2.13}$$

Pour une constante C_K=1.4, on obtient donc pour la constante de Smagorinsky : $C_S \approx 0.18$. En réalité cette valeur n'est valable que dans le cas d'une THI, mais lorsque l'écoulement possède un gradient de vitesse moyen important (cas d'un canal turbulent par exemple), la constante est de l'ordre de 0.1 [31, 94]. Il est important de noter que cette constante peut donc varier largement dans un moteur selon que l'on considère les écoulements proches de la culasse, en proche paroi dans le cylindre ou encore les mouvements turbulents présents dans la chambre de combustion et issus de la désintégration des mouvements cohérents de swirl et surtout de tumble (§ 1.1).

2.2.2 Le modèle dynamique de Germano

La viscosité turbulente de sous-maille est dans ce cas définie par l'expression :

$$\nu_t = C_{S_D}^2 \Delta^2 \sqrt{2\widetilde{S_{ij}}\widetilde{S_{ij}}} \tag{2.14}$$



Ce modèle dynamique [44, 45, 82] se différencie ainsi du modèle standard (Eq. 2.12) au niveau du calcul de la constante C_{S_D}. En effet, cette constante C_{S_D} n'est plus imposée par l'utilisateur, mais varie en fonction du temps et de l'espace.
Cependant, pour conserver des simulations robustes et éviter les forts gradients, le calcul de C_{S_D} s'effectue grâce à une moyenne selon les directions homogènes.

2.2.3 Le modèle Sigma

Dans le modèle Sigma proposé par Baya Toda & al. [132], la viscosité turbulente de sous-maille prend la forme suivante :

$$\nu_t = C_\sigma^2 \Delta^2 D_\sigma \tag{2.15}$$

On retrouve la largeur du filtre Δ (typiquement, la taille de la maille). Le terme D_σ s'exprime quant à lui, de la manière suivante :

$$D_\sigma = \frac{\sigma_3(\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma_2 - \sigma_3)}{\sigma_1^2} \tag{2.16}$$

avec σ_1, σ_2 et σ_3 sont les valeurs propres du tenseur des gradients de vitesses.

Grâce à l'utilisation des valeurs propres dans son expression, l'opérateur différentiel D_σ assure naturellement la décroissance de la viscosité turbulente à proximité des parois. De plus, il s'annule pour des écoulements bidimensionnels ($\sigma_3 = 0$), ainsi que dans le cas d'une expansion/contraction axisymétrique ou isotropique ($\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$).
Pour finir, la constante C_σ peut être fixée à 1.5 dans le cas du modèle Sigma statique, ou évaluée de manière dynamique au cours du temps. Cependant, à la différence du modèle dynamique de Smagorinsky, l'opérateur D_σ assure la décroissance de la viscosité turbulente à la paroi. Il est donc possible avec le modèle Sigma d'obtenir la constante C_σ au cours de la simulation, à partir d'une moyenne sur l'ensemble du domaine de calcul.



2.3 Fermeture du tenseur de diffusion des espèces et du flux de chaleur

Tout comme en RANS, la modélisation des flux de sous-maille d'énergie et d'espèces est faite par une approche de type gradient. Ces flux prennent la forme de flux diffusifs analogues à la loi de Fourier, et on introduit ainsi un nombre de Prandtl Pr_t et un nombre de Schmidt Sc_t turbulents pour l'évaluation des coefficients de diffusion :

$$\overline{(\rho e_t + P)u_k} - (\overline{\rho}\widetilde{e_t} + \overline{P})\widetilde{u}_k = -\overline{\rho} c_p \frac{\nu_t}{Pr_t}\frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_k} \tag{2.17}$$

$$\overline{\rho}(\widetilde{Y_j u_k} - \widetilde{Y}_j \widetilde{u}_k) = -\overline{\rho}\frac{\nu_t}{Sc_t}\frac{\partial \widetilde{Y}_j}{\partial x_k} \tag{2.18}$$

Le flux convectif non résolu de l'équation de c est semblable à celui des espèces et on a :

$$\overline{\rho}(\widetilde{u_k c} - \widetilde{c}\widetilde{u}_k) = -\overline{\rho}\frac{\nu_t}{Sc_t}\frac{\partial \widetilde{c}}{\partial x_k} \tag{2.19}$$

En réalité, le flux convectif non résolu peut avoir un comportement contre-gradient. Divers travaux existent sur ce sujet et proposent des termes supplémentaires pour la fermeture [10, 20, 58].



2.4 Les modèles de combustion

Le terme source d'espèces lié aux réactions chimiques (Eq. 2.9 du § 2.1 de ce chapitre) doit être fermé, et c'est précisément l'objet des modèles de combustion présentés dans cette partie. Cependant, dans un moteur automobile soumis à des combustions anormales, le carburant peut être consommé soit par la flamme de prémélange, soit par l'auto-inflammation. Ainsi, dans une première partie les différents modèles LES utilisés pour assurer la propagation de flammes de prémélange (TFLES et ECFM-LES) sont détaillés. Le modèle d'auto-inflammation TKI-LES qui est ici couplé au modèle ECFM-LES pour prendre en compte l'auto-inflammation est ensuite présenté dans un second temps.

2.4.1 Les modèles de flamme de prémélange

2.4.1.1 Le modèle de flamme épaissie (TFLES)

Principe du modèle

Le modèle de flamme épaissie ou TFLES (Thickened Flame for LES) a été initialement conçu par Butler, O'Rourke et Bracco [17, 99] pour le calcul de flammes laminaires. Il est basé sur l'épaississement artificiel du front de flamme par un facteur F suffisamment grand pour permettre sa résolution sur le maillage (figure 2.1). Cet épaississement n'affecte que l'épaisseur de la flamme résolue et ne modifie pas la vitesse laminaire de propagation de la flamme.

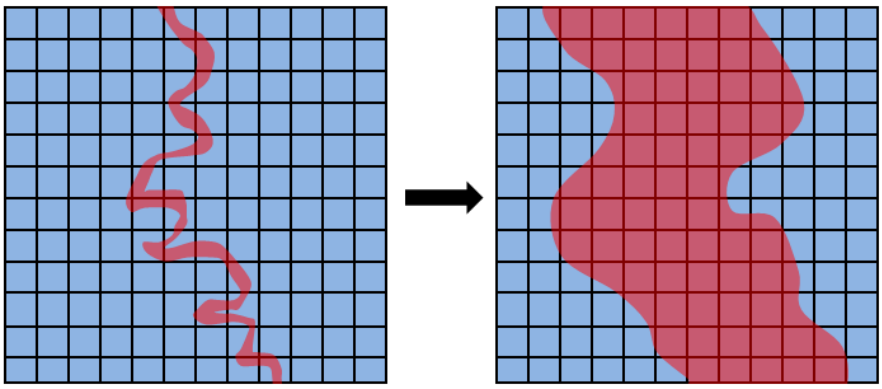


FIG. 2.1: *Épaississement artificiel d'une flamme pour sa résolution sur un maillage LES : une grande partie du plissement résolu disparaît et la modélisation d'un plissement de sous-maille devient nécessaire.*

En effet, la théorie des flammes laminaires prémélangées [71, 138] permet de montrer que l'épaisseur l_f et la vitesse S_l sont données par :

$$l_f \propto \frac{D}{S_l} \qquad \text{et} \qquad S_l \propto \sqrt{D\dot{\omega}} \tag{2.20}$$

où D est le coefficient de diffusion (thermique ou moléculaire) des gaz frais et $\dot{\omega}$ le taux de réaction moyen.



On voit ici que pour épaissir le front de flamme d'un facteur F sans en modifier la vitesse de propagation, il suffit de multiplier la diffusivité par F tout en divisant le taux de réaction par ce même facteur.
En pratique, on introduit explicitement l'épaississement dans les équations de transport des espèces et de l'énergie. Ainsi, on multiplie les diffusivités et on divise la constante pré-exponentielle de la loi d'Arrhenius par le facteur F.

Le principe de l'épaississement peut être généralisé simplement aux flammes turbulentes en appliquant la même approche aux grandeurs filtrées et semble donc très attractif. Néanmoins, il pose dans ces conditions quelques problèmes. En effet, le nombre de Damköhler qui régit les interactions entre échelles intégrales et front de flamme est alors divisé par F :

$$Da = \tau_t \frac{S_l}{l_f F} \tag{2.21}$$

Dans ces conditions, la nature des interactions simulées est fortement modifiée puisque les facteurs d'épaississement requis sont généralement de l'ordre de 100. En particulier, les petits tourbillons résolus sont de taille inférieure à l'épaisseur de flamme et deviennent incapable de plisser le front. Divers calculs DNS [6] ont permis de montrer que les tourbillons de taille inférieure à Fl_f n'affectent pas la flamme et que ceux de taille supérieure à Fl_f perdent de leur efficacité. Ainsi, la production de surface de flamme par la turbulence est sous-estimée.

Partant de ces constatations, des travaux [6, 26] proposent d'introduire une fonction d'efficacité permettant de retrouver les bons niveaux de production de surface de flamme. Cette fonction E peut être vue comme un modèle de sous-maille de production de surface. Elle s'écrit comme le rapport du plissement Ξ^0 qu'aurait dû avoir la flamme non épaissie et du plissement résolu Ξ^1 qu'elle a effectivement dans le calcul :

$$E = \frac{\Xi^0}{\Xi^1} \tag{2.22}$$

Des calculs de simulations directes et une analyse spectrale semblable à celle de Meneveau et Poinsot [88] pour établir le modèle ITNFS, permettent à Angelberger et al. [6] d'établir une expression du plissement de sous maille induit par une turbulence homogène isotrope :

$$\Xi = 1 + \alpha\Gamma\left(\frac{\Delta}{l_f}, \frac{u'_\Delta}{S_l}\right)\frac{u'_\Delta}{S_l} \tag{2.23}$$

où Δ est la taille du filtre LES, u'_Δ est la fluctuation de vitesse associée à Δ et Γ est une fonction d'efficacité définie par :

$$\Gamma\left(\frac{\Delta}{l_f}, \frac{u'_\Delta}{S_l}\right) = 0.75\exp\left[-\frac{1.2}{(u'_\Delta/S_l)^{0.3}}\right]\left(\frac{\Delta}{l_f}\right)^{\frac{2}{3}} \tag{2.24}$$

α est un constante du modèle qui, pour retrouver une vitesse de flamme turbulente $S_T = S_l\Xi$ du type $S_T = S_l + u'$, s'écrit d'après [26] :

$$\alpha = \beta\frac{2\ln(2)}{3c_{ms}(Re_t^{1/2} - 1)} \tag{2.25}$$



avec c_{ms}=0.28 et β une constante de l'ordre de l'unité [26].
Cette expression fait intervenir le nombre de Reynolds turbulent. Il doit donc être connu *a priori*, ce qui est rarement le cas. Pour s'affranchir de cette difficulté, on peut utiliser la fonction d'efficacité de Charlette & al. [20] qui ne fait pas intervenir les grandeurs intégrales :

$$\left[\Gamma\left(\frac{\widehat{\Delta}}{l_f},\frac{u'_{\widehat{\Delta}}}{S_l},Re_{\widehat{\Delta}}\right)\right]^2=\frac{18}{55}C_k\pi^{4/3}\int_1^{+\infty}C_{CMV}\left(\frac{r(k)}{l_f},\frac{v'(k)}{S_l}\right)^2K^{1/3}f\left(K,Re_{\widehat{\Delta}}\right)dK \tag{2.26}$$

avec

$$\frac{r(k)}{l_f} = \frac{1}{K}\frac{\widehat{\Delta}}{l_f} \tag{2.27}$$

$$\frac{v'(k)}{S_l} = \frac{u'_{\widehat{\Delta}}}{S_l}(K\pi)^{-1/3}\sqrt{\frac{18}{55}C_kf(K,Re_{\widehat{\Delta}}^{-1})} \tag{2.28}$$

$$(K,Re_{\widehat{\Delta}}^{-1}) = \exp\left(-\frac{3}{2}C_k(K\pi)^{4/3}Re_{\widehat{\Delta}}^{-1}\right) \tag{2.29}$$

$$C_{CMV}\left(\frac{\pi}{kl_f},\frac{v'(k)}{S_l}\right) = C_l\left(\frac{\pi}{kl_f},\frac{v'(k)}{S_l}\right)C_v\left(\frac{v'(k)}{S_l}\right) \tag{2.30}$$

$$C_l\left(\frac{\pi}{kl_f},\frac{v'(k)}{S_l}\right) = C_{CDVP}\left(\frac{\pi}{k_f},\frac{v'(k)}{S_l}\right) \tag{2.31}$$

$$C_v\left(\frac{v'(k)}{S_l}\right) = \frac{1}{2}\left[1+\text{erf}\left(3\log(2v'(k)S_l)\right)\right] \tag{2.32}$$

où $v'(k)$ est l'échelle de vitesse associée au nombre k, C_k=1,5 et

$$Re_{\widehat{\Delta}}=4\frac{\widehat{\Delta}}{l_f}\frac{u'_{\widehat{\Delta}}}{S_l} \tag{2.33}$$

Le nombre d'onde adimensionné K est associé au nombre d'onde k, par :

$$K=\frac{k\widehat{\Delta}}{\pi} \tag{2.34}$$

Dans les calculs LES, les effets de l'épaississement sur le plissement résolu sont corrigés en multipliant le taux de réaction et les diffusivités par E. Ceci revient à augmenter la vitesse laminaire du facteur E tout en conservant l'épaisseur Fl_f. Il est à noter que E apparaît ainsi comme un modèle de sous-maille pour le taux de réaction et le transport turbulent non-résolu.
Finalement, on peut résumer le principe de l'approche de la flamme épaissie par :

$$l_{fresolue}\propto\frac{EFD}{ES_l}=Fl_f \qquad \text{et} \qquad S_{propagation}\propto\sqrt{\frac{EFDE\dot{\omega}}{F}}=ES_l \tag{2.35}$$



Formulation des équations de transport
En reprenant l'équation de transport des espèces (§2.9) pour le carburant :

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k Y_F}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D_F \frac{\partial Y_F}{\partial x_j}\right) + \dot{\omega}_F \tag{2.36}$$

où $\dot{\omega}_F = \rho A Y_F Y_{O_x} \exp(-T_a/T)$

et en y appliquant le facteur d'épaississement F et la fonction d'efficacité E, on obtient :

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k Y_F}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho E F D_F \frac{\partial Y_F}{\partial x_j}\right) + \frac{E}{F}\rho A Y_F Y_{O_x} \exp(-T_a/T) \tag{2.37}$$

avec A la constante pré-exponentielle et T_a la température d'activation de la réaction.

Pour obtenir le système d'équations filtrées, il suffit donc d'utiliser les fermetures :

$$\overline{J_k^j} = -\overline{\rho} E F D_j \frac{\partial \widetilde{Y_j}}{\partial x_k} \tag{2.38}$$

$$\overline{J_k^e} = -E F \overline{\lambda} \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_k} \tag{2.39}$$

$$\overline{\dot{\omega}_j} = \nu_j \frac{E}{F} \widetilde{Y}_F \widetilde{Y}_{O_x} A \exp\left(-T_a/\widetilde{T}\right) \tag{2.40}$$

$$\overline{\dot{\omega}_e} = -Q_0 \overline{\dot{\omega}}_F \tag{2.41}$$

où ν_j est un coefficient lié au coefficient stoechiométrique de l'espèce j.

En pratique, afin de ne pas modifier les phénomènes de diffusion qui se produisent en dehors du front de flamme, une approche dynamique peut être adoptée [86]. Elle consiste à appliquer la fonction F uniquement à l'intérieur du front de flamme et à adopter un facteur d'épaississement égal à 1 dans le reste du domaine. Par ailleurs, afin de prendre en compte les processus de mélange turbulent, une diffusivité turbulente est incorporée aux flux diffusifs d'espèces et d'énergie en dehors de la zone de réaction (tableau 2.1).

Dans l'approche de flamme épaissie, la valeur du facteur d'épaississement est liée à une résolution de maillage donnée. En réalité, les maillages sont souvent non-réguliers et F doit alors s'adapter localement à la taille des mailles. Pour cela, une procédure dynamique de détermination de F peut être adoptée [107] : l'épaisseur de flamme résolue Fl_f doit être égal à $n_{res}\Delta_x$, où Δ_x est la taille d'une maille et n_{res} correspond au nombre de mailles sur lesquelles est résolu le front, ce qui implique :

$$F = \frac{n_{res}\Delta_x}{l_f} \tag{2.42}$$

2.4.1.2 Le modèle à densité de surface de flamme ECFM-LES

Le formalisme ECFM-LES (Extended Coherent Flame Model for LES) est basé sur une répartition bi-modale dans laquelle la flamme est considérée comme infiniment mince. Les gaz présents sont donc



Équation	int. du front	ext. du front
Espèces	$F\frac{\nu_l}{Sc_j}$	$\frac{\nu_l}{Sc_j}+\frac{\nu_t}{Sc_t}$
Energie	$F\overline{\lambda}$	$\overline{\lambda}+\overline{\lambda}_t$

TAB. 2.1: *Expressions des diffusivités à l'intérieur et à l'extérieur du front utilisée dans l'approche dynamique du modèle TFLES.* $\overline{\lambda}_t$ *est la diffusivité turbulente de la température.*

soit des gaz frais, soit des gaz brûlés (GB).
Comme pour le modèle TFLES, il n'est pas envisageable de résoudre la flamme (dont l'épaisseur typique est d'environ 0.1 mm) sur un maillage LES dont les mailles sont de l'ordre de 0.5 mm (correspondant approximativement à la taille du filtre LES Δ_x). Contrairement au modèle TFLES qui épaissit directement la zone de réaction, ECFM-LES utilise un nouveau filtre LES $\hat{\Delta}$ (Fig. 2.2), avec $\hat{\Delta} = n_{res}\Delta_x$ et $5 < n_{res} < 10$. Ce filtre permet ainsi d'augmenter la résolution du front de flamme, qui est en pratique résolue sur 5 à 10 cellules. Les équations présentées ci-après sont donc des équations filtrées à l'aide du filtre de taille $\hat{\Delta}$.

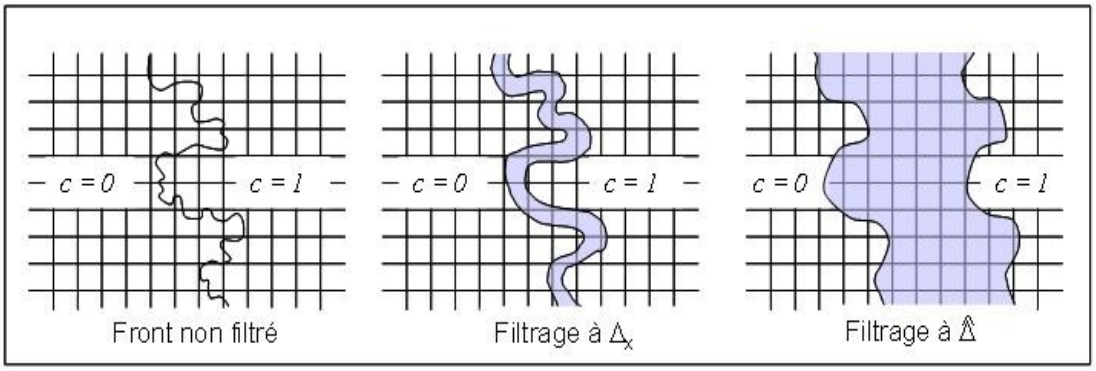


FIG. 2.2: Principe du filtrage du front de flamme à l'échelle $\hat{\Delta}$ [115].

On rappelle ici l'équation de transport des espèces filtrée en prenant en compte le modèle de fermeture pour le transport convectif non résolu :

$$\frac{\partial\bar{\rho}\widetilde{Y}_i}{\partial t} = -\nabla\cdot\left(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{Y}_i\right) - \nabla\cdot\left(\bar{\rho}\left(\frac{\nu}{Sc}+\frac{\hat{\nu}_t}{Sc_t}\right)\nabla\widetilde{Y}_i\right) + \bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_i \tag{2.43}$$

où $\bar{\rho}$ est la masse volumique moyenne et $\tilde{\mathbf{u}}$ est le vecteur vitesse filtré au sens de Favre. Sc_t et Sc représentent respectivement les nombres de Schmidt moléculaire et turbulent. ν est la viscosité cinématique

moléculaire et $\hat{\nu_t}$ est la viscosité cinématique turbulente dont le calcul est basé sur l'échelle du filtre $\hat{\Delta}$ grâce à la formule :

$$\hat{\nu_t} = C_v \hat{u}' \hat{\Delta} \tag{2.44}$$

$\hat{u}'$ est alors estimé à partir des fluctuations de sous-maille u' avec l'hypothèse de la cascade de Kolmogorov :

$$\hat{u}' = u' \left(\frac{\hat{\Delta}}{\Delta_x} \right)^{1/3} \tag{2.45}$$

et

$$u' = \frac{\nu_t}{C_\nu} \Delta_x \quad \text{avec } C_\nu = 0.12. \tag{2.46}$$

Il ne reste plus qu'à fermer le taux de réaction des espèces $\tilde{\dot{\omega}}_i$. Dans l'approche à densité de surface de flamme (FSD pour Flame Surface Density) utilisée par le modèle ECFM-LES, ce taux de réaction est modélisé de la manière suivante :

$$\bar{\rho} \tilde{\dot{\omega}}_i = \rho^u \widetilde{Y}_i^u|_u S_l \bar{\Sigma} \tag{2.47}$$

avec ρ^u la masse volumique des gaz frais, S_l la vitesse de flamme laminaire et $\bar{\Sigma}$ la densité de surface de flamme. $\widetilde{Y}_i^u|_u$ représente la fraction massique de l'espèce i (carburant ou O_2) dans les gaz frais. Pour déterminer la composition des gaz frais dans les cellules où il y a des gaz frais et des gaz brûlés, on utilise des traceurs de carburant vapeur et de dioxygène. L'évolution de ces "espèces fictives" est obtenue grâce à une équation de transport (sans terme source), il est alors possible de décrire l'évolution qu'aurait eu le mélange air-carburant sans combustion. La fraction massique $\widetilde{Y}_i^u|_u$ de l'espèce i (notée par la suite $\widetilde{Y}_{TF}$ pour le carburant et $\widetilde{Y}_{TO_2}$ pour le dioxygène) correspond donc au rapport de la masse m_i^u de l'espèce i dans les gaz frais sur la masse m^u des gaz frais présents dans la maille :

$$\widetilde{Y}_i^u|_u = \frac{m_i^u}{m^u} \tag{2.48}$$

La vitesse laminaire S_l est calculée à partir de la corrélation de Metghalchi et Keck [90], généralisée aux mélanges contenant des EGR [24] :

$$S_l = S_l^0 \left(\frac{T_u}{T_0} \right)^\alpha \left(\frac{P_u}{P_0} \right)^\beta (1 - 2.1 \chi_{EGR}) \tag{2.49}$$

où S_l^0 définit la vitesse de combustion laminaire non étirée dans les conditions thermodynamiques de références ($T_0 = 298$ K et $P_0 = 1$ atm) et χ_{EGR} le taux massique de gaz diluants. Les coefficients α et β sont définis dépendent de la richesse du mélange ϕ et de la nature du carburant. Ils sont donnés ici pour l'isooctane :

$$\alpha(\phi) = 2.18 - 0.8(\phi - 1) \tag{2.50}$$



$$\beta(\phi) = -0.16 + 0.22(\phi - 1) \tag{2.51}$$

La densité de surface de flamme est obtenue via la résolution d'une équation de transport proposée par Richard & al. [115, 118] pour la LES. Cette équation est rappelée ci-dessous :

$$\frac{\partial \overline{\Sigma}}{\partial t} + T_{res} = T_{sgs} + S_{res} + S_{sgs} - P + C_{res} + C_{sgs} \tag{2.52}$$

T_{res}, S_{res}, C_{res} et P sont respectivement les termes de transport, d'étirement, de courbure et de propagation dus à l'écoulement résolu sur le maillage. Les termes T_{sgs}, S_{sgs} et C_{sgs} sont respectivement les termes sous-maille pour le transport, l'étirement et la courbure.

Chacun des termes de l'équation précédente est explicité ci-dessous :

✓ Le terme de transport résolu T_{res} est donné par l'équation :

$$T_{res} = \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} \overline{\Sigma}) \tag{2.53}$$

✓ Le terme de transport de sous-maille T_{sgs} est généralement fermé sous l'hypothèse d'un gradient, et est écrit comme une diffusion turbulente à l'échelle $\hat{\Delta}$.

$$T_{sgs} = \nabla \cdot \left(\sigma_c \left(\frac{\nu}{Sc} + \frac{\hat{\nu_t}}{Sc_t} \right) \nabla \overline{\Sigma} \right) \tag{2.54}$$

σ_c représente le facteur d'épaississement de la flamme qui est imposé à 1 dans cette étude. En effet, le confinement de la combustion en moteur automobile induit un temps de propagation de la flamme court. Elle n'a pas le temps de se raidir, ni de s'épaissir et la valeur $\sigma_c = 1$, qui intervient dans l'Eq. 2.56, permet également d'obtenir le bon étirement de sous-maille S_{sgs}.

✓ L'étirement résolu S_{res} correspond au taux d'étirement de la flamme engendré par les tourbillons résolus, il est donné par l'expression suivante :

$$S_{res} = (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{n}\,\mathbf{n} : \nabla \tilde{\mathbf{u}}) \overline{\Sigma} \tag{2.55}$$

✓ L'étirement de sous-maille S_{sgs} représente quant à lui l'influence des structures non résolues. En plus des structures dont la taille est inférieure à la taille réelle des cellules, le filtrage du front de flamme à l'échelle $\hat{\Delta}$ implique que toutes les échelles plus petites que ce filtre doivent être prises en compte dans l'étirement de sous-maille.

$$S_{sgs} = \frac{\Gamma}{\sigma_c} \frac{\widehat{u'}}{\widehat{\Delta}} \overline{\Sigma} \tag{2.56}$$

On retrouve ainsi dans le calcul de S_{sgs}, la fonction d'efficacité Γ dont le calcul est basé sur les fluctuations de vitesse turbulente $\hat{u}'$ à l'échelle $\hat{\Delta}$. L'expression de cette fonction a été proposée par Charlette & al. [21] et modifiée par Richard & al. [115]



✓ Le terme de propagation P et le terme de courbure résolue C_{res} assurent la propagation laminaire de la flamme quand la turbulence de sous-maille est trop faible. Ils sont donnés par les équations :

$$P = \nabla.(S_d \mathbf{N} \overline{\mathbf{\Sigma}}) \tag{2.57}$$

$$C_{res} = S_d(\nabla \cdot \mathbf{N})\overline{\Sigma} \tag{2.58}$$

Leurs expressions sont basées sur la normale **N** à l'iso-surface de la variable de progrès filtrée $\tilde{c}$:

$$\mathbf{N} = -\frac{\nabla \tilde{c}}{|\nabla \tilde{c}|} \tag{2.59}$$

S_d est la vitesse de propagation relative à la vitesse moyenne de l'écoulement de l'iso-surface de la variable $\tilde{c}$ définie par :

$$S_d = -(1 + \tau \tilde{c}) S_l \tag{2.60}$$

avec $\tau = \frac{\rho^u}{\rho^b} - 1$ l'expansion thermique à travers le front de flamme, et ρ^u (respectivement ρ^b) la masse volumique des gaz frais (brûlés).

✓ Le terme de courbure sous-maille C_{sgs} représente l'influence de la courbure non résolue sur le plissement du front de flamme :

$$C_{sgs} = \beta S_l \frac{c^* - \bar{c}}{\bar{c}(1 - \bar{c})} (\overline{\Sigma} - \overline{\Sigma}_{lam}) \overline{\Sigma} \tag{2.61}$$

Pour calculer ce terme, la variable de progrès filtrée au sens de Reynolds est estimée à l'aide de l'expression :

$$\bar{c} = \tilde{c} \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}^b} \tag{2.62}$$

Les valeurs des constantes sont $\beta = 4/3$ et $c^* = 0.5$, et $\overline{\Sigma}_{lam}$ est la partie laminaire de la FSD définie par :

$$\overline{\Sigma}_{lam} = |\nabla \tilde{c}| + (\bar{c} - \tilde{c})\, \nabla.\mathbf{N} \tag{2.63}$$

Une nouvelle expression utilisée en RANS a été proposée dans cette thèse pour prendre en compte le plissement initial du noyau lors de l'allumage par bougie. Elle est présentée au § 3.1.2.



2.4.2 Le modèle d'auto-inflammation TKI-LES

Le modèle TKI (Tabulated Kinetics of Ignition) permet de reproduire des phénomènes d'auto-inflammation. Tout comme ECFM-LES, ce modèle est basé sur une répartition bi-modale de la variable de progrès dont la répartition s'effectue en fonction de la variable d'avancement $\tilde{c}$:

$$\tilde{c} = 1 - \frac{\tilde{Y}_F^u}{\tilde{Y}_{TF}} \tag{2.64}$$

avec $\tilde{Y}_F^u$ la fraction massique de carburant non brûlée et $\tilde{Y}_{TF}$ le traceur de carburant présent dans les gaz frais.

On peut ainsi écrire un taux de réaction pour la variable d'avancement $\tilde{c}$, en prenant en compte les effets de la propagation de flamme de prémélange (FP) et de l'AI [25] :

$$\bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_c = \underbrace{\rho^u S_l \bar{\Sigma}_{\tilde{c}}}_{FP} + \underbrace{(1-\tilde{c})\bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_c^{AI}}_{AI} \tag{2.65}$$

dans lequel $\bar{\rho}$ est la masse volumique moyenne des gaz, ρ^u la masse volumique locale des gaz frais et $\bar{\Sigma}_{\tilde{c}}$ la densité de surface de flamme.

Le facteur $(1-\tilde{c})$ pondère la contribution de l'AI par la fraction massique de gaz frais restant. Les valeurs $\tilde{\dot{\omega}}_c^{AI}$ sont quant à elles interpolées à partir d'une table TKI, réalisée a priori à partir de calcul en réacteur homogène à pression constante et avec une chimie complexe. Les valeurs de $\tilde{\dot{\omega}}_c^{AI}$ sont ainsi tabulées en fonction de la pression P, de la richesse locale ϕ, de la dilution, de la variable d'avancement $\tilde{c}$ et de la température des gaz frais T^u. Cette dernière est calculée en inversant l'expression de l'enthalpie des gaz frais $\widetilde{h}^u$ obtenue grâce à l'équation de transport :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{h}^u}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{h}^u}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}\frac{\nu_t}{Sc_t}\frac{\partial \widetilde{h}^u}{\partial x_i}\right) + \frac{\overline{\rho}}{\overline{\rho^u}}\frac{\partial \overline{P}}{\partial t} + \overline{\tau_{ij}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}} \tag{2.66}$$

Cependant, Michel & al [91] ont mis en évidence que le dégagement de chaleur peut être surestimé lorsque la variable d'avancement $\tilde{c}$ est utilisée. En effet, l'interpolation dans la table ne doit s'effectuer que lorsque le délai d'AI est atteint. A cet instant, un front de flamme peut être présent dans la cellule et $\tilde{c}$ peut être différent de zéro. Le taux de réaction d'AI initial est alors interpolé à partir d'une variable de progrès non nulle qui engendre des valeurs trop élevées de $\tilde{\dot{\omega}}_c^{AI}$. Pour résoudre ce problème, la solution proposée [79, 81] consiste à découpler la variable de progrès en une partie issue de la propagation de la FP et une seconde partie issue de l'AI des gaz frais restants dans la cellule. La fraction massique de carburant dans les gaz frais peut ainsi s'écrire :

$$\tilde{Y}_F^u = \tilde{Y}_{TF} - \tilde{Y}_F^{FP} - \tilde{Y}_F^{AI} \tag{2.67}$$

avec $\tilde{Y}_F^{AI}$ la fraction massique de carburant consommée par l'AI, et $\tilde{Y}_F^{FP}$ celle consommée par la flamme de prémélange.



$\tilde{Y}_F^{AI}$ est déduit de l'équation 2.67, on peut ainsi définir une nouvelle variable de progrès dédiée à l'auto-inflammation :

$$c_{ai} = \frac{\tilde{Y}_F^{AI}}{\tilde{Y}_{TF} - \tilde{Y}_F^{FP}} \tag{2.68}$$

$$= \frac{\tilde{Y}_F^{AI}}{\tilde{Y}_F^{AI} + \tilde{Y}_F^{u}} \tag{2.69}$$

La différence $\tilde{Y}_{TF} - \tilde{Y}_F^{FP}$ représente la masse de carburant restante, et pouvant potentiellement être consommée par auto-inflammation.

L'équation d'évolution de $\tilde{Y}_F^{AI}$ s'écrit alors en fonction de la variable d'avancement c_{AI} :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{Y}_F^{AI}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{Y}_F^{AI}\right) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\left(\frac{\nu}{S_c} + \frac{\nu_t}{S_{ct}}\right)\nabla \tilde{Y}_F^{AI}\right) + (1-\tilde{c})\bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_c^{AI}\left(c_{ai}\right)\tilde{Y}_{TF} \tag{2.70}$$

dans laquelle ν et S_c sont respectivement la viscosité laminaire et le nombre de Schmidt, alors que ν_t et S_{c_t} sont respectivement la viscosité turbulente et le nombre de Schmidt turbulent.

L'évolution de la variable $\tilde{Y}_F^u$ est obtenue par une équation de transport :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{Y}_F^{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{Y}_F^{u}\right) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\left(\frac{\nu}{S_c} + \frac{\hat{\nu}_t}{S_{ct}}\right)\nabla \tilde{Y}_F\right) - \left(\rho^u S_l \bar{\Sigma} - (1-\tilde{c})\bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_c^{AI}\left(c_{ai}\right)\right)\tilde{Y}_{TF} \tag{2.71}$$

Enfin les équations des espèces chimiques intègrent également les taux de réactions liés à l'AI sous la forme :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{Y}_i}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{Y}_i\right) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\left(\frac{\nu}{S_c} + \frac{\hat{\nu}_t}{S_{ct}}\right)\nabla \tilde{Y}_i\right) \tag{2.72}$$

$$+\left(\rho^u S_l \bar{\Sigma} + (1-\tilde{c})\bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_c^{AI}\left(c_{ai}\right)\right)\left(\tilde{Y}_{TF}\frac{\nu_i W_i}{\nu_F W_F}\right) \tag{2.73}$$

où ν_i et W_i représentent respectivement le coefficient stoechiométrique et la masse molaire de l'espèce i.

En pratique, l'interpolation de $\tilde{\dot{\omega}}_c^{AI}$ dans la table n'est pas effectuée dès le début du calcul, mais uniquement au bout d'un délai τ_c^{AI} qui correspond au temps pour que la valeur de la variable d'avancement c_{AI} atteigne au moins la première valeur de la table. Cette valeur seuil est alors notée c^* et trois étapes sont nécessaires pour lancer le processus d'interpolation dans la table :

✓ Un intermédiaire réactionnel (IR) est introduit, et l'évolution de ce précurseur est modélisée par l'équation :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{Y}_{IR}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{Y}_{IR}\right) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\left(\frac{\nu}{S_c}\frac{\nu_t}{S_{ct}}\right)\nabla \tilde{Y}_{IR}\right) + \bar{\rho}\tilde{Y}_{TF}\frac{1}{\tau_c^{AI}} \tag{2.74}$$



Durant tout le suivi de cet intermédiaire réactionnel, le délai d'AI n'est pas atteint. Le taux de réaction de la variable d'avancement $\tilde{\dot{\omega}}_c^{AI}$ ainsi que la variance d'avancement c_{ai} sont égaux à zéro.

✓ Dès que la fraction massique de l'intermédiaire réactionnel $\tilde{Y}_{IR}$ atteint la fraction massique de traceur de carburant $\tilde{Y}_{TF}$, le taux de réaction $\tilde{\dot{\omega}}_c^{AI}$ est alors calculé de la manière suivante :

$$\tilde{\dot{\omega}}_c^{AI} = -\frac{c^*}{\tau^*} \tag{2.75}$$

où τ^* est un paramètre de l'ordre de quelques pas de temps permettant de tendre rapidement vers la variable de progrès c^*.

✓ A partir de cet instant, $c^{AI} = c^*$, $\tilde{\dot{\omega}}_c^{AI}$ est alors directement interpolé dans la table TKI jusqu'à la fin du calcul.

Un nouveau couplage mis en place dans cette thèse est présenté à la section 3.1.1. Deux raisons nous ont poussé à apporter des modifications à la version présentée ci-dessus :

✓ la variable c_{ai} définie à l'équation 2.69 dépend de la fraction massique de carburant brûlée en FP. Ainsi proche du front de flamme, la fraction massique $\tilde{Y}_F^{FP}$ augmente, faisant augmenter artificiellement la valeur de c_{ai}. L'interpolation dans la table TKI est alors effectuée à partir d'une valeur de c_{ai} erronée, ce qui a pour conséquence de favoriser les départs en AI proche du front de flamme ;

✓ ce nouveau couplage permet également de supprimer l'intermédiaire réactionnel permettant de simplifier et de rendre plus précis le modèle.



2.5 Le modèle d'allumage Imposed Stretch Spark Ignition Model (ISSIM-LES)

Pour représenter le fonctionnement d'un moteur essence, l'allumage du mélange air-carburant doit être simulé. En réalité, l'allumage est réalisé à l'aide de systèmes inductifs permettant de générer une étincelle dans la chambre de combustion. La vie de cette étincelle se décompose en trois phases :

- ✓ la phase de claquage
- ✓ la phase de création d'un arc électrique
- ✓ la phase d'initiation de la combustion du mélange

Pour représenter l'ensemble de ces phénomènes, le modèle choisi dans cette thèse est le modèle ISSIM-LES [28]. La modélisation numérique se décompose en deux phases qui font l'objet des deux paragraphes suivants :

- ✓ Le dépôt d'un noyau initial de gaz brûlés : le circuit électrique aboutissant au claquage de la bougie est modélisé, permettant ainsi de connaître la masse et le volume de gaz brûlés à déposer au moment de l'allumage.
- ✓ La croissance du noyau initial, et la transition vers le modèle de combustion ECFM-LES

2.5.1 Modélisation du noyau initial de gaz brûlés

Lors de l'allumage dans un moteur automobile à l'instant t_{spark}, un arc électrique est initié entre les électrodes de la bougie. Le modèle ISSIM-LES permet de suivre à partir de ce moment-là et grâce à de la modélisation 0D, la puissance électrique et l'énergie fournie au gaz environnant à chaque instant. Une énergie critique d'allumage $E_c(t)$ est également déterminée par ce modèle, et correspond à l'instant où l'énergie déposée dans les gaz frais est suffisante pour que la combustion débute.

Lorsque $E(t_{ign}) > E_c(t_{ign})$, le moment de l'allumage t_{ign} est alors connu. La masse de gaz brûlés m_b^{ign} (de volume V_{ign}) créée dans la chambre est alors estimée dans le voisinage de la bougie, à partir de l'épaisseur de flamme laminaire δ_L et de la longueur de l'arc électrique l_{spark} :

$$m_b^{ign} = \left\langle \rho^u l_{spark} 4\pi \delta_L^2 \right\rangle \tag{2.76}$$

Pour s'assurer de la bonne résolution de la flamme sur le maillage, la sphère de gaz brûlés est filtrée à l'échelle du filtre de combustion $\hat{\Delta}$, et déposée sur un rayon r_b^{ign} (supérieur au rayon initial réel de la flamme) défini comme :

$$r_b^{ign} = \left(\frac{3}{4\pi} \int \bar{c}_{ign} dV \right)^{1/3} \tag{2.77}$$

Le profil gaussien de fraction volumique initiale $\bar{c}_{ign}$ est déposé au niveau de la bougie sous la forme :

$$\bar{c}_{ign} = C_0 exp\left(- \left(\frac{|x - x_{spkplg}|}{0.6\hat{\Delta}} \right)^2 \right) \tag{2.78}$$



avec x_{spkplg}, la position de la bougie, et C_0 est une constante garantissant l'égalité suivante :

$$\int \bar{c}_{ign} dV = V_b^{ign} = \frac{4}{3}\pi (r_b^{ign})^3 \tag{2.79}$$

Le taux de réaction $\bar{\dot{\omega}}_c$ présent dans l'équation des espèces doit prendre en compte l'allumage. Il est ainsi modifié pour imposer la valeur $\bar{c}_{ign}(x, t_{ign})$ dans la chambre de combustion :

$$\bar{\dot{\omega}}_c = max\left(\rho^u S_l \bar{\Sigma}_{\tilde{c}}, \rho_b \frac{(\bar{c}_{ign} - \bar{c})}{dt}\right) \tag{2.80}$$

avec dt le pas de temps de la simulation.
Un terme source est également ajouté dans l'équation de la FSD. Ce terme lié à l'allumage est défini comme :

$$\bar{\dot{\omega}}_\Sigma^{ign} = max\left(0, \frac{\Sigma_{ign} - \bar{\Sigma}_{\tilde{c}}}{dt}\right) \tag{2.81}$$

avec Σ_{ign} égal à $\dfrac{3\bar{c}}{r_b^{ign}}$, permettant de retrouver la surface initiale de la sphère déposée :

$$\int \Sigma_{ign} dV = \int 3(r_b^{ign})^{-1} \bar{c}_{ign} dV = 3(r_b^{ign})^{-1} \frac{4}{3}\Pi (r_b^{ign})^3 = 4\Pi (r_b^{ign})^2 \tag{2.82}$$

Il est important de noter que cette phase de dépôt du noyau est extrêmement courte (de l'ordre de quelques itérations) et le modèle développé dans la partie suivante assure de suite la croissance du noyau.

2.5.2 Croissance du noyau et propagation de la flamme

Contrairement au modèle AKTIMeuler [32], la croissance du noyau et la transition vers le modèle de combustion est directement intégrée au modèle ECFM-LES.

Immédiatement après le dépôt du noyau, le rayon réel de la flamme r_b est plus petit que la taille des mailles. La création de densité de surface de flamme par ce noyau se passe donc en sous-maille et doit être prise en compte.

Dans l'équation 2.52, les termes $C_{res} + S_{res}$ représentent la création de FSD par la courbure et l'étirement résolus, alors que les termes $S_{sgs} + C_{sgs}$ représentent la création de FSD par l'étirement turbulent.
Un terme de création de FSD pour la courbure SGS (proportionnel à $2r_b^{-1}$) est donc ajouté à l'équation 2.52, qui devient :

$$\frac{\partial \overline{\Sigma}}{\partial t} = T_{res} + T_{sgs} + S_{sgs} + \alpha C_{sgs} - \nabla \cdot (\alpha S_d \mathbf{N} \overline{\Sigma}) + \alpha (C_{res} + S_{res}) \tag{2.83}$$

$$+ (1-\alpha) \underbrace{\frac{2}{r_b}(1+\tau)\Xi S_l \overline{\Sigma} + \bar{\dot{\omega}}_\Sigma^{ign}}_{Terme\ d'allumage} \tag{2.84}$$



avec T_{res}, T_{sgs}, S_{res}, S_{sgs}, C_{res} et C_{sgs} qui sont les termes respectivement de transport résolu et sous-maille, d'étirement résolu et sous-maille et de courbure résolue et sous-maille définis dans l'équation 2.52.

Un coefficient de pondération $\alpha(x,t)$ a été ajouté, permettant d'assurer la transition naturelle entre le modèle d'allumage et le modèle de propagation de flamme. Il s'exprime sous la forme :

$$\alpha(x,t) = \frac{1}{2}\left(1 + tanh\left(\frac{r_b^+ - 1.0}{0.015}\right)\right), r_b^+ = \frac{r_b}{0.65\hat{\Delta}} \tag{2.85}$$

Le coefficient de pondération α reste donc proche de 0 durant l'allumage, permettant d'annuler les termes résolus $-\nabla.(S_d\mathbf{N}\overline{\Sigma}) + C_{res} + S_{res}$ de l'équation 2.84. Cette contribution est alors remplacée par l'expression analytique exacte :

$$S_{ign} = \frac{2}{r_b}(1+\tau)\Xi S_l\overline{\Sigma} \tag{2.86}$$

Lorsque l'allumage est terminé, le coefficient α est égal à 1. A cet instant, la valeur de r_b^+ est proche de l'unité, et la taille du rayon réel r_b est donc de l'ordre de grandeur de la taille du filtre de la combustion $\hat{\Delta}$. Le terme lié à l'allumage s'annule dans l'équation 2.84, et le modèle ECFM-LES assure la propagation de la flamme.

D'après l'équation 2.85, le calcul de l'évolution du paramètre α implique de déterminer le rayon réel r_b des gaz brûlés. L'expression utilisée pour le modèle AKTIMeuler est la suivante :

$$r_b^{Vol}(t) = \left(\frac{3}{4\pi}\int \bar{c}(x,t)dV\right)^{1/3} \tag{2.87}$$

Cependant, cette expression attribue le volume total de gaz brûlés à un seul noyau de flamme, il n'est donc pas possible de réaliser des calculs avec plusieurs allumages.
Une variable Ψ est définie par :

$$\bar{\rho}\Psi = \bar{\rho}\tilde{c}2r_b^{-1} = \frac{2}{3}\rho_b\Sigma_{ign} \tag{2.88}$$

Le calcul de Ψ permet de déterminer un rayon de gaz brûlés r_b en tout point du maillage. Ce dernier intervient de plus dans l'Eq. 2.85, et il est ainsi possible de déterminer une valeur locale du paramètre de transition α. Plusieurs allumages simultanés peuvent alors être simulés, mais il est également possible de transitionner plus ou moins rapidement vers le modèle ECFM-LES selon les conditions locales.
Cependant, dériver une équation exacte nécessiterait la modélisation de termes complexes, la variable Ψ est issue de l'équation de transport suivante :

$$\bar{\rho}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\nabla.(\bar{\rho}\tilde{u}\Psi) + \nabla.(\sigma_c\frac{\hat{\nu}_t}{S_{ct}}\nabla\Psi) - (1+\tau)\Xi\frac{S_l}{r_b}\bar{\rho}\Psi + \frac{2}{r_b}\bar{\dot{\omega}}_c + \bar{\dot{\omega}}_\Psi^{ign} \tag{2.89}$$

Les équations 2.86 et 2.89 intègrent dans leur calcul le facteur de plissement Ξ qui doit être estimé. Dans le cas d'une flamme totalement résolue, il est donné par la formule

$$\Xi = \bar{\Sigma}|\nabla\bar{c}|^{-1} = \left(\bar{\Sigma}_{\tilde{c}} - \nabla.((\bar{c}-\tilde{c})N)\right)|\nabla\bar{c}|^{-1} \tag{2.90}$$



Lors de l'allumage, le noyau de flamme débute sa croissance en sous-maille avant d'être résolu, il est donc nécessaire de modéliser l'évolution de ce plissement durant les premiers instants. En considérant en première approximation que la turbulence est faible et que le plissement du noyau est limité après l'allumage, $\Xi = 1$ a été choisi. Cependant, le plissement Ξ intervient dès les premiers instants après l'allumage, et une petite erreur de modélisation à ce stade aura des répercussions sur tout le déroulement de la combustion qui suit. Pour lever cette hypothèse, une expression du plissement a été mise en place au cours de cette thèse par analogie avec les calculs RANS, et est présentée au §3.1.2.

Pour finir, un terme source $\bar{\dot{\omega}}_{\Psi}^{ign}$ doit être mis en place et s'exprime ainsi :

$$\bar{\dot{\omega}}_{\Psi}^{ign} = max\left(0, \frac{2/3\rho_b\Sigma_{ign} - \bar{\rho}\Psi}{dt}\right) \tag{2.91}$$





CHAPITRE

3

Développements d'outils et de méthodologies pour l'étude des combustions anormales

L'objectif de cette thèse est de mener une étude numérique des combustions anormales en moteur automobile, et de démontrer la capacité de la LES à décrire ces phénomènes pour aboutir à une meilleure compréhension de leurs causes. Ces travaux s'inscrivent dans la continuité des développements effectués depuis de nombreuses années, et la contribution apportée aux modèles numériques au cours de cette thèse est décrite dans une première partie de ce chapitre.
De plus, les études LES précédentes en configuration moteur comme SGEMAC [36, 50] ont utilisé des configurations numériques relativement simples, avec pour objectif de trouver un compromis acceptable entre robustesse et temps de calcul. En effet, l'étude numérique d'un moteur nécessite de simuler de nombreux cycles consécutifs, il est donc primordial de limiter le temps de calcul de chaque cycle. Cependant, prédire l'apparition des combustions anormales nécessite des méthodes de résolution précises, tant au niveau de la prédiction du mélange, que des stratifications en température. Une étude a donc été menée conjointement entre IFPEN et le CERFACS pour évaluer l'utilisation de schémas numériques d'ordre élevés (TTGC et TTG4A), ainsi que l'influence des modèles de sous-maille (Smagorinsky, Smagorinsky dynamique et Sigma) pour la LES des MAC. Les résultats de ces travaux ont fait l'objet d'une présentation à la conférence LES4ICE les 29-30 Novembre 2012, et sont détaillés dans une deuxième partie sous la forme d'un article publié dans la revue Oil & Gas Science and Technology - Revue d'IFP Energies nouvelles [92].
Dans une dernière partie, les différents post-traitements spécifiques mis en place pour l'étude des combustions anormales et de l'acoustique interne en moteur automobile sont présentés.



3.1 Contribution au développement des modèles ECFM-LES, TKI-LES et ISSIM-LES

3.1.1 Dissociation des phénomènes d'AI et de flamme de prémélange grâce au découplage total des variables d'avancement.

Lecocq et al. [81] ont réalisé une première simulation LES du cliquetis et du préallumage à l'aide du logiciel AVBP et des modèles ECFM-LES et TKI-LES. Pour rappel, ces modèles utilisent deux variables d'avancement pour suivre d'une part l'avancement global $\tilde{c}$ (prenant en compte l'AI et la flamme de prémélange, FP), mais également l'avancement de l'auto-inflammation $\tilde{c}_{ai}$. Ces deux variables s'expriment alors :

$$\tilde{c} = 1 - \frac{\tilde{Y}_F}{\tilde{Y}_{TF}} \tag{3.1}$$

$$\tilde{c}_{ai} = \frac{\tilde{Y}_F^{AI}}{\tilde{Y}_F^{AI} + \tilde{Y}_F} \tag{3.2}$$

Cependant, lorsque le carburant est consommé par la FP dans une cellule, le facteur $\tilde{Y}_F$ diminue et entraîne une augmentation de la variable $\tilde{c}_{ai}$. Ce couplage induit une dépendance entre les deux variables d'avancement, et aboutit à des départs en AI artificiellement forcés à proximité du front de flamme (Fig. 3.1). Cette formulation utilisée par Lecocq & al. [81] ne découple donc pas totalement les phénomènes de FP et d'AI, et ne permet donc pas de capturer finement les phénomènes d'AI qui ne se déclenchent pas toujours au contact de la FP.

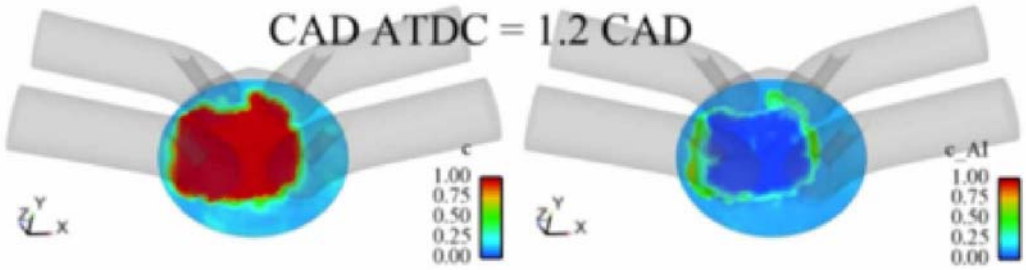


FIG. 3.1: Illustration d'un départ en AI forcé à proximité du front de flamme en utilisant une formulation des modèles avec des avancements pas totalement indépendants [79].

Une nouvelle formulation du couplage entre ces deux modèles est proposée ici. La répartition de l'état des gaz dans chaque cellule s'effectue toujours en fonction de la variable d'avancement globale $\tilde{c}$ qui vaut 0 dans les gaz frais et 1 dans les gaz brûlés. $\tilde{c}$ reste définie par l'équation 3.1, et on peut donc décomposer toute grandeur filtrée $\tilde{\phi}$ ainsi :

$$\tilde{\phi} = (1 - \tilde{c})\phi|^u + \tilde{c}\phi|^b \tag{3.3}$$



où $\phi|^u$ et $\phi|^b$ correspondent respectivement à l'état des gaz qui sont frais ou brûlés.

En introduisant la notion d'auto-inflammation, la variable d'avancement $\tilde{c}$ est divisée en une première partie représentant l'avancement de la FP ($\tilde{c}_\Sigma$), et une seconde pour la prise en compte de l'AI ($\tilde{c}_{ai}$). La décomposition de l'état des gaz dans chaque cellule en fonction de la nouvelle variable d'avancement $\tilde{c}_\Sigma$ est représentée par la première ligne "ai/b states" de la Fig. 3.2, et s'exprime :

$$\tilde{\phi} = (1 - \tilde{c}_\Sigma)\phi|^{ai} + \tilde{c}_\Sigma \phi|^b \tag{3.4}$$

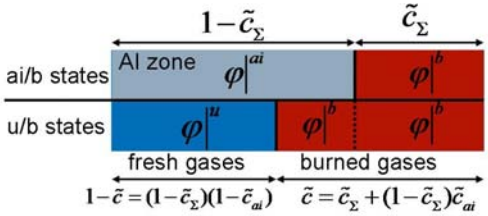


FIG. 3.2: Représentation schématique de la décomposition de l'état des gaz dans chaque cellule

Les gaz représentés par $\phi|^{ai}$ (Eq. 3.4) correspondent alors aux gaz frais de chaque cellule non consommés par la flamme de prémélange, mais disponibles pour l'AI. On peut alors décomposer ces gaz frais en une partie brûlée par l'AI et une partie non consommée ni par l'AI, ni par la FP.

$$\phi|^{ai} = (1 - \tilde{c}_{ai})\phi|^u + \tilde{c}_{ai}\phi|^b \tag{3.5}$$

Cette deuxième décomposition est représentée par la ligne "u/b states" de la Fig. 3.2. En intégrant l'Eq. 3.5 dans l'Eq. 3.4, sachant que $\phi = \tilde{c}$, $\phi|^u = \tilde{c}|^u = 0$ et $\phi|^b = \tilde{c}|^b = 1$, une relation entre les 3 variables de progrès $\tilde{c}$, $\tilde{c}_\Sigma$ et $\tilde{c}_{ai}$ est déduite :

$$1 - \tilde{c} = (1 - \tilde{c}_{ai})(1 - \tilde{c}_\Sigma) \tag{3.6}$$

A ce stade, il a été décidé de manière arbitraire de déterminer $\tilde{c}$ et $\tilde{c}_{ai}$ à partir de leur équation de transport, et d'en déduire la variable d'avancement $\tilde{c}_\Sigma$.

Calcul des variables d'avancement $\tilde{c}$ et $\tilde{c}_{ai}$:
Le calcul de l'avancement global $\tilde{c}$ (donné par l'Eq. 3.1) nécessite de déterminer la fraction massique $\tilde{Y}_F^u$ de gaz frais, ainsi que celle du traceur de carburant dans les gaz frais $\tilde{Y}_{TF}$.

Ces deux fractions massiques sont issues d'une équation de transport du type :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{\phi}}{\partial t} = -\nabla.\left(\bar{\rho}\widetilde{\mathbf{u}}\widetilde{\phi}\right) + \nabla.\left(\bar{\rho}\left(\nu + \widehat{\nu}_t\right)\nabla\widetilde{\phi}\right) + \bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_\phi \tag{3.7}$$

$\bar{\rho}$ et $\widetilde{\mathbf{u}}$ représentent la densité filtrée, la vitesse, alors que ν est la viscosité cinématique et $\widehat{\nu}_t$ la viscosité turbulente filtrée à la taille du filtre de combustion $\widehat{\Delta}$.

Le traceur de carburant étant un scalaire passif, le taux de réaction $\tilde{\dot{\omega}}_{\tilde{Y}_{TF}}$ est nul, alors que le taux de réaction $\tilde{\dot{\omega}}_{\tilde{Y}_F^u}$ est obtenu à partir de l'équation 3.6 et s'écrit :

$$\tilde{\dot{\omega}}_{\tilde{Y}_F^u} = -\tilde{Y}_{TF}((1-\tilde{c}_{ai})(\dot{\omega}_c^{\Sigma} + \dot{\omega}_c^{ign}) + (1-\tilde{c}_{\Sigma})\dot{\omega}_c^{ai}) \tag{3.8}$$

Dans l'expression précédente, $\dot{\omega}_c^{\Sigma}$ est le terme source standard du modèle ECFM-LES :

$$\dot{\omega}_c^{\Sigma} = \rho_u S_l \bar{\Sigma} \tag{3.9}$$

et $\dot{\omega}_c^{ign}$ représente le taux de réaction lié à l'allumage par bougie [28] :

$$\dot{\omega}_c^{ign} = \rho_b max(0, \bar{c}_{ign} - \bar{c}_{\Sigma})dt^{-1} \tag{3.10}$$

avec ρ_b la densité des gaz brûlés et $\bar{c}_{ign}$ le profil gaussien initial de la variable $\bar{c}_{\Sigma}$ correspondant au dépôt de gaz brûlés par le modèle d'allumage ISSIM-LES.

Pour finir, le terme source lié à l'AI $\dot{\omega}_c^{ai}$ est issu du modèle TKI décrit au §2.4.2. Cette grandeur est lue dans une table en fonction de la température des gaz frais $\tilde{T}_u$, de la pression P, de la richesse locale ϕ, de la dilution et de la variable d'avancement $\tilde{c}_{AI}$. Contrairement aux formulations précédentes de TKI-LES [25, 70, 81], cette variable d'avancement pour l'auto-inflammation est maintenant exprimée de façon totalement indépendante de la combustion en flamme propagative sous la forme :

$$\tilde{c}_{AI} = \frac{\tilde{Y}_F^{AI}}{\tilde{Y}_{TF}} \tag{3.11}$$

avec $\tilde{Y}_F^{AI}$ la fraction massique de carburant brûlée en AI, et $\tilde{Y}_{TF}$ celle du traceur de carburant présent dans les gaz frais. De la même manière que la fraction massique $\tilde{Y}_F^u$, $\tilde{Y}_F^{AI}$ est déterminé grâce à une équation de transport (Eq. 3.7), et son taux de réaction $\tilde{\dot{\omega}}_{\tilde{Y}_F^{AI}}$ est calculé ainsi :

$$\tilde{\dot{\omega}}_{\tilde{Y}_F^{AI}} = \tilde{Y}_{TF}\dot{\omega}_{c^{AI}} \tag{3.12}$$

Dans la version de précédente de TKI, le fait que les deux variables d'avancement ne soient pas totalement découplées nécessitait d'utiliser un intermédiaire réactionnel $\tilde{Y}_{IR}$ pour déterminer le délai d'AI. Cette nouvelle variable indépendante n'est à présent plus nécessaire car l'intégralité du déroulement de l'AI est donné par la fraction massique $\tilde{Y}_F^{AI}$ calculée grâce à la variable d'avancement $\tilde{c}_{AI}$ qui représente complètement le processus d'AI. Ainsi, les tables TKI restent inchangées et les valeurs $\tilde{\omega}_{c_{AI}}$ sont simplement interpolées dans la table dès le début du calcul.

Calcul de la variable d'avancement $\tilde{c}_{\Sigma}$ liée à la flamme de prémélange

Une fois les variables $\tilde{c}$ et $\tilde{c}_{ai}$ connues, l'avancement lié à la flamme de prémélange est alors déduit grâce à l'expression :

$$\tilde{c}_{\Sigma} = \frac{\tilde{c} - \tilde{c}_{AI}}{1 - \tilde{c}_{AI}} \tag{3.13}$$



3.1.2 Modification des termes liés à la densité de surface de flamme

L'équation de la FSD couplée au modèle ISSIM-LES est présentée au §2.4.1.2. Cependant la nouvelle décomposition mise en place induit de remplacer dans cette équation les variables $\tilde{c}$ par $\tilde{c}_\Sigma$ et $\bar{c}$ par $\bar{c}_\Sigma$.

De plus, si on s'intéresse au terme S_{ign}, ce dernier est modélisé par l'expression de l'étirement d'une flamme sphérique, qui est à la base du modèle ISSIM-LES : $S_{ign} = 2r_b^{-1}(1+\tau)\Xi S_l$, et dans laquelle le facteur de plissement de sous-maille Ξ doit être modélisé. Jusqu'à présent, $\Xi = 1$ est utilisé [28], ce qui est justifié par le fait que le noyau de flamme créé initialement est laminaire, et le plissement par la turbulence n'intervient que progressivement au cours du temps. Cependant pour supprimer cette hypothèse qui entraîne tout de même une sous-estimation des effets de la turbulence sur la croissance initiale du noyau, une expression pour le calcul du plissement a été mise en place dans le modèle. Ainsi, en considérant que le noyau initial est sphérique, la densité de surface $\bar{\Sigma}$ peut être estimée à partir de l'expression :

$$\bar{\Sigma} = \frac{S_b}{V_b}\frac{V_b}{V} = \frac{3}{r_b}\Xi\bar{c}_\Sigma \tag{3.14}$$

avec r_b, S_b et V_b respectivement le rayon, la surface et le volume du noyau sphérique de gaz brûlés.

On peut alors en déduire une expression pour le plissement Ξ qui est introduite dans l'expression du terme S_{ign} :

$$S_{ign} = \frac{2}{3}\frac{1+\tau}{\bar{c}_\Sigma}S_l\bar{\Sigma} \tag{3.15}$$

On remarque que S_{ign} est maintenant proportionnel à $(1+\tau)/\bar{c}_\Sigma \propto 1/\tilde{c}_\Sigma$ alors que la contribution du terme de courbure C_{sgs} (lorsque $\bar{c}_\Sigma < c^*$) est proportionnelle à $1/\bar{c}_\Sigma$ dans l'expression :

$$C_{sgs} = \beta S_l \frac{c^* - \bar{c}}{\bar{c}(1-\bar{c})}(\overline{\Sigma} - \overline{\Sigma}_{lam})\overline{\Sigma} \tag{3.16}$$

Or, S_{ign} et C_{sgs} décrivent le même terme de courbure de sous-maille, mais le premier est utilisé lors de l'allumage et le second durant la propagation de la flamme après l'allumage. Pour rendre leurs expressions cohérentes, le terme C_{sgs} a été modifié en se basant sur une expression utilisée en RANS [23] :

$$C_{sgs} = \left(\frac{2}{3}\frac{1+\tau}{\bar{c}_\Sigma} - \frac{\beta}{(1-\bar{c}_\Sigma)}\right) S_l\left(\bar{\Sigma} - \bar{\Sigma}_{lam}\right)\bar{\Sigma} \tag{3.17}$$

3.1.3 Cas tests de validation

Les modèles ECFM-LES, TKI-LES et ISSIM-LES ont été largement validés dans le passé [25, 118], et leur couplage a également été testé en RANS [24] comme en LES [81]. De plus, les modifications induites par les nouvelles variables d'avancement totalement découplées n'influencent en réalité que les cellules dans lesquelles l'auto-inflammation et la flamme de prémélange cohabitent. Ces régions ne représentent certes qu'un faible volume de la chambre de combustion, mais elles ne doivent pas être négligées. En effet, elles favorisent des départs en auto-inflammation non physiques proches du front de flamme comme c'était le cas dans la formulation précédente du couplage.
Les validations antérieures des modèles restent néanmoins pertinentes pour cette nouvelle approche, qui



est testée ici en comparaison avec des résultats de chimie complexe dans un réacteur homogène à volume variable (Fig. 3.3) dont les caractéristiques sont rappelées dans le tableau 3.1.

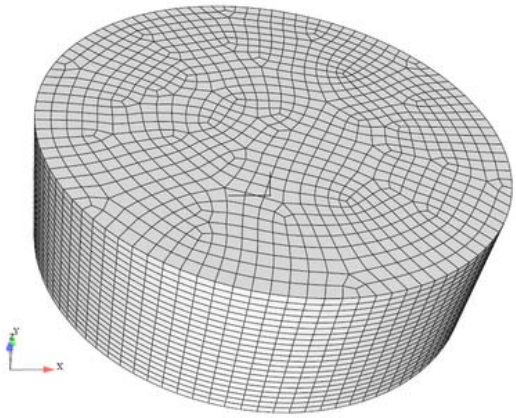


FIG. 3.3: Configuration d'étude simulée en LES.

Alésage x Course mm	86 x 82
Longueur de bielle mm	137
Taux de compression	6.32
Régime tr/min	1200
Richesse	1
Type d'élements	hexaèdres
Nombre de cellules	18837
Condition limite aux parois	Adiabatique

TAB. 3.1: Caractéristiques de la configuration choisie pour valider les modifications apportées sur le couplage entre les différents modèles.

3.1.3.1 Validation du modèle TKI-LES par rapport à des résultats en chimie complexe

Une première validation des développements est menée dans un cas homogène en auto-inflammation pure, permettant d'éprouver le modèle TKI-LES seul.
Pour comparaison avec les résultats LES, des calculs en chimie complexe sont réalisés dans un réacteur homogène à volume variable en utilisant le logiciel CLOE [135] de l'IFPEN. Ce dernier est un solveur de cinétique chimique basé sur un schéma implicite DVODE [15], et reprenant le formalisme Chemkin [69] pour les schémas cinétiques.
Dans cette étude, un schéma cinétique IDETHANOL contenant 560 espèces et 3000 réactions [5] est utilisé dans CLOE, mais également pour générer la table TKI en utilisant comme carburant modèle de l'essence un Toluene Reference Fuel (TRF) composé de 42.8% d'isooctane, 13.7% de n-heptane et 43.5% de Toluene [102].



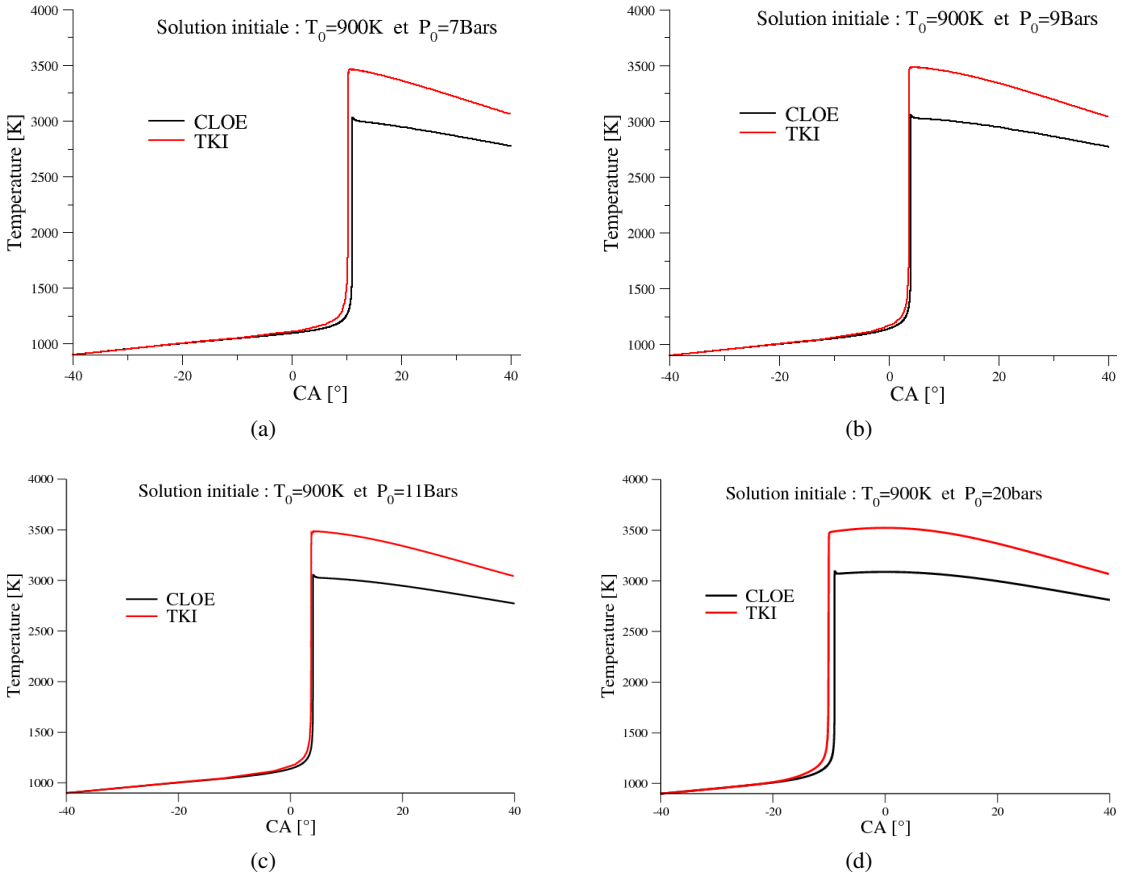
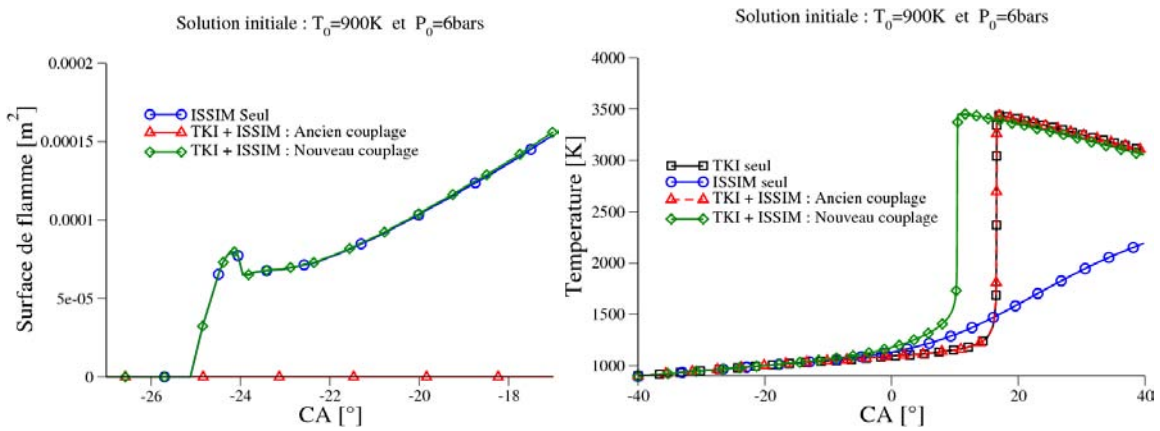


FIG. 3.4: Comparaison de l'évolution de la température dans réacteur homogène à volume variable entre AVBP et CLOE.

La figure 3.4 présente l'évolution de la température au cours du temps pour différentes conditions initiales en pression entre $P_0 = 7$ bars et $P_0 = 20$ bars. Malgré la forte variation de conditions thermodynamiques, on remarque une bonne adéquation entre les résultats de chimie complexe et ceux issus du couplage entre ECFM-LES et TKI-LES. La LES prédit bien le délai d'AI, permettant une première validation de la nouvelle méthode de couplage proposée dans cette thèse.
On remarque cependant qu'une fois l'AI déclenchée, la température est surestimée par la LES. En effet, la chimie à une étape utilisée par le modèle ECFM-LES ne tient pas compte de l'espèce CO. La chaleur dissipée lors de sa formation puis sa recombinaison en CO_2 n'est donc pas prise en compte et explique la surestimation d'environ 500 K de la température finale. Même si elles n'ont pas été utilisées ici pour simplifier les calculs, des solutions existent pour résoudre ce problème. Une extension a été proposée par Lecocq & al. [80] et permet de prendre en compte la formation de CO durant la combustion en remplaçant la chimie simplifiée par une tabulation des états d'équilibres. De plus, lors de la détente, la composition CO/CO_2 ne suit pas toujours l'état d'équilibre, et un modèle de relaxation [12] peut être ajouté à l'approche CFM pour bien prendre en compte cette évolution.

3.1.3.2 Validation dans un cas faisant intervenir l'ensemble des modèles ECFM-LES, TKI-LES et ISSIM-LES

L'objectif est ici de valider le couplage entre l'ensemble des modèles ECFM-LES, TKI-LES et ISSIM-LES. La configuration précédente (Fig. 3.3 et Tab. 3.1) est réutilisée, avec comme conditions initiales : $P_0 = 6$ bars et $T_0 = 900$ K. Contrairement à la partie 3.1.3.1, cette configuration est maintenant simulée avec prise en compte d'un allumage par bougie à -25°V avant le PMH. Pour bien dissocier l'influence des différents modèles, il est de plus possible d'activer ou désactiver le modèles TKI-LES pour simuler un allumage seul ou conjointement avec prise en compte de l'auto-inflammation.



(a) Surface de flamme

(b) Température

FIG. 3.5: Comparaison de l'évolution de la surface de flamme (3.5a) et de la température (3.5b) d'un réacteur homogène à volume variable avec ou sans allumage commandé, et en comparant les résultats de l'ancienne version du couplage à ceux issus du couplage proposé dans cette thèse.

L'objectif est de s'assurer que la croissance de la surface de flamme n'est plus impactée par l'activation ou non du modèle TKI-LES. En effet, la mise en place des avancements découplés doit permettre d'obtenir la même surface de flamme dans le cas d'un allumage pur ou d'un calcul prenant en compte l'allumage et l'auto-inflammation tant que le délai n'est pas atteint.
La figure 3.5a représente l'évolution de la surface de flamme durant les premiers instants après l'allumage. En utilisant l'ancienne version du couplage et lorsque tous les modèles sont activés (ligne rouge), la surface de flamme reste nulle et aucune flamme ne se développe malgré l'allumage à -25°V avant le PMH. Cependant, si on compare une simulation avec un allumage seul (ligne bleu) à un calcul avec la nouvelle version du couplage (ligne verte), les surfaces de flamme sont parfaitement similaires au moment de l'allumage et pendant plusieurs degrés vilebrequin. Ceci met bien en évidence l'effet de l'utilisation des avancements parfaitement découplés qui assure une indépendance de la croissance de la flamme par rapport à l'activation ou non du modèle TKI-LES tant que l'auto-inflammation n'a pas débuté.
Ceci est confirmé par la figure 3.5b qui représente l'évolution de la température pour les différents cas. On retrouve le résultat avec le modèle TKI branché uniquement (ligne noire), et le calcul avec l'ancienne méthode de couplage et les modèles TKI-LES et ISSIM-LES activés (ligne rouge). Aucune différence

sur la température n'est observée, ce qui confirme le fait qu'aucun allumage n'a lieu dans cette simulation même si le modèle ISSIM-LES est branché.
La température pour une simulation avec seulement un allumage par bougie (ligne bleu) est également présentée sur le graphique, et on remarque une évolution plus progressive de la température (due à la croissance de la flamme) par rapport à l'évolution en AI pure durant laquelle les gaz frais s'auto-inflamment en masse (ligne rouge). De plus, si on effectue la même simulation avec l'ensemble des modèles ECFM-LES, ISSIM-LES et TKI-LES (ligne bleu) et des avancements parfaitement découplés, on remarque qu'avant même le PMH, la température augmente comme dans le cas d'un allumage seul. Ceci prouve à nouveau que l'AI n'influence pas l'allumage et le développement d'une flamme initiée par la bougie. La propagation de la flamme de prémélange fait alors chuter les délais, et l'AI se déclenche à présent vers 9°V après le PMH alors que sans allumage par la bougie, l'AI en masse des gaz frais n'intervient que vers 17°V après le PMH (ligne noire).

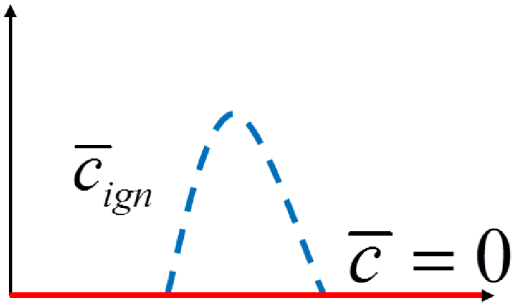
Cette influence de la méthode de couplage est issue du calcul du terme $\dot{\omega}_c^{ign}$ qui s'exprimait sans découplage des variables d'avancements en fonction de la variable $\bar{c}$:

$$\dot{\omega}_c^{ign} = \rho_b max(0, \bar{c}_{ign} - \bar{c}) dt^{-1} \tag{3.18}$$

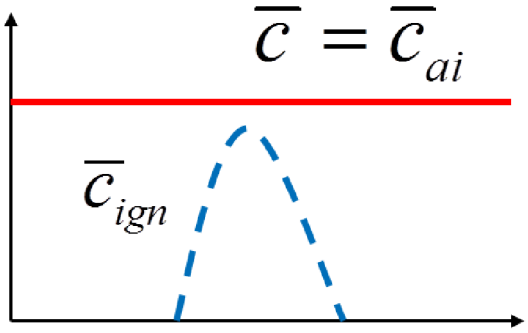
En utilisant cette expression et sans AI (Fig. 3.6a), l'allumage se déroule correctement. Cependant, lorsque l'avancement en AI $\bar{c}_{ai}$ devient non nul, l'avancement global $\bar{c} = \bar{c}_{ai}$ peut alors être supérieur à la valeur maximale $\bar{c}_{ign}$ correspondante aux GB déposés par le modèle ISSIM-LES. Dans ce cas, $\dot{\omega}_c^{ign}$ reste nul, et aucun allumage n'est possible. C'est précisément le cas sur la figure 3.5 (courbes rouges), la configuration simulée étant homogène, le terme d'allumage est nul en tout point de cette configuration. Le calcul correspond donc à un cas en AI pure.
A présent, grâce à la prise en compte des avancements découplés, le nouveau terme d'allumage présenté à l'Eq. 3.10 est calculé à partir de la variable d'avancement liée à la flamme de prémélange $\bar{c}_\Sigma$. Lorsque $\bar{c}_{ai} > \bar{c}_{ign}$ (Fig. 3.6c), la variable d'avancement $\bar{c}_\Sigma$ reste à présent nulle et l'allumage peut avoir lieu indépendamment du l'AI.

Ces cas-tests permettent ainsi de valider la mise en place du nouveau couplage entre les différents modèles, et de mettre en évidence que les avancements totalement découplés permettent de bien capturer les phénomènes d'AI qu'ils interviennent seuls dans le moteur, mais également en présence d'une flamme de prémélange déjà initialisée par la bougie.

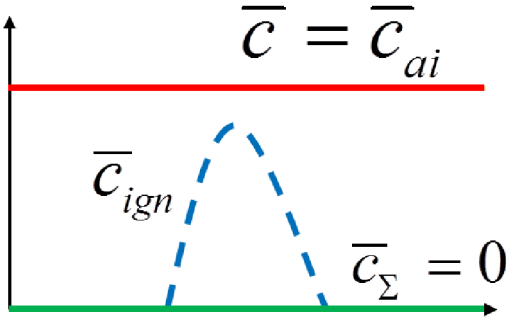




(a) Allumage sans AI



(b) Allumage avec AI : ancien couplage



(c) Allumage avec AI : nouveau couplage

FIG. 3.6: Schématisation d'un allumage sans AI (3.6a), avec AI mais sans (3.6b) et avec (3.6c) les avancements découplés .

3.2 Développement d'une nouvelle stratégie numérique ESO_2 en moteur automobile

Ce chapitre reprend l'article "*Numerical methods and turbulence modeling for LES of piston engines : impact on flow motion and combustion*" présenté à la conférence LES4ICE les 29-30 Novembre 2012, et publié dans la revue Oil & Gas Science and Technology - Revue d'IFP Energies nouvelles [92]. Cette publication a été réalisée conjointement entre IFPEN et le CERFACS avec pour objectif d'évaluer l'influence de l'utilisation de schémas numériques d'ordre élevés, puis celle des modèles de sous-maille pour la LES des MAC. En effet, les combustions anormales étant sensibles aux hétérogénéités de température et de richesse, la résolution de l'écoulement doit être fine. Pour valider l'influence de ces modèles, deux configurations moteur sont étudiées dans cet article, le mono-cylindre F7P dont l'étude a été réalisée au CERFACS par A. Misdariis, et le mono-cylindre suralimenté du projet ICAMDAC dont l'étude a été réalisée dans cette thèse à IFPEn.
En plus de la résolution fine de l'écoulement, l'étude numérique en moteur comporte des contraintes au niveau du temps de calcul, car il est nécessaire de réaliser un grand nombre de cycles consécutifs. Cet article présente pour finir la nouvelle stratégie numérique ESO_2 proposée conjointement par les deux laboratoires. Elle permet une résolution fine de l'écoulement à l'aide de schémas numériques d'ordre élevés, tout en limitant le ressources nécessaires en temps CPU.

3.2.1 Numerical methods and turbulence modeling for LES of piston engines : impact on flow motion and combustion

Abstract In this article Large Eddy Simulations (LES) of Spark Ignition (SI) engines are performed to evaluate the impact of the numerical set-up on the predicted flow motion and combustion process. Due to the high complexity and computational cost of such simulations, the classical set-up commonly includes "low" order numerical schemes (typically first or second-order accurate in time and space) as well as simple turbulence models (such as the well known constant coefficient Smagorinsky model [126]). The scope of this paper is to evaluate the feasibility and the potential benefits of using high precision methods for engine simulations, relying on higher order numerical methods and state-of-the-art subgrid-scale (SGS) models. For this purpose, two high order convection schemes from the Two-step Taylor Galerkin (TTG) family [27] and several SGS turbulence models, namely Dynamic Smagorinsky [45] and sigma [132] are considered to improve the accuracy of the classically used Lax-Wendroff (LW) [78] -Smagorinsky set-up. This evaluation is performed considering two different engine configurations from IFPEN. The first one is the naturally aspirated four-valve spark-ignited F7P engine which benefits from an exhaustive experimental and numerical characterization. The second one, called Ecosural, is a highly supercharged spark-ignited engine. Unique realizations of engine cycles have been simulated for each set-up starting from the same initial conditions and the comparison is made with experimental and previous numerical results for the F7P configuration. For the Ecosural, experimental results are not available yet and only qualitative comparisons are performed to enforce the analysis and conclusions made on the F7P configuration. Regarding SGS models, only slight differences are found at the aerodynamic level even if sigma allows a better resolution of small structures of the velocity field. However, all results are in cycle-to-cycle variability envelopes from Granet et al. [50] and these single cycle computations don't allow to distinguish clear improvements on macroscopic parameters such as resolved kinetic energy, heat release or mean in-cylinder pressure. Concerning numerical schemes, TTG schemes also allow a slighlty



better resolution of small scale vortices but global quantities such as resolved kinetic energy and SGS viscosity are comparable. Nevertheless, clear differences appear between the different schemes in the combustion stroke. This is attributed to a better resolution of the flame-turbulence interaction process during the free flame propagation period, leading to an increase of the resolved part of heat release. It is also shown in this paper that an adjustment of the efficiency constant in the Thickened Flame (TF) model is compulsory to account for the over dissipation of the smallest resolved structures if LW is used. In the light of these conclusions an hybrid set-up, called ESO_2, which consists in using TTGC during combustion and LW elsewhere is proposed and applied to the two engines configurations. Results are in good agreement with the ones obtained in the case of a full TTGC simulation, while the CPU cost increase is only about 10% compared to LW. The accuracy of LW seems therefore to be sufficient for pure aerodynamic phases, while the use of TTGC only during combustion permits an improvement in the LES quality. The hybrid ESO_2 method thus appears as an attractive approach to improve further calculations accuracy without being greatly penalized by additional CPU costs in multi-cycle simulations.

3.2.2 Introduction

In the past few years, Large Eddy Simulation (LES) has been a subject of growing interest from the automotive community because of its unique potential to reproduce unsteady and sporadic phenomena like cycle-to-cycle variations (CCV) or abnormal combustions [136, 118, 46, 59, 18, 81]. However, Internal Combustion Engines (ICE) still remain a recent and complex field of application for LES : the flow is highly unsteady and governed by a strong interaction between numerous physical phenomena (turbulence, mixing, combustion, multi-phase flows, acoustics,...), the geometry is mobile and initial and boundary conditions are generally badly characterized or defined (wall temperature, inlet/outlet pressure or velocity signal). When dealing with sporadic or erratic phenomena such as CCV or abnormal combustions, an additional difficulty arises : since reliable trends and statistics may only be obtained by computing numerous cycles (typically 50), the solver must necessarily be robust and fast. A direct consequence of these issues (complexity, novelty, cost and robustness) is that classical ICE simulations do not generally use "high order" set-up compared to more academic LES configurations, such as turbulent pipe flows for instance [95], for which highly accurate set-up are the standard. In particular, ICE simulations usually use low order and/or dissipative numerical schemes as well as simple Sub-Grid-Scale (SGS) turbulence models. Concerning numerical schemes, two classes of convective schemes are generally found in the literature : upwind-biased schemes are used by Jhavar and Rutland [63], Dugue *et al.* [33] or Goryntsev *et al.* [46] for instance while the Lax-Wendroff total discretization approach [78] (second order accurate in space and time) is used by Richard *et al.* [118], Vermorel *et al.* [136] or Granet *et al.* [50]. Both of them are known to be very dissipative and a priori not well suited for LES [93]. Concerning turbulence modeling, the most popular closure is the constant coefficient Smagorinsky model [126]. In spite of its well-known drawbacks [45], this model is used in many ICE LES, such as Goryntsev *et al.* [46], Celik *et al.* [19], Vermorel *et al.* [136] or Granet *et al.* [50]. The combined use of a low order numerical scheme and a simple turbulence model does not mean that the results of these computations are systematically wrong or dubious. Many other parameters have also to be taken into account (the resolution and the quality of the grid especially) to state if a methodology is adequate or not. Besides, many promising results have been obtained with such a set-up. For example, previous works conducted at IFPEN and CERFACS using the Lax-Wendroff scheme and the classical constant coefficient Smagorinsky model have demonstrated the great potential of LES for solving complex problems in piston engines, notably its ability to help understanding CCV sources [136, 35, 50] and to build phenomenological models



for engine control development [103].

However, it is well known that both numerics and turbulence models can have a huge impact on the simulation results. In the perspective of using LES for predicting engine operation far upstream in its design process, highly precise methods should then be used to provide more reliable results. This objective is laudable but not necessarily realistic : high order non-dissipative schemes generally exhibits high-frequency artificial oscillations, which may cause instability in the computations and jeopardize the robustness of the solver. High order set-up may also lead to prohibitive computational costs for engine simulations, which require tens of cycles for generating reliable converged statistics. The objective of this work is therefore to evaluate the feasibility and the potential benefits (or drawbacks) of using high precision numerical schemes and state-of-the-art SGS turbulence models in terms of precision, robustness and cost. For this purpose, two convective schemes from the Two-step Taylor-Galerkin (TTG) family are tested and evaluated in combination with several SGS models (Smagorinsky, dynamic Smagorisnky, sigma). This evaluation is performed considering two different engine configurations of IFPEN : a naturally aspirated engine and a highly supercharged engine. Thanks to these comparisons, an optimal set-up is highlighted and a new approach called ESO_2 (Engine Stroke Optimal Order) method, based on the choice of the best compromise in terms of CPU cost and precision, is proposed.

3.2.3 Test case description and approach

The aim of the present study is to propose an appropriate numerical set-up which would be able to handle piston engine simulations with the highest fidelity. For this purpose, three different numerical schemes and three different SGS models are evaluated and compared on two different engine configurations. The three numerical schemes are the classical finite volume Lax-Wendroff (LW) scheme [78] (2^{nd} order accurate in space and time) and two finite element (FE) schemes from the 2-step Taylor-Galerkin family : TTGC (3^{rd} order accurate in space and time) and TTG4A (4^{th} order accurate in time and 3^{rd} order accurate in space) [27]. For academic configurations (convection of a vortex, HIT), these two FE schemes give much better results than the LW scheme thanks to their better dispersive and dissipative properties [27]. They have also been widely and successfully used in complex configurations such as gas turbine combustion chambers in recent LES studies [40, 113, 124, 139]. Concerning the SGS models, in addition to the classical constant coefficient Smagorinsky model [126], two more recent closures are also evaluated : the dynamic Smagorinsky [45] and the sigma [132] models (see Appendix). Many studies have already highlighted the conceptual and actual advantages of the dynamic procedure compared to the constant coefficient method [87, 109]. The sigma model is also supposed to give better results than the classical Smagorinsky model, especially in the vicinity of solid boundaries or in case of pure shear and solid rotation for instance [132]. The two configurations are the F7P and the Ecosural single cylinder engines from IFPEN. The F7P configuration has been widely studied experimentally and numerically in previous works. In [35, 36, 50], multi-cycle LES of different motored and reactive operating points are presented. The numerical set-up includes a LW convection scheme and a constant coefficient Smagorinsky model. Despite its supposed "low" accuracy, this set-up exhibited promising results : for various operating points, experimental results in terms of aerodynamics and combustion cycle-to-cycle variability were correctly reproduced not only qualitatively but also quantitatively. The Ecosural engine is a modern single cylinder engine, specifically designed to support research activities. Experimental measurements are currently performed at IFPEN on the Ecosural engine to provide LES dedicated data, but were not available for this study. For this reason, only qualitative comparisons between the different



TAB. 3.2: F7P engine main specifications. Crank Angle Degrees (CAD) are relative to compression Top-Dead-Center (TDC).

	Unity	
Geometrical compression ratio	-	9.9
Engine speed	rpm	1200
Bore	mm	82
Stroke	mm	83,5
Connecting rod length	mm	144
Intake valve opening/closing	CAD	350/-120
Exhaust valve opening/closing	CAD	120/-350
LES grid (million tetrahedra)	-	2.2 to 9.6

numerical set-up are achieved, with the aim to support or infer conclusions drawn on the F7P engine. Such results are nevertheless particularly interesting since the engine design and operating conditions (engine load, speed) are very different from those of the F7P engine.

3.2.3.1 Methodology

Since SI engine configurations can exhibit important levels of cycle-to-cycle variations, the best way to evaluate the above cited numerical schemes and turbulence models would be to perform multi-cycle computations and to compare statistical results over several tens of cycles. Unfortunately, the computational cost associated to the simulation of these numerous cycles prevents the use of this strategy for all the numerical tests. Thereby it has been chosen to perform a unique cycle calculation for each numerical scheme and turbulence model. Each computation starts at Intake Valve Opening (IVO) from the same initial conditions and ends after the combustion process. The comparison between the different set-up is performed at three levels of interest : trapped mass, flow field and combustion process. It is worth noting that this single-cycle strategy introduces a severe difficulty when comparing the results : it may be difficult to separate the differences due to a change in the numerical set-up from the differences due to "natural" cycle-to-cycle variations. In that sense, the objective here is not to establish a definitive hierarchy between the different numerical schemes and SGS models, but only to extract firsts trends and new elements for future computations and to point out some possible unphysical behaviors as well.

3.2.3.2 Engine configurations

The first single cylinder configuration is the F7P engine [75, 76]. It is fully equipped with sensors and optical accesses and benefits from a full experimental and numerical characterization on several operating points and a extensive database is then available for comparison. This naturally aspirated configuration consists in a single-cylinder four-valve spark-ignition engine fueled with gaseous propane (Fig. 3.7). Its main specifications are given in Table 3.2.

The operating point chosen for this study is the one named *unst_dil* in Granet *et al.* [50]. This condition is called "unstable" because of its high degree of CCV ($COV_{IMEP} = 7.2\%$, see Table 3.3). Compared to a stable operating point, it is expected to exhibit larger differences between the different set-up.



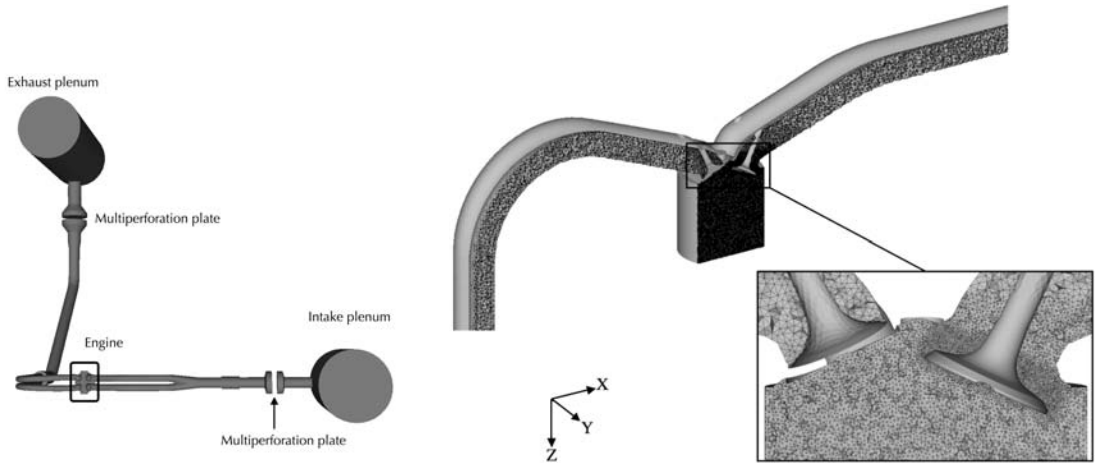


FIG. 3.7: Sketch of the experimental F7P engine test bench (left) and view of a typical tetrahedral mesh during the intake stroke [36](right).

TAB. 3.3: F7P engine : experimental characteristics of *unst_dil* operating point.

	Unity	
Fuel	-	C_3H_8
Equivalence ratio	-	1
Dilution by N2	% vol.	0.32
Trapped mass	mg	250
Spark advance	CAD	50
Mean IMEP	bars	3.19
COV_{IMEP}	%	7.2
Mean Pmax	bars	16.9
COV_{Pmax}	%	12.4

As mentioned in Section 3.2.3.1, the comparison of the different set-up are only based on single-cycle computations due to their high computational cost, which may complicate the analysis and the conclusions. In order to enforce (or not) these conclusions, a second test configuration is also studied. This second configuration is a highly downsized spark ignition engine (Fig. 3.8) recently developed at IFPEN for the ICAMDAC project [3]. It is equipped with direct injection and is characterized by a high tumble ratio aiming at generating important levels of turbulence in the combustion chamber. It can therefore support elevated boost levels and IMEP (Indicated Mean Effective Pressure) of the order of 30 bars. Table 3.4 summarizes the main specifications of the Ecosural engine. In order to bring complementary elements compared to the F7P case, very different operating conditions are voluntary chosen, namely both engine speed and load are increased (Table 3.5) to mimic near knocking conditions called *knock* in the following. In practice, gasoline and iso-octane will be experimentally tested in this engine, but gaseous propane is used for this qualitative study in order to avoid fuel stratification effects and to facilitate



comparisons with the F7P simulations.

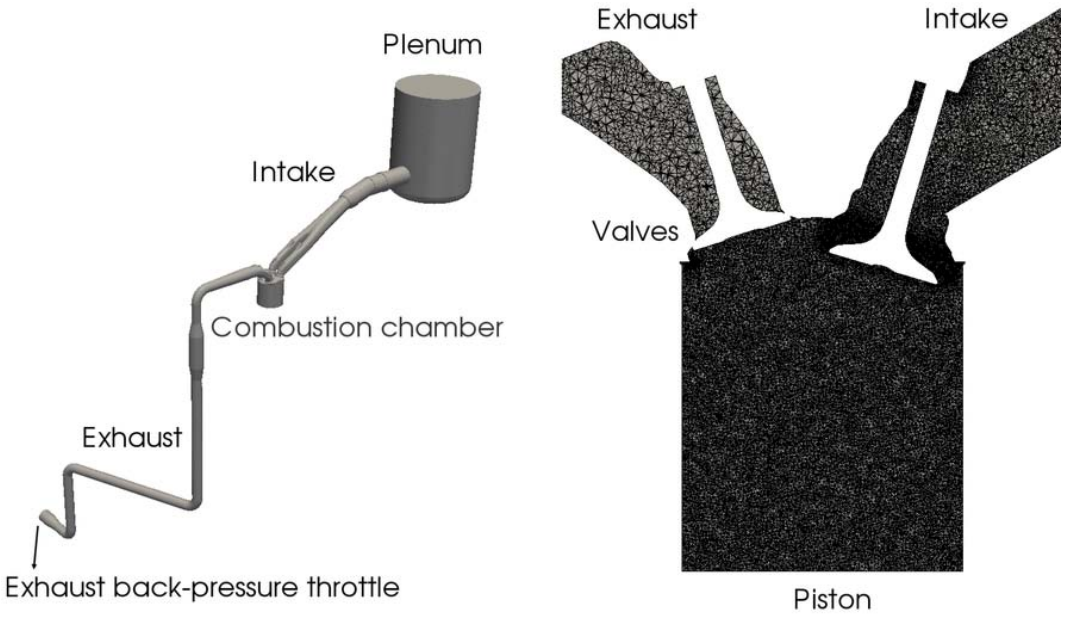


FIG. 3.8: Sketch of the experimental Ecosural engine test bench (left) and view of a typical tetrahedral mesh during the intake stroke (right).

3.2.3.3 Numerical set-up

All the computations are performed with the AVBP LES code [47, 48], which solves the compressible multi-species Navier-Stokes equations. The Energy deposition [74] and TFLES model [26] are respectively used to simulate spark ignition and flame propagation, as in [50]. Simulation grids are made of tetrahedra, allowing to refine the mesh in specific areas such as the valve seats or the spark plug, while using coarsened meshes in the intake and exhaust pipes or plenum (Fig. 3.7 and 3.8). Due to the piston movement, the number of cells highly evolves during the computation and ranges from about 2 millions at Top Dead Center (TDC) to around 10 millions at Bottom Dead Center (BDC) depending on the engine (Tables 3.2 and 3.4). Computational ressources needed to simulate one cycle are about 30 hours on 400 processors of a SGI Altix ICE 8200 for each configuration when using the Lax-Wendroff scheme and the Smagorinsky model.

3.2.4 High order numerical schemes impact on LES OF ICE

In this section, the different numerical schemes (LW, TTGC and TTG4A) are evaluated on the *unst_dil* operating point of the F7P engine. In all computations, the SGS model is the constant coefficient Smagorinsky ($Cs = 0.18$) and all other parameters (grid, combustion model, CFL, ...) are unchanged.



TAB. 3.4: Ecosural engine main specifications. CAD are relative to compression TDC.

	Unity	
Geometrical compression ratio	-	10.5
Engine speed	rpm	1800
Bore	mm	77
Stroke	mm	85.8
Connecting rod length	mm	132.2
Intake valve opening/closing	CAD	353/-156
Exhaust valve opening/closing	CAD	116.5/-353.5
LES grid (million tetrahedra)	-	2.2 to 12.2

TAB. 3.5: Ecosural engine : experimental characteristics of *knock* operating point.

	Unity	
Fuel	-	C_3H_8
Equivalence ratio	-	1
Dilution by N2	% vol.	0.0
Trapped mass	mg	844
Spark advance	CAD	20
Mean IMEP	bars	20

Results are compared to experimental data and to the reference numerical results (LW-Smagorinsky) reported in [50]. A qualitative study of the Ecosural simulations is also used to bring complementary elements to the F7P LES analysis. In order to identify possible improvements brought by these new numerical schemes, comparisons are first made on trapped mass, then on the flow properties during the intake and compression strokes and finally on the combustion process.

3.2.4.1 LW - TTGC - TTG4A comparison for LES of ICE

3.2.4.1.1 Trapped mass The first macroscopic quantity a piston engine computation should be able to predict is the mass trapped in the cylinder after IVC because it has a first order impact on the engine thermodynamic cycle. Most of the time the first cycle of a multi-cycle LES does not allow to get this quantity with precision due to the influence of initial conditions. The present F7P simulations get round the problem by starting from the end of cycle 21 of the *unst_dil* database [50], i.e. from fully realistic initial conditions. For the Ecosural engine, two cycles without combustion are computed using the LW scheme and the Smagorinsky model to generate initial conditions for the combustion simulations.

Table 3.6 summarizes the computed trapped mass for the three numerical schemes. The differences are very limited ($\approx 1\%$) and this quantity is thus almost insensitive to the numerical scheme.

3.2.4.1.2 Intake and compression aerodynamics During the intake and compression strokes, high aerodynamic cycle-to-cycle variations where observed by Enaux *et al.* [36] for the motored engine case and Granet *et al.* [50] for the reactive cases of the F7P engine. As an illustration, Fig. 3.9 shows in grey the statistical envelope of the x-velocity along the cylinder axis $\vec{z}$ for the 50 cycles reported in [50] at



TAB. 3.6: Computed trapped mass [mg] for the three numerical schemes and experimental data for the F7P engine.

	Exp.	LW	TTG4A	TTGC
F7P	250	254	251.5	251.1
Ecosural	-	842.0	843.0	842.7

four different crank angles (see Fig. 3.7 for a definition of the axis). Here the statistical envelope of a quantity Q delineates the zone where 95% of the cycles are included and is defined as $Q_{mean}(t) \pm 2\sigma_Q$ with Q_{mean} the mean value of Q and σ_Q its standard deviation. The instantaneous profiles obtained with LW, TTG4A and TTGC are also plotted for the four distinct crank angles.

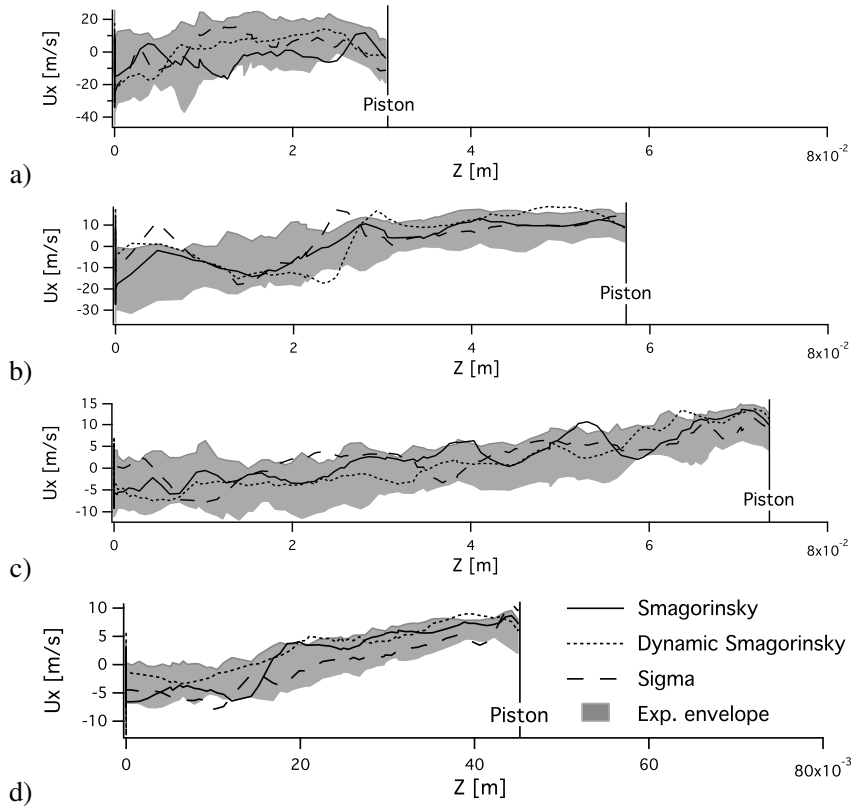


FIG. 3.9: F7P engine : x-velocity profiles along the cylinder axis for the LW, TTGC and TTG4A schemes at -280 CAD (a), -240 CAD (b), -180 CAD (c) and -100 CAD (d). The experimental envelope is extracted from [50]. The abscissa $z = 0$ corresponds to the bottom of the cylinder head.

Whatever the crank angle, all TTG profiles differ from the LW ones but remain very similar and lie within the statistical envelope. This observation holds true for the two other velocity components (not shown). As well, kinetic energy evolutions are similar for all schemes as shown in Fig. 3.10. In particular, the same rapid resolved energy drop at the end of the intake stroke and during compression is retrieved. It is particularly interesting to notice that the same observation can be made for both F7P and Ecosural



configurations even if the flow energy levels differ a lot during the intake strokes.

At this point, it is of course impossible to claim that a numerical scheme is better than another : no pathologic behavior is noticed whatever the numerical scheme and all the results remain within the range of cycle-to-cycle variations. However, little differences can be identified if a closer look is made on velocity fields (Fig. 3.11 and 3.12). Here again, the overall flow motion and the biggest structures resolution is similar for all schemes. Nevertheless, one should notice that the higher order feature of TTG schemes has a direct impact on the convection of the smallest structures. Where LW tends to smooth and dissipate these small structures, TTG schemes and especially TTGC are able of a better accuracy because of less dissipation and diffusion. This behavior can be retrieved on turbulent viscosity levels shown in Fig. 3.13. During the intake and compression phases, a higher level of turbulent viscosity is identifiable for TTG schemes and mostly for TTGC even if the Smagorinsky SGS model is used in all cases with the same constant $C_s = 0.18$. These differences can then only come from variations in the Reynolds tensor used by the model i.e. in the flow resolution. It results that a higher turbulent viscosity can be linked to more velocity gradients and in this case to less dissipation/diffusion of the smallest scales.

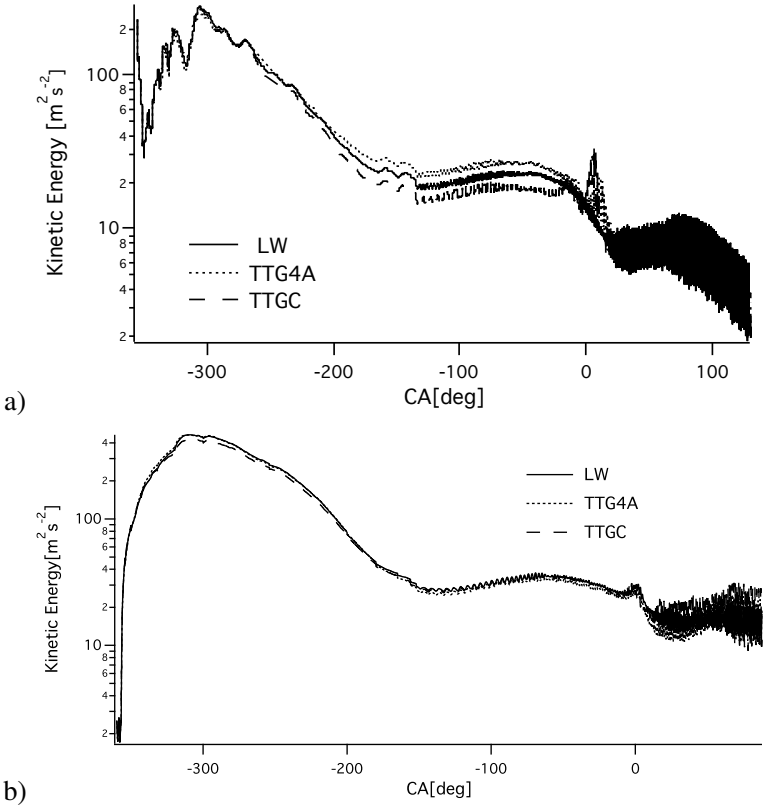


FIG. 3.10: Kinetic energy evolution for the F7P (a) and the Ecosural (b) engines.

3.2.4.1.3 Combustion process Regarding the combustion process, three phases may be distinguished, as illustrated in Fig. 3.14. The first one is the free flame propagation period during which the flame kernel generated after spark ignition evolves without being directly constrained by wall effects. During

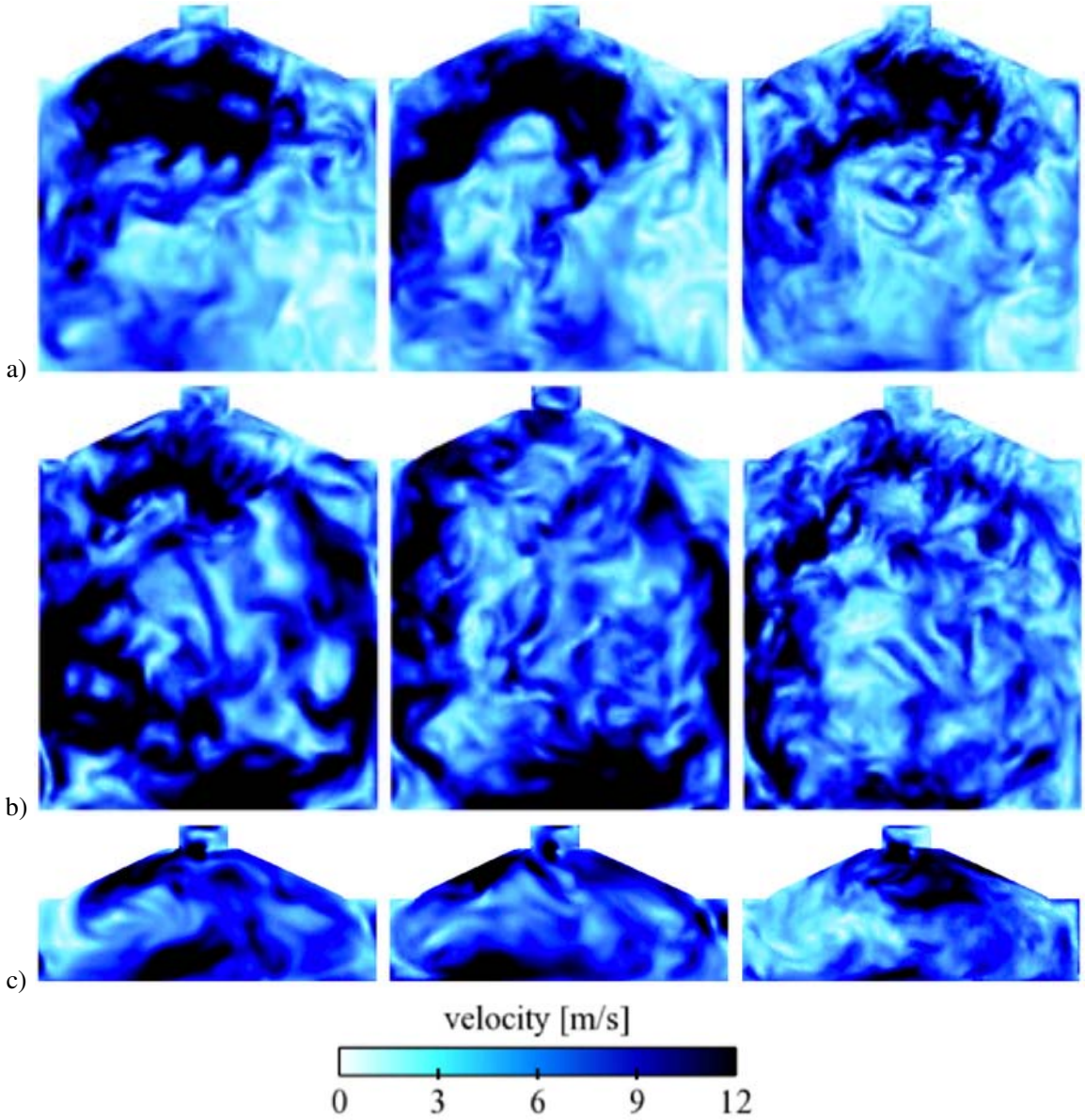


FIG. 3.11: F7P engine : velocity fields at the cylinder center (y=0) for the LW, TTG4A and TTGC schemes at -240 CAD (a), -180 CAD (b) and -50 CAD (c).

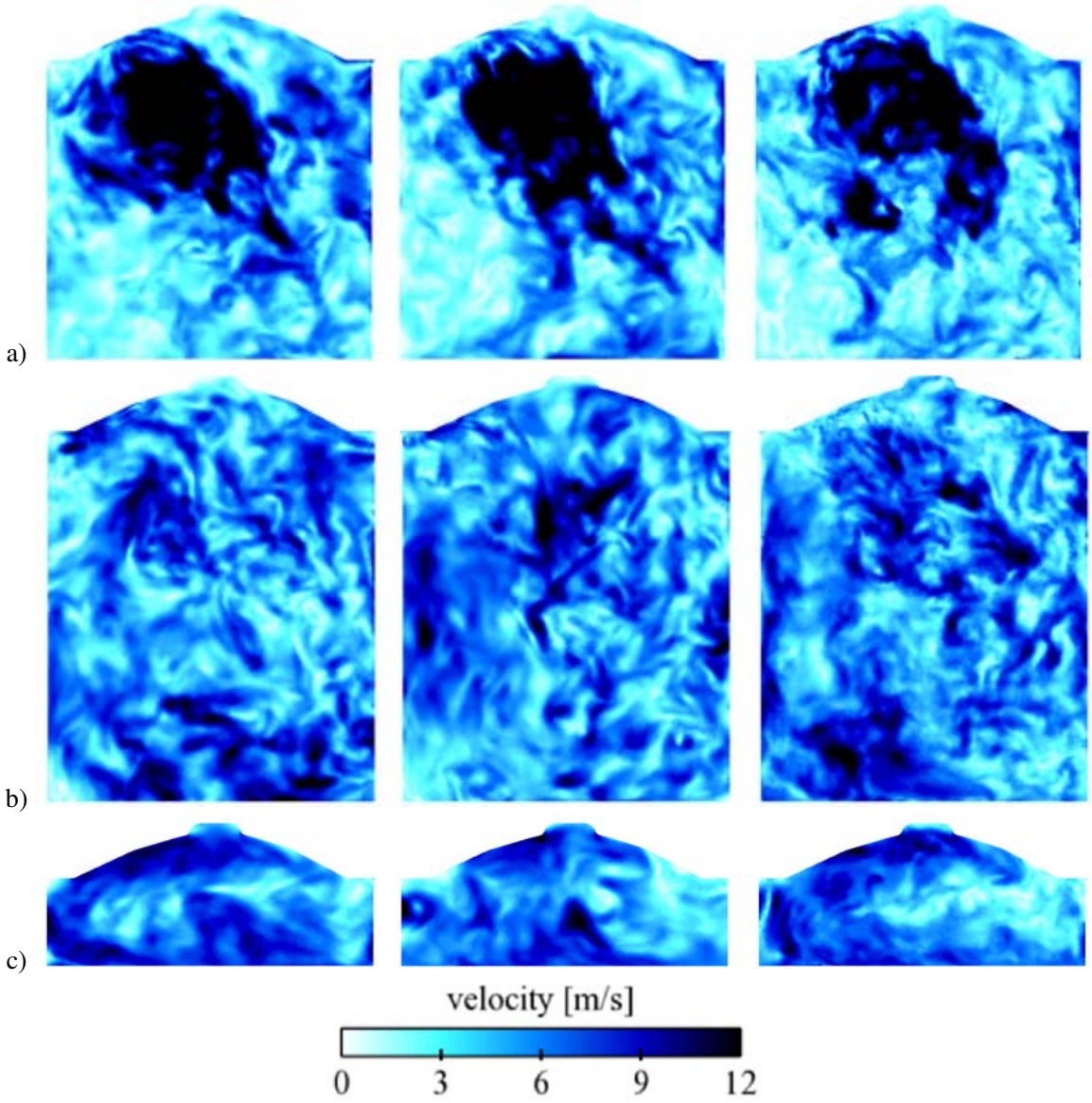


FIG. 3.12: Ecosural engine : velocity fields at the cylinder center (y=0) for the LW, TTG4A and TTGC schemes at -240 CAD (a), -180 CAD (b) and -50 CAD (c).

this period, the flame expands rapidly due to the very low density of burned gases compared to the fresh mixture and its wrinkling progressively grows under the action of small scale vortices. The kernel is also convected by large scale motions leading to cyclic variations of its localization. This first phase is crucial since it plays a main role in the combustion event phasing in the cycle. In the second phase of the combustion process, the flame starts interacting with the piston and cylinder head due to the very low height of the combustion chamber around TDC. The reaction zone then propagates towards the periphery of the cylinder while being strongly affected by confinement effects, which vary a lot from one cycle to another. Indeed, the beginning of this phase highly depends on the kernel convection during the free propagation period since the flame can be more or less moved near the walls. The last phase of the combustion process is characterized by flame extinction at the cylinder liner due to the decrease of both flame wrinkling and laminar flame velocity. Flame-turbulence interactions are thus not of first order in this part of the combustion process, which is greatly piloted by heat losses and flow kinetic energy dissipation.

The distinction between these three phases of the combustion stroke is very important because comparisons should be limited to the free flame propagation period only. One main reason for this statement is that LES analyses are only based on single cycle simulations in this study. Since a modification of the numerical scheme (or of the SGS model) leads to a slightly different engine cycle realization in terms of flow motion, flame kernel convection towards the piston or cylinder head is also affected and the walls influence may highly perturb the comparison during the second phase. In order to separate effects linked to flame-wall interactions from those directly related to the flow resolution quality itself, a focus is performed on the first combustion phase. During this period, flame propagation processes should be more directly related to the flow characteristics and thus to the numerical scheme properties. The free flame propagation phase lasts around 40 CAD for the F7P engine and 20 CAD for the Ecosural engine with an ignition respectively 50 and 20 CAD before TDC. For this reason, graphs related to combustion will only be analyzed from Ignition to TDC in the following.

During this free expansion phase, while TTG schemes predict similar resolved flame surface, LW exhibit a surprisingly low resolved surface as shown in Fig. 3.15.a and the same behavior is also retrieved at the SGS level (Fig. 3.15.b). As a result, the combustion process predicted by LW is very slow and the in-cylinder pressure is close to the motored one for this scheme as shown in Fig. 3.16. For the Ecosural engine, the same trend is obtained as shown in Fig. 3.17, i.e. the flame surface is higher with TTGC compared with LW even if the results are not as discriminating as for the F7P engine.

In order to understand the behavior of LW compared to TTG schemes and especially TTGC, the focus is now put on the TFLES model and the efficiency function used to account for the SGS combustion in this study.

3.2.4.2 TFLES and efficiency function

In the previous section it was found that the two TTG schemes were able to predict a similar combustion, in good agreement with the experimental envelope in the F7P case. On the contrary, combustion predicted by LW was extremely slow which was noticed on resolved and SGS flame surfaces and confirmed on the in-cylinder pressure in both F7P and Ecosural cases. For all these tests, the TFLES approach [26] was used to model the combustion process. In this approach, the flame is artificially thickened in order to ensure an appropriate resolution of the flame front on the LES grid. However, when the flame is thickened, the combustion-turbulence interaction is affected, reducing flame wrinkling at the resolved level and obliging to model the lost part at the SGS level. This role is fulfilled by the efficiency



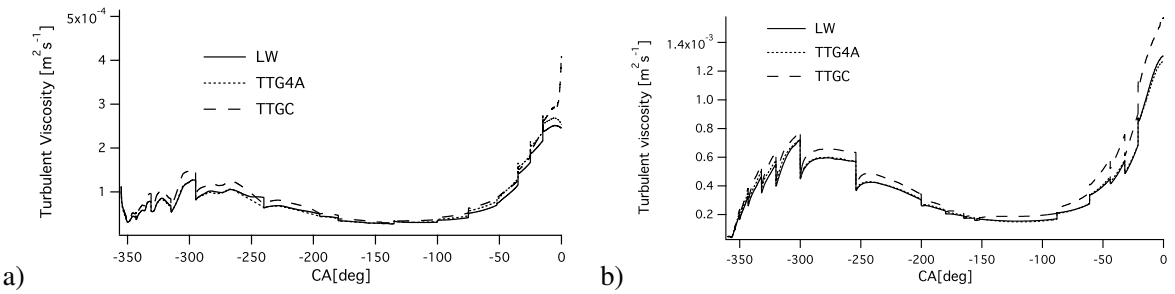


FIG. 3.13: Mean turbulent viscosity evolution for the F7P (a) and the Ecosural (b) engines.

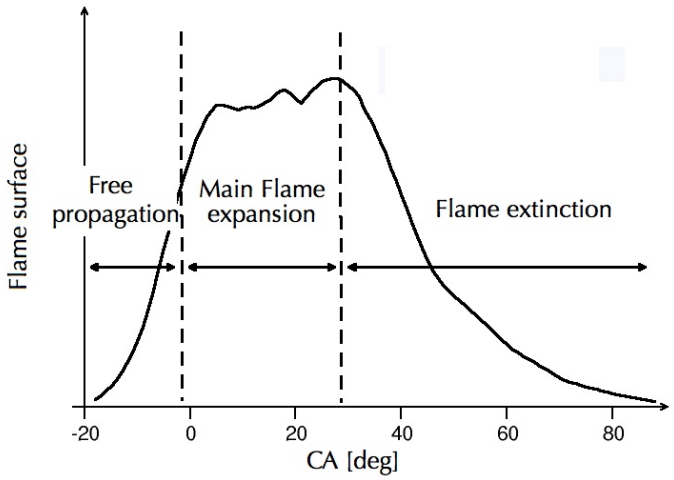


FIG. 3.14: Flame propagation phases in ICE.

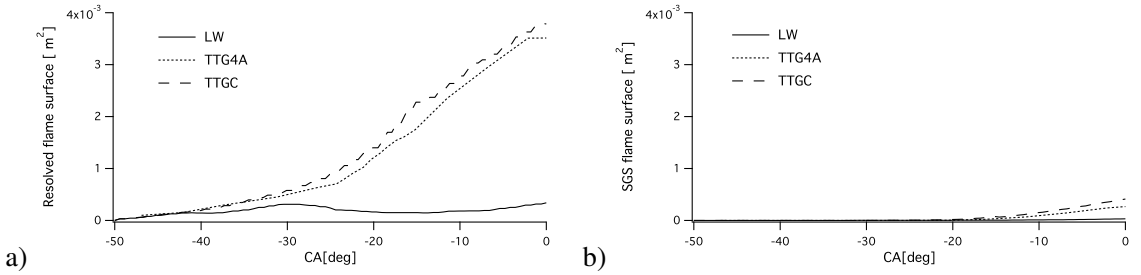


FIG. 3.15: F7P engine : resolved (a) and SGS (b) flame surfaces.

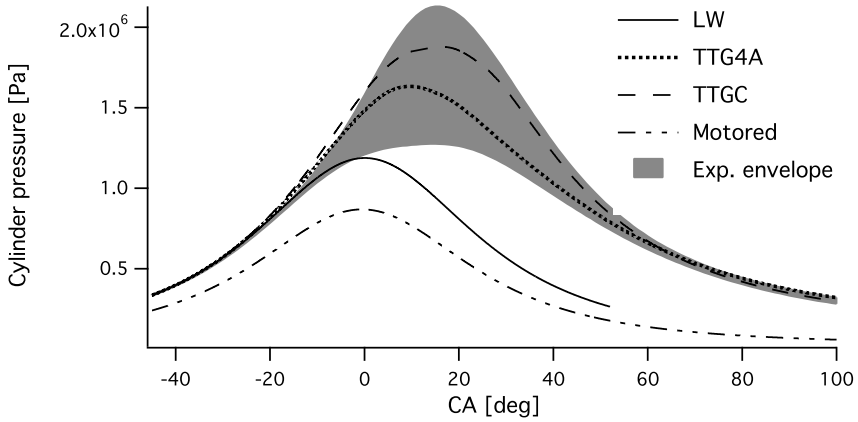


FIG. 3.16: In-cylinder pressure for F7P engine. The experimental envelope is extracted from[50].

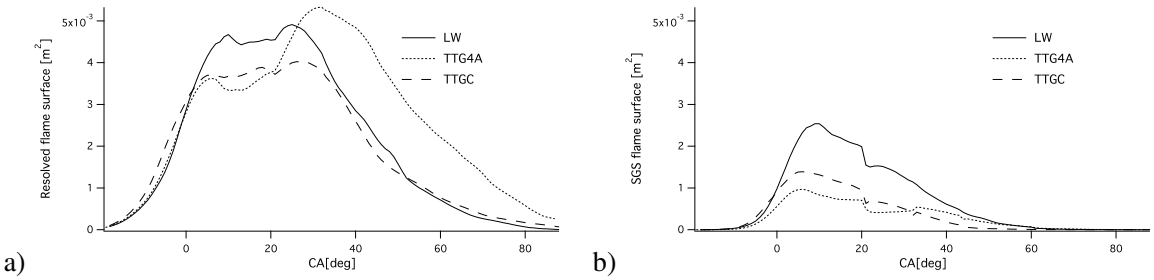


FIG. 3.17: Ecosural engine : resolved (a) and SGS (b) flame surfaces.

function E, which is given by Eq. 36 in the paper of Colin *et al.* [26] :

$$E = \frac{\Xi(\delta_l^0)}{\Xi(\delta_l^1)} \tag{3.19}$$

where $\Xi(\delta_l^1)$ and $\Xi(\delta_l^0)$ are respectively the wrinkling factors corresponding to thickened and non thickened flames estimated by :

$$\Xi(\delta) = 1 + \alpha\Gamma\left(\frac{\Delta_e}{\delta}, \frac{u'}{s_l^0}\right)\frac{u'}{s_l^0} \tag{3.20}$$

with Γ a function of the SGS strain rate, u' the fluctuating velocity, Δ_e the filter size , s_l^0 the laminar flame speed and α a constant given by :

$$\alpha = \beta\frac{2ln(2)}{3c_{ms}}\left[Re^{1/2} - 1\right] \tag{3.21}$$

In this expression, β is the TFLES model constant and c_{ms} another constant fixed to 0.28 using the DNS results by Yeung *et al.* [140]. In this study where LW, TTG4A and TTGC are compared, all parameters are the same (mesh, chemistry, operating conditions, etc...). The only parameter which changes depending on the numerical scheme used is the fluctuating velocity u' since this velocity is computed using the resolved velocity field [26] :

$$u' = 2\Delta_x^3 rot(\nabla^2\bar{\mathbf{U}}) \tag{3.22}$$

When using the TFLES model, users have to fix the β constant (Eq. 3.21) which is recommended to be of the order of unity by Colin *et al.* [26]. A classical value of 0.3 is used here for β according to CERFACS and IFPEN experience of high order schemes [139]. This value was kept for the three tested numerical schemes in order to ensure fair comparisons.

If one wants the combustion process to be independent of the numerical scheme used, it obviously means that SGS contributions should exactly complement resolved contributions. In other words, if a numerical scheme allows to account for a larger part of the flame-turbulence interaction at the resolved scale, one expects the SGS part to be reduced accordingly. In Section 3.2.4.1.2 it was shown that, even if similar large scale flow motions were retrieved for the three schemes, a better resolution and finer structures were identified with TTG schemes and especially with TTGC. According to Eq. 3.22, a better resolution induces a more intense fluctuating velocity and thus a higher efficiency according to Eq. 3.19 and 3.20. As a consequence, if one compare TTGC and LW simulations, LW exhibits both lower resolved and lower SGS contributions compared to TTGC.

This unexpected effect is attributed to the construction of the efficiency function and the β constant determination based on very high order schemes and DNS results [26]. In such highly precise simulations, all the turbulent spectrum is resolved with high fidelity until the highest wave numbers associated to the filter size. Taking into account those resolved scales, the efficiency function is built to provide an estimation of the impact of the non-resolved scales (i.e. SGS) on the combustion process. With low order and dissipative schemes, all flow structures larger than the filter size are not precisely resolved, especially the smallest ones. It results that some information is missing for the efficiency function to estimate the SGS contribution. It means that for a given resolved flow, the efficiency function underestimates the SGS



TAB. 3.7: Main characteristic times of the combustion process. CA are given with reference to the ignition time[50].

	ca2	ca50	ca90
Exp. enveloppe	[37-48]	[58-84]	[77-132]
LW, $\beta = 2$	44	77.5	92
TTGC, $\beta = 0.3$	38	66	87

contribution if low order schemes are used. It suggest that the β constant can not be scheme independent and has to be adjusted depending on the numerical scheme used.

Actually, this efficiency function adaptation was performed in a very empirical way in several former computations on different engine configurations, in particular the F7P engine considered in this work and the XU10 engine described in [118, 136] where authors found that $\beta = 2$ gives very satisfactory results with LW. Indeed, Fig. 3.18 shows that with this value, the expected behavior is retrieved : the resolved part is still lower with LW compared to TTGC or TTG4A but this loss is balanced by an increased contribution of SGS surface.

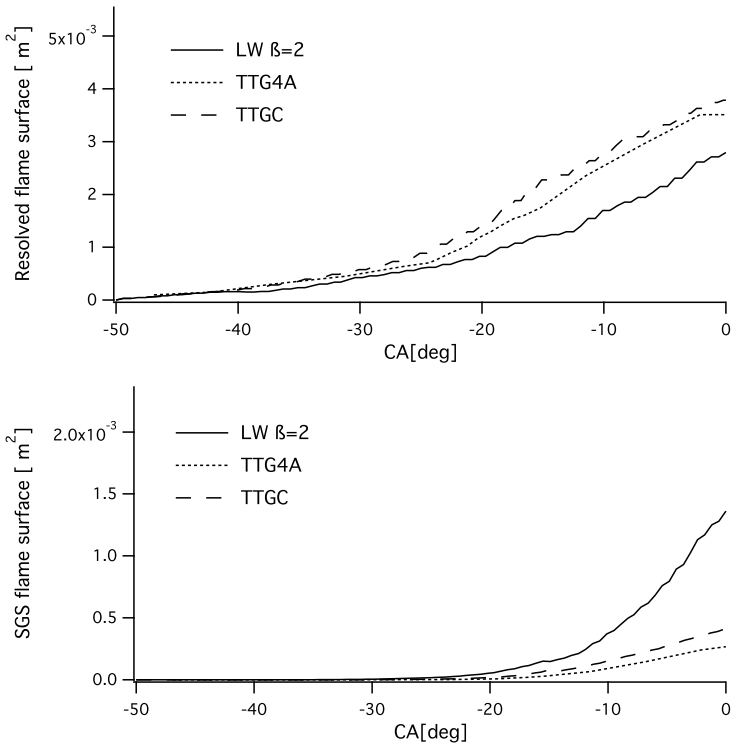


FIG. 3.18: F7P engine : impact of the efficiency constant β (Eq. 3.21) on flame surface contributions. For TTG4A and TTGC β is equal to its standard value 0.3.

To get an idea of the combustion velocity, Table 3.7 presents the classical indicators CA2, CA50 and CA90, where CAX is defined as the timing for which the burnt mass fraction reaches $X\%$. With

$\beta = 2$, the LW computation provides good estimations of the different combustion times compared to experimental observations. It can also be noticed from this table that the standard value of 0.3 with TTGC gives correct results.

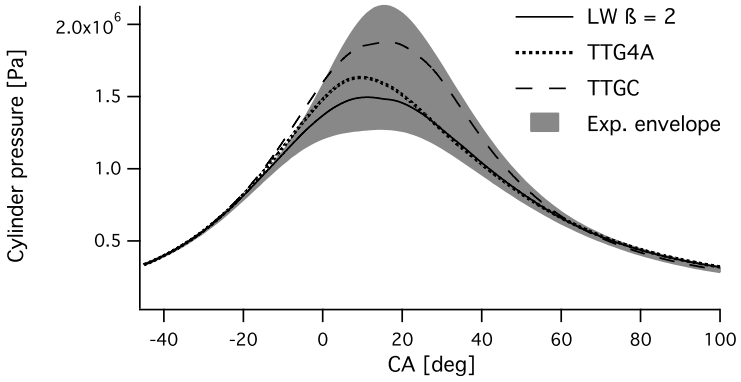


FIG. 3.19: F7P engine : impact of the efficiency constant β (Eq. 3.21) on the in-cylinder pressure. For TTG4A and TTGC β is equal to its standard value 0.3. The experimental envelop is extracted from [50].

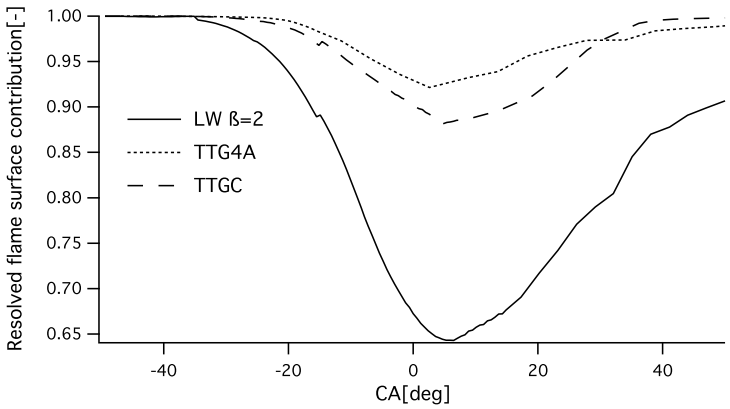


FIG. 3.20: F7P engine : resolved flame surface over total flame surface ratio. For TTG4A and TTGC β is equals to its standard value 0.3.

Finally, it can be seen in Fig. 3.19 that with $\beta = 2$ the LW in-cylinder pressure gets back in the experimental envelope. However it is worth noting that, if the pressure traces are now similar with LW, TTGC and TTG4A, this result is clearly due to an increased modeling contribution for LW as shown in Fig. 3.20. While the maximum SGS contribution never exceeds 12% for TTG schemes, the SGS flame surface represents up to 35% of the total flame surface for the LW simulation. In that sense, the use of higher order schemes such as TTGC seems highly preferable since it clearly allows to lower the impact of the modeling on the simulation. However and even if this conclusion is similar for the two engines tested here, this tendency should be confirmed on multi-cycle simulations.



TAB. 3.8: Restitution times normalized by the LW one (SGS model : Smagorinsky).

	F7P	Ecosural
LW	1	1
TTG4A	1.91	1.84
TTGC	1.84	1.82

TAB. 3.9: Computed trapped mass [mg] for the three SGS models on the two engine configurations and experimental data for the F7P engine.

	Exp.	Smago.	Dyn. Smago.	sigma
F7P [mg]	250	254	252	253
Ecosural [mg]	-	842	843	842

3.2.4.3 Restitution times

Restitution times for the different convection schemes are presented in Table 3.8. As expected, the high order of TTG schemes comes with additional simulation costs by a factor close to 2. As mentioned in the introduction, such an increase in the computational resources consumed by the simulation is a non negligible drawback because of the numerous cycles which have to be simulated.

3.2.5 Evaluation of sub-grid-scale models

In this section, the constant coefficient Smagorinsky model [126] ($Cs = 0.18$) is compared to its dynamic version [45] and to the sigma closure [132] for both F7P and Ecosural configurations. For CPU time reduction purposes, the LW scheme is used in this section with the efficiency constant β=2. All other parameters (grid, combustion model, CFL, ...) are kept unchanged. Results are here again compared to the experimental data and to the reference numerical results (LW-Smagorinsky) reported in [50] for the F7P engine. As for the scheme comparison study, Ecosural simulations are also used to bring complementary elements. The comparison is made on the trapped mass, the aerodynamic fields and combustion process.

3.2.5.1 In-cylinder trapped mass

As shown in Table 3.9, for both engine configurations, the differences in trapped mass between the three SGS models are very slight, which means that the influence of the turbulence models on this very macroscopic quantity is almost negligible.

3.2.5.2 Intake and compression in-cylinder flow

Figure 3.21 shows instantaneous x-velocity profiles along the cylinder axis obtained with the constant Smagorinsky, dynamic Smagorinsky and Sigma SGS models at four distinct crank angles as well as the experimental envelope extracted from [50] for the F7P engine. From the aerodynamic point of view, no clear trend appears when comparing the three simulations. All profiles are different, with variations reaching several meters per second, but they remain in the statistical envelope. For the two other velocity components (not shown) the same observation can be made.



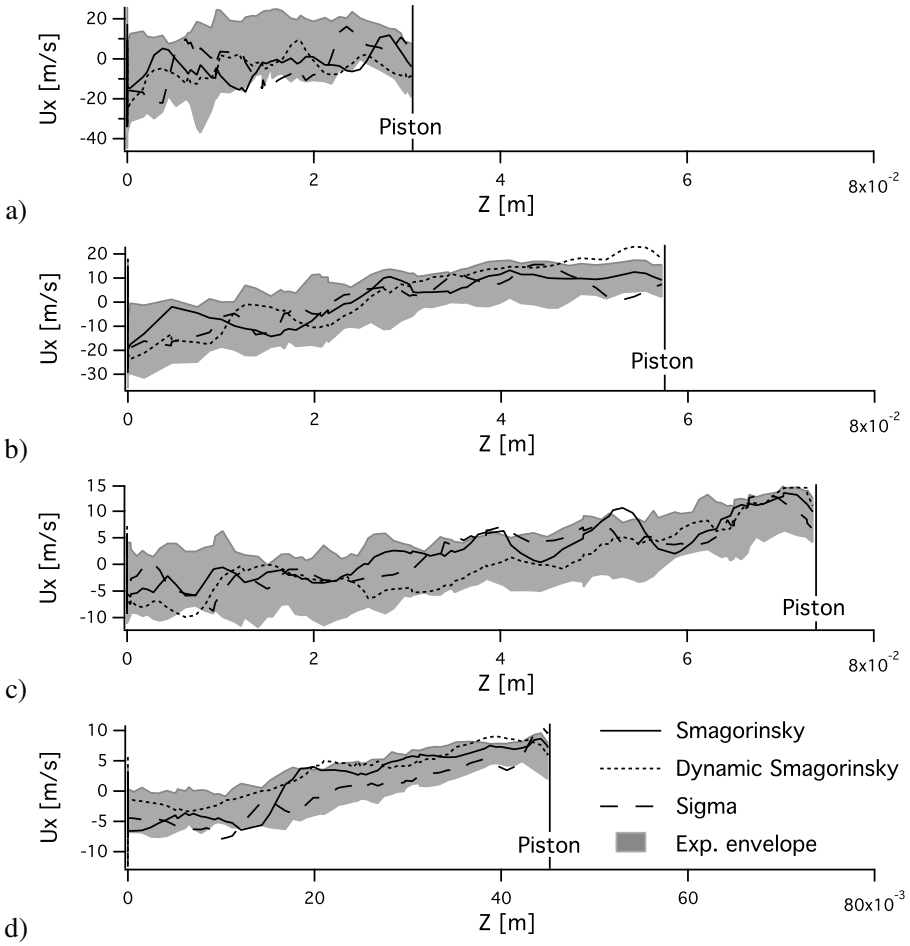


FIG. 3.21: F7P engine : x-velocity profiles along the cylinder axis for the constant Smagorinsky, dynamic Smagorinsky and sigma SGS models at -280 CAD (a), -240 CAD (b), -180 CAD (c) and -100 CAD (d). The experimental envelope is extracted from [50]. The abscissa $z = 0$ corresponds to the bottom of the cylinder head.



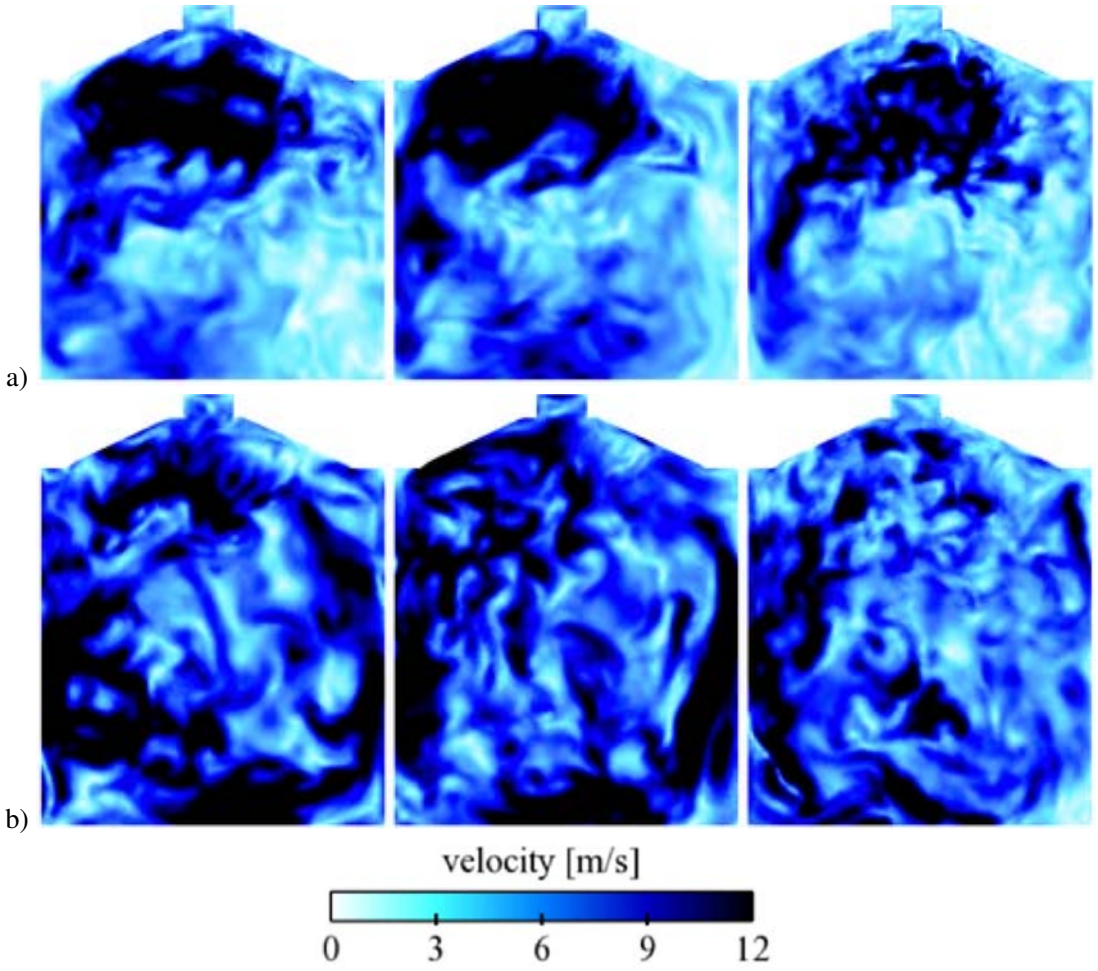


FIG. 3.22: F7P engine : velocity fields at cylinder center for the constant Smagorinsky (left), dynamic Smagorinsky (middle) and sigma (right) SGS models at different crank angles : -240 CAD (a) and -180 CAD (b).

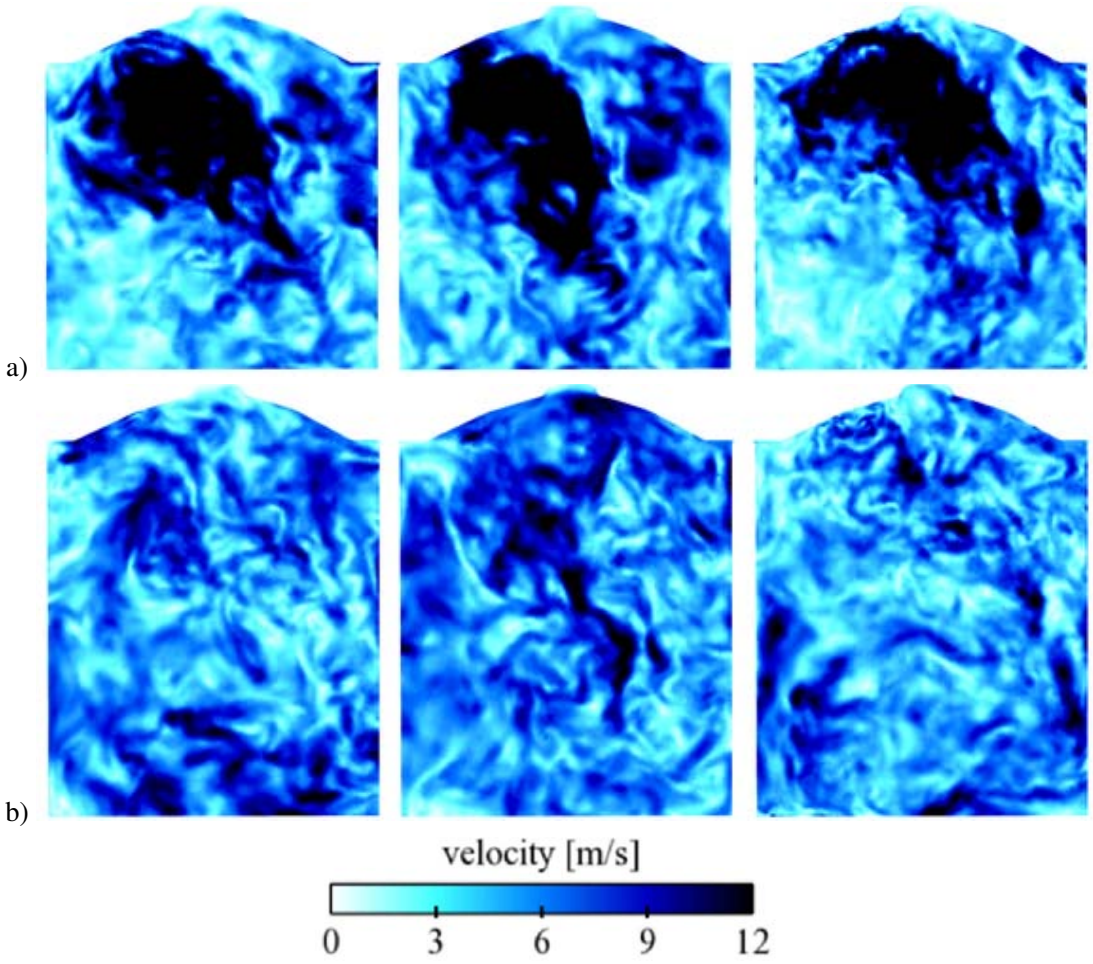


FIG. 3.23: Ecosural engine : velocity fields at cylinder center for the constant Smagorinsky (left), dynamic Smagorinsky (middle) and sigma (right) SGS models at different crank angles : -240 CAD (a) and -180 CAD (b).



The analysis of the velocity profiles thus do not allow us to draw conclusions since variations remain in CCV envelopes. Cut-planes shown in Fig. 3.22 and 3.23 permit a slightly different analysis. Large scale motions are very close for the three models and the overall resolved kinetic energy decays presented in Fig. 3.24 are comparable all along the intake and compression strokes, but slight differences appear with the sigma closure. This model indeed leads to more distorded velocity fields with smaller structures, indicating that the kinetic energy may not be distributed spatially in the same way as for the other models.

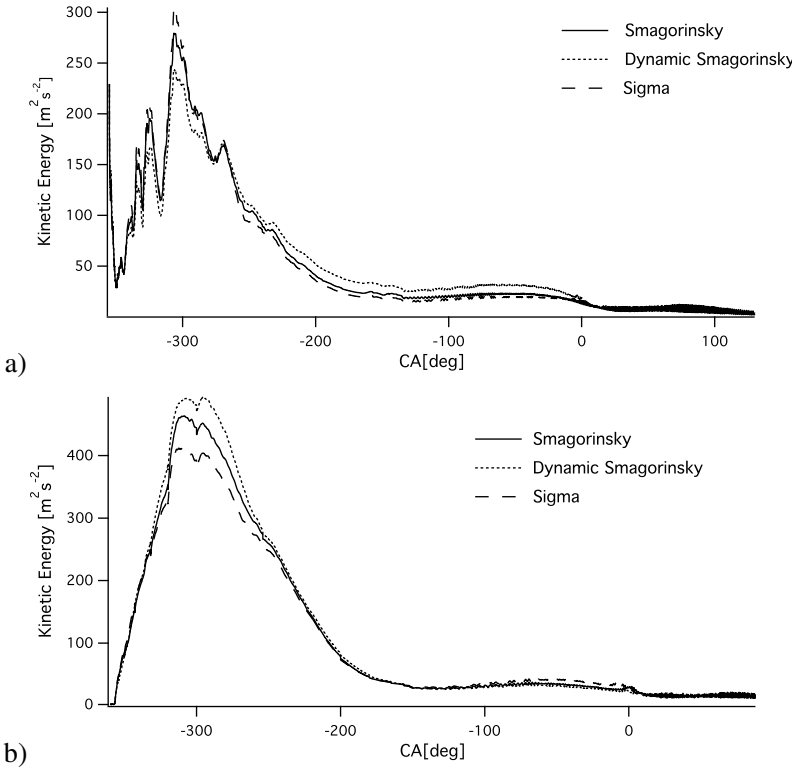


FIG. 3.24: Resolved kinetic energy evolution during the engine cycle for the three SGS models : (a) F7P engine, (b) Ecosural engine.

This behavior can be attributed to a lower turbulent viscosity level of the sigma model, as illustred in Fig. 3.25. This low viscosity was expected since sigma has been built to avoid an over-estimation of the SGS turbulence in shear layers and in solid rotation zones such as tumble in this case [132]. All these statements are confirmed by the Ecosural simulations, which exhibit the same qualitative trends for all physical quantities although operating conditions and engine design highly differ from the F7P.

Regarding the dynamic Smagorinsky model, it should be noticed that the mean in-cylinder constant, presented in Fig. 3.26, is very close to the reference value 0.18 of the classical formulation during the intake stroke and progressively differs along the compression, where it increases up to 0.22 for the F7P and 0.25 for the Ecosural due to the effect of the walls. The fact that this increase is lower for the F7P configuration explains why the two Smagorinsky models present more comparable velocity fields than for the Ecosural engine (Fig. 3.22 and 3.23). In this last case all the fields have indeed very different



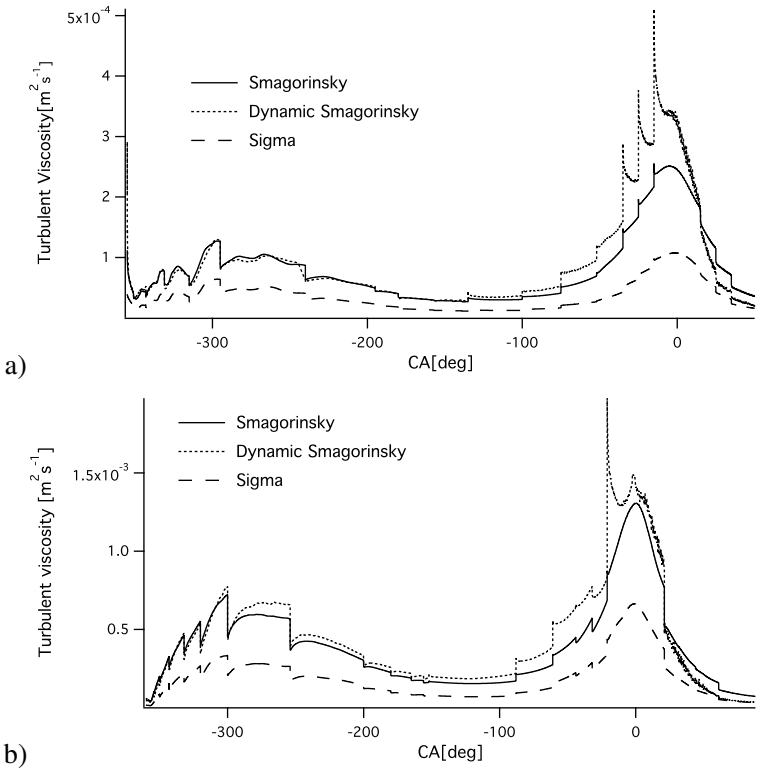


FIG. 3.25: Mean turbulent viscosity in the cylinder for the three SGS models : (a) F7P engine, (b) Ecosural engine.

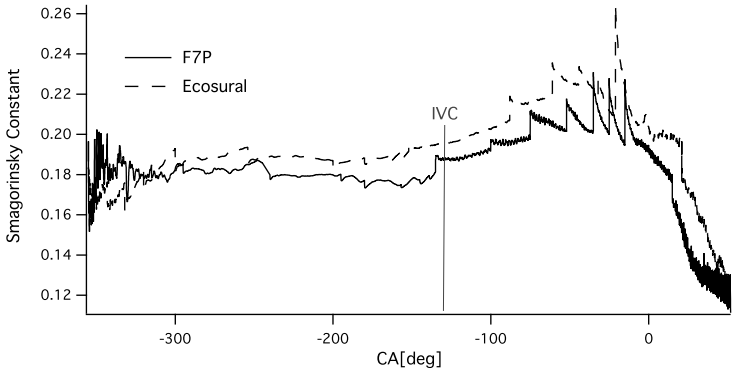


FIG. 3.26: Mean dynamic Smagorinsky model constant in the cylinder for the two engines.

shapes. Therefore, it should not be considered as a general conclusion that Smagorinsky and dynamic Smagorinsky simulations result in a comparable resolved flow before ignition.

Another important finding of this study is that even if the SGS viscosity is lower for sigma than for the Smagorinsky models (Fig. 3.25), the corresponding resolved kinetic energy is not necessarily



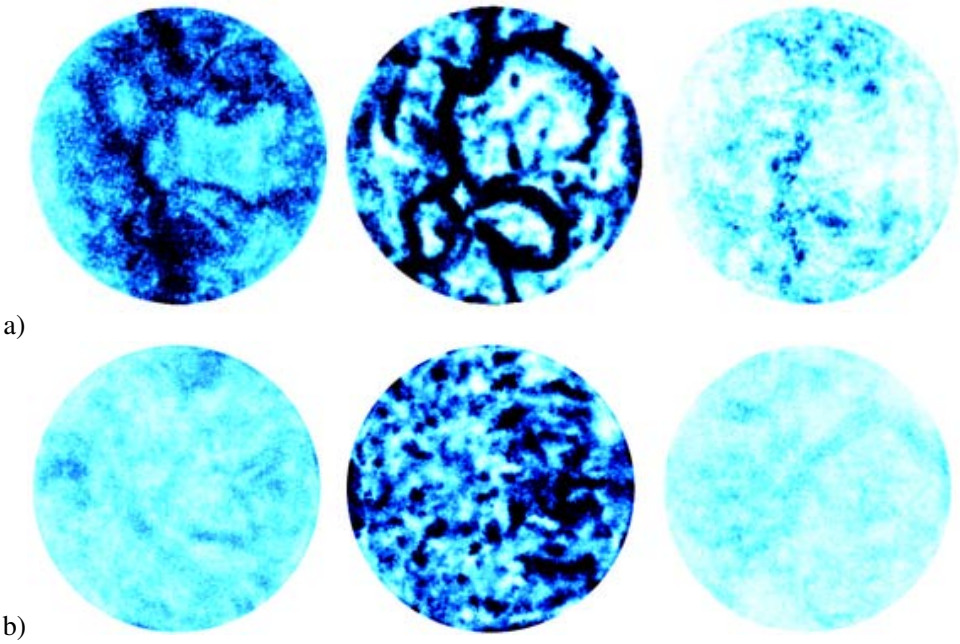


FIG. 3.27: SGS viscosity fields for Smagorinsky (left), dynamic Smagorinsky (middle) and Sigma (right) at the piston surface for the three SGS models. F7P engine (a) and Ecosural engine (b).

higher (Fig. 3.24). An explanation is that smaller structures induced by the use of sigma are more easily dissipated, while models characterized by a higher SGS viscosity may lead to more organized large scale motions with a greater life-time. In practice both phenomena (small scale and SGS dissipation) will compete and it is difficult to know a priori which one will dominate.

A last result concerns the dynamic Smagorinsky model, which exhibits very high levels of SGS viscosity at the walls compared to other closures, as shown in Fig. 3.27. This observation remains true for both engines and is coherent with the mean in-cylinder constant level at the end of compression. Such a behavior is not physical and may be related to a lack of grid resolution at the walls. Its influence on combustion will be discussed in the following section.

3.2.5.3 Combustion stroke

The flame surface with sigma is higher than those from the Smagorinsky models for the two engines as shown in Fig. 3.28 and 3.29. This statement remains true at both resolved and SGS levels, even if the resolved surface is more important. This behavior may first be related to the velocity field resolution, which presents more and smaller turbulent structures for sigma. This closure also allows to reduce diffusive fluxes within the reaction zone, which potentially allows a better resolution of flame-turbulence interactions even if the velocity field is the same. This last statement was however not verified in this study.

A further analysis of the flame surface evolution of the F7P engine shows that the dynamic Smago-



rinsky model rapidly leads to resolved and SGS quantities close to those of sigma as soon as the flame starts interacting with the walls. This may be linked to the high (and unphysical) values of SGS viscosity in these regions, implying a rapid increase of the SGS wrinkling through the efficiency function of the TFLES model. This tendency is not recovered with the Ecosural engine, for which the heat release remains weaker for the dynamic model than for sigma all along the cycle. Therefore, it should not be considered that these two models have in general comparable behaviors. Despite these discrepancies between the SGS models in terms of flame surface, the associated in-cylinder pressure curves exhibit limited differences in the free propagation phase and globally stay within the experimental envelop of the F7P all along the cycle, as shown in Fig. 3.30. Only the sigma model leads to a slight overestimation of the pressure during flame kernel expansion, but its evolution is then close to the dynamic model one, which is coherent with previous findings on flame surfaces. Cylinder pressure curves from the Ecosural engine are not presented since no experimental data, and especially pressure envelopes, are available. This quantity thus does not bring additionnal information compared to flame surface evolutions.

To conclude this section, it can be stated that SGS models do not have a huge impact on global quantities such as the flow kinetic energy during intake and compression or the global heat release in the free flame propagation period. Sigma allows a slightly better resolution of flame-turbulence interactions and could be preferred to the classical Smagorinsky model. On the contrary the dynamic model shows non-physical behaviors at the walls at the end of compression and during combustion. It may thus be avoided to guaranty that flame propagation is not perturbed by this phenomenon in the two last phases of the combustion process.

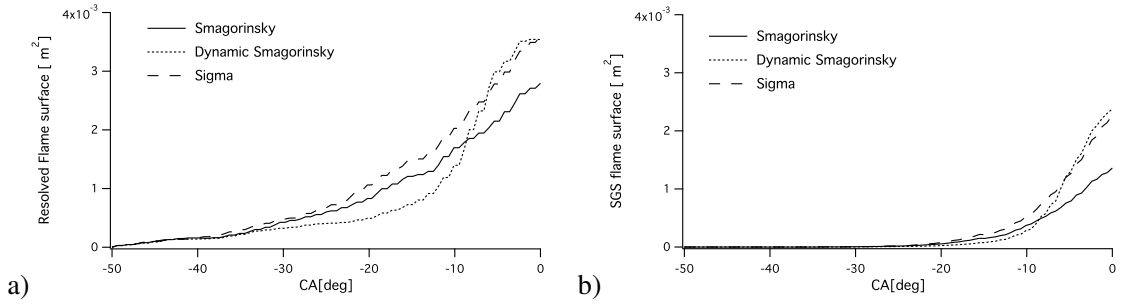


FIG. 3.28: F7P engine : resolved (a) and SGS (b) flame surface for Smagorinsky, Dynamic Smagorinsky and Sigma models.

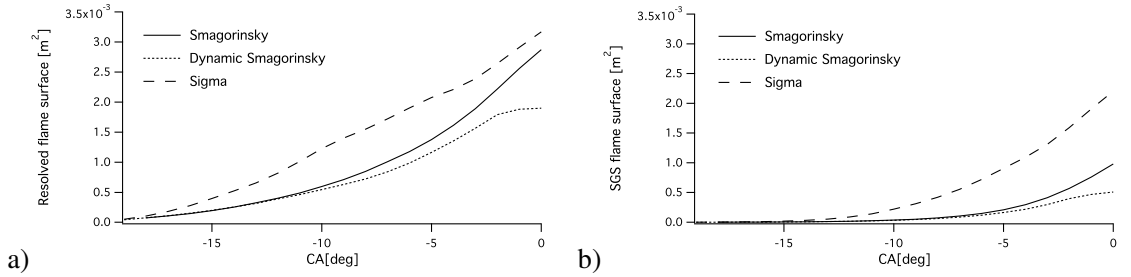


FIG. 3.29: Ecosural engine : resolved (a) and SGS (b) flame surface for Smagorinsky, Dynamic Smagorinsky and Sigma models.



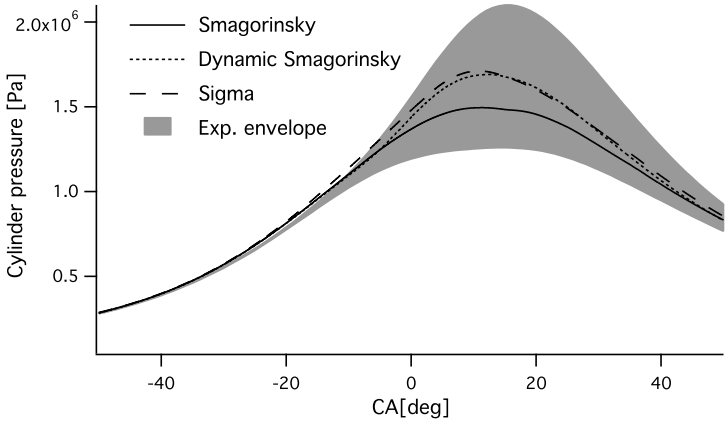


FIG. 3.30: F7P engine : mean in-cylinder pressure for Smagorinsky, Dynamic Smagorinsky and Sigma models. Experimental envelop is extracted from [50].

TAB. 3.10: Restitution time for the different SGS models normalized by the Smagorinsky restitution time (convection scheme : LW).

	F7P	Ecosural
Smagorinsky	1	1
Dynamic Smagorinsky	1.05	1.07
Sigma	0.99	1.002

3.2.5.4 Restitution times

In terms of numerical costs, the SGS turbulence models used have no major impact as reported in Table 3.10. Only a small increase of the order of 5% is found for the dynamic Smagorinsky model which was expected because of the extra calculation needed to compute the constant. The choice of the SGS model may thus be more guided by stability and physical behavior criteria than computational ressources considerations.

3.2.6 Evaluation of a new hybrid approach

Numerical schemes were evaluated in Section 3.2.4 and presented a limited influence on the flow evolution during the intake and compression strokes, even if TTG schemes allowed a slightly better resolution of the velocity field. This may partly be explained by the well-refined LES grids used in this study allowing to directly capture the main part of the flow energy on the mesh. This is also because large structures are found during intake and compression, and the tumble motion breakdown process, which produces small scale turbulence, mainly occurs at the end of compression and in the first instant of combustion. On the contrary, huge discrepancies were observed during combustion, where higher order schemes permitted a higher resolution of the flame wrinkling on the grid, due to an improved description of flame-turbulence interactions. Nevertheless, the computational cost of TTG schemes (almost twice the cost of LW) makes the use of these high order schemes unrealistic in practice.



Starting from these conclusions, a natural idea is to split the engine cycle in two separate parts, namely intake-compression and combustion, and to use dedicated numerical set-up for each one to optimize both precision and CPU cost. Therefore, TTGC may be used during combustion, while LW may be retained for the rest of the cycle (intake, compression, end of expansion and exhaust).

However it is important to keep in mind that this hybrid approach is limited to homogeneous cases. In very heterogeneous configurations like direct injection of fuel or controlled auto-ignition, TTGC could be activated during engine compression to keep a good resolution of temperature and mixture stratifications, phenomena which are of first order in such cases.

The proposed hybrid approach is called ESO_2 (Engine Stroke Optimal Order), and is analyzed in the following using once again the two engine configurations presented in Section 3.2.3.2. For each engine, all simulations are performed keeping the same constant $\beta = 0.3$ in the efficiency function of the TFLES model in order to perform fair comparisons. The SGS closure used in this part is the constant Smagorinsky model.

3.2.6.1 Flow motion during combustion

For an ESO_2 calculation, TTGC is imposed only 2 CAD before ignition (i.e. from -52 CAD for the F7P engine and -22 CAD for the Ecosural engine). This period prior to ignition corresponds to a too short time interval for affecting the velocity field at ignition as shown in Fig. 3.31 (respectively Fig. 3.32) where ESO_2 and LW velocity fields are very similar at -50 CAD (respectively -15 CAD) for the F7P engine (respectively Ecosural engine). Engine flow motion differences are thus only analyzed during the combustion phase in this section.

During the whole free propagation phase, a memory effect is clearly visible on the velocity field of the ESO_2 computation. Indeed, the ESO_2 field looks like the LW one during the first instant of the flame propagation and the TTGC simulation still presents more turbulent structures than the two other cases. During the flame growth, combustion has an important effect on the flow because of the fast thermal expansion of burnt gases and higher differences are obtained between LW and ESO_2. At the end of the free propagation phase, close to TDC, the ESO_2 velocity field even presents small eddies and is more comparable to the TTGC one. This statement remains true for both engines and is confirmed by Fig. 3.31 and 3.32 which show a slightly lower dissipation during combustion with the hybrid method than for LW and ESO_2 levels gradually join those of the full TTGC run.

3.2.6.2 Flame propagation process

Evolutions of the resolved and SGS flame surfaces are plotted in Fig. 3.33 and 3.34 for the two engine configurations. During the free propagation phase, the resolved surface associated to ESO_2 is higher than the LW one and is more comparable to a full TTGC simulation. However, as described previously, the LW and ESO_2 cases have flow fields which differ from the TTGC one, especially close to the spark plug. Flame-turbulence interactions are thus deeply affected and comparisons between ESO_2 and TTGC can not be directly performed. The ESO_2 cycle may indeed be considered as a numerical perturbation of a full TTGC engine cycle during the first part of the cycle (intake and compression).

At the SGS level, TTGC and ESO_2 also give higher surfaces than LW. This is notably due to their higher resolved flame surface which is used to compute the efficiency level. Nevertheless, whatever the scheme used, the SGS surface stays lower than the resolved surface, confirming the good quality of the



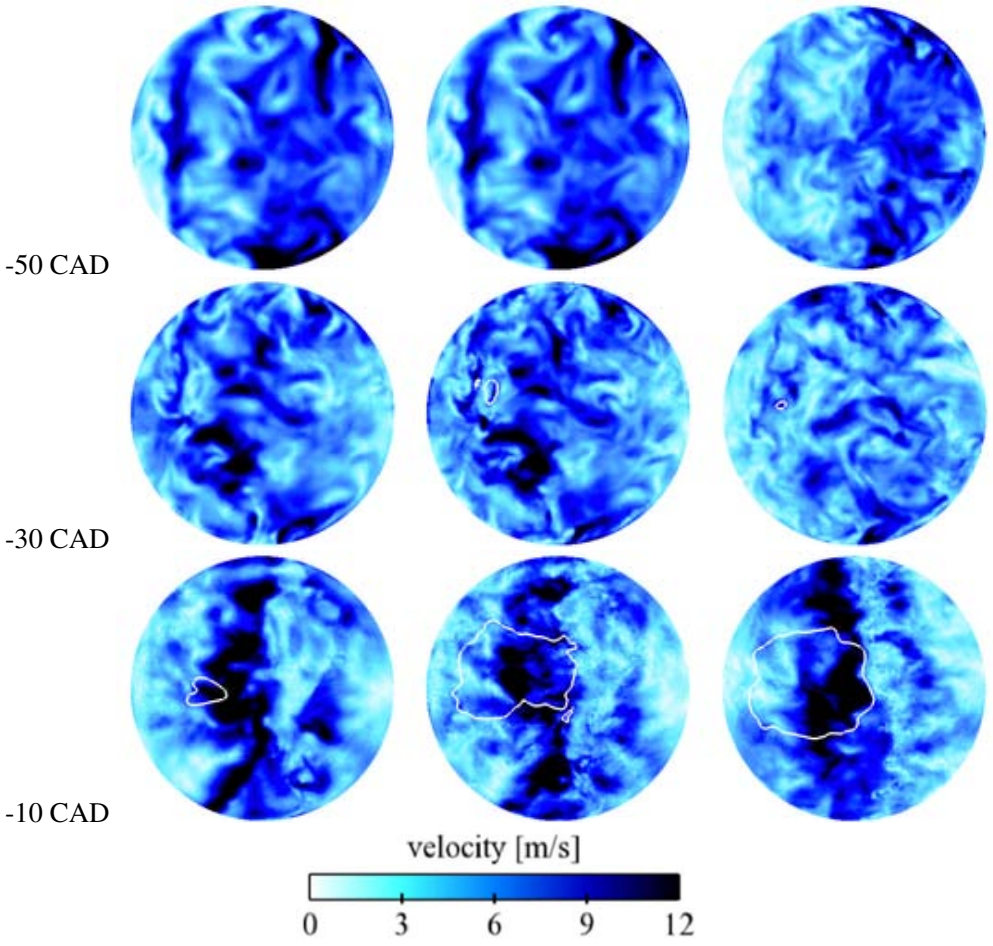


FIG. 3.31: F7P engine : velocity fields with iso-contours of progress variable at different CA for LW (left), ESO_2 (middle) and TTGC (right).

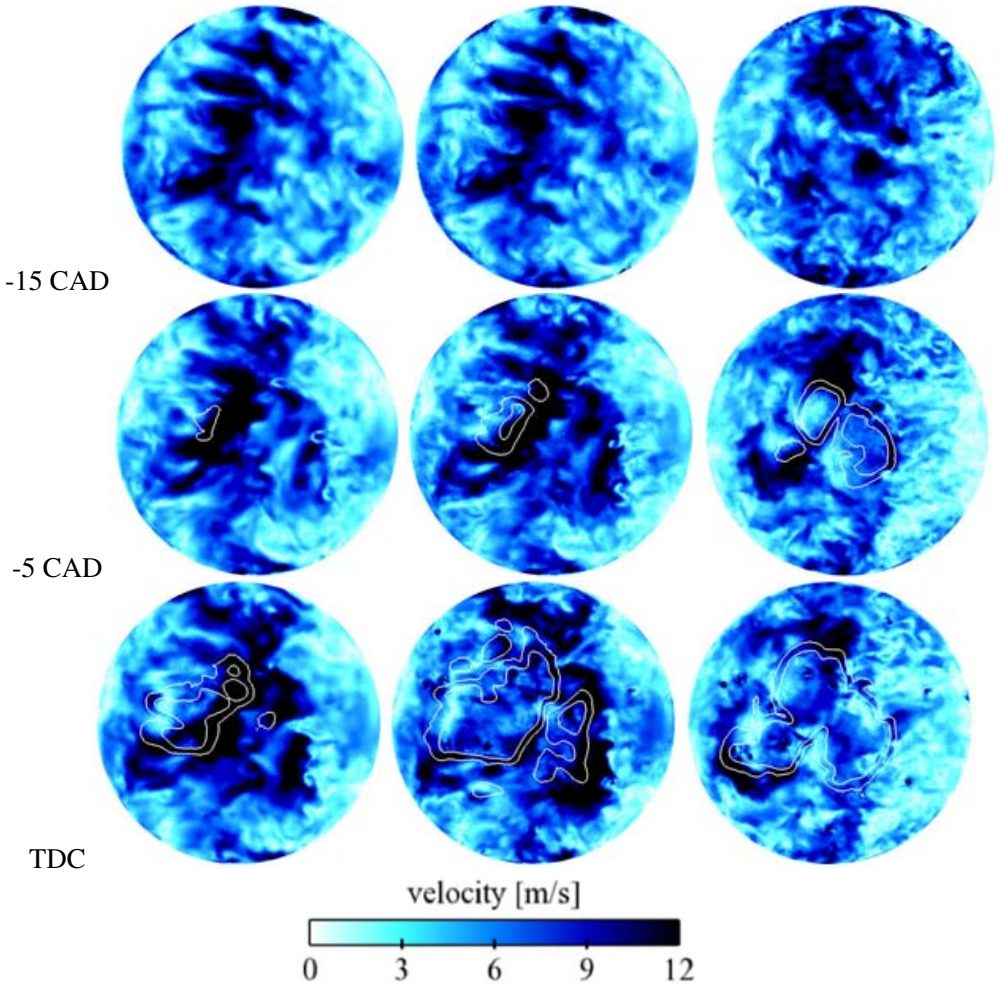


FIG. 3.32: Ecosural engine : velocity fields with iso-contours of progress variable at different CA for LW (left), ESO_2 (middle) and TTGC (right).



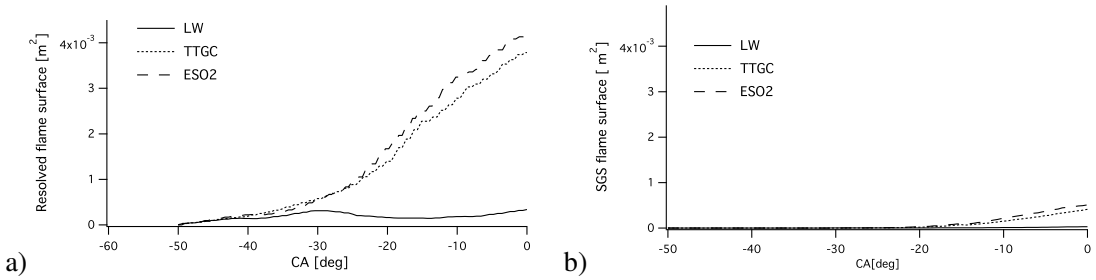


FIG. 3.33: F7P engine : resolved (a) and SGS (b) flame surface for LW, ESO_2 and TTGC.

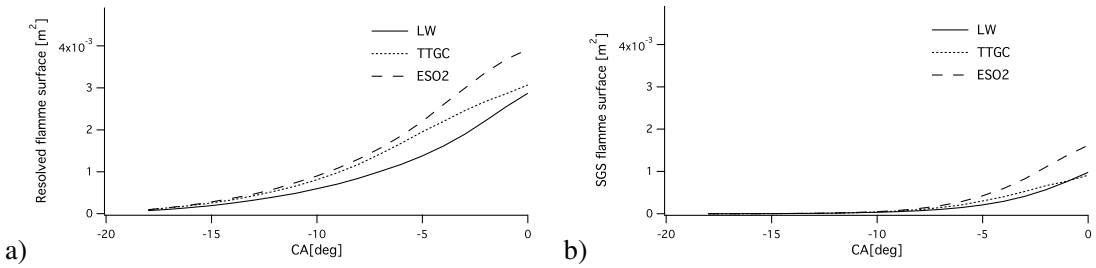


FIG. 3.34: Ecosural engine : resolved (a) and SGS (b) flame surface for LW, ESO_2 and TTGC.

computational grid used in the two configurations.

The analysis of progress variable iso-surfaces based on fuel concentrations, plotted at different crank angles in Fig. 3.35 and 3.36, reinforces previous conclusions. On the Ecosural engine, it is particularly striking to notice that the ESO_2 flame shape remains very close to the LW case which underlines the impact of the velocity field history effect at spark timing on flame-turbulence interactions. However, the propagation is faster for ESO_2 than for LW, and the flame expansion velocity is close to the TTGC case leading to similar cylinder pressure curve evolutions as shown in Fig. 3.37. This observation corroborates the idea that the ESO_2 calculation can be view as a "perturbed" TTGC engine cycle.

3.2.6.3 CPU time

All the achieved simulations include intake, compression and combustion phases. In other words, no more than about half a cycle is simulated (from -355 CAD to 50 CAD for the F7P configuration, and from -360 CAD to 88 CAD for the Ecosural configuration). In order to evaluate the potential CPU costs improvements associated to ESO_2, an extrapolation is performed over a whole cycle assuming a TTGC-LW switch when the combustion ends, i.e. at 50 CAD (resp. 90) for the F7P (resp. Ecosural) configuration. The estimated restitution times are given in Table 3.11.

The CPU cost of ESO_2 is reduced by about 80 to 90% compared to TTGC due to the low combustion duration. Thus, the obtained CPU time remains in line with previous engine LES, while an increased precision can be expected. The proposed hybrid approach finally appears promising for LES studies of industrial configurations.



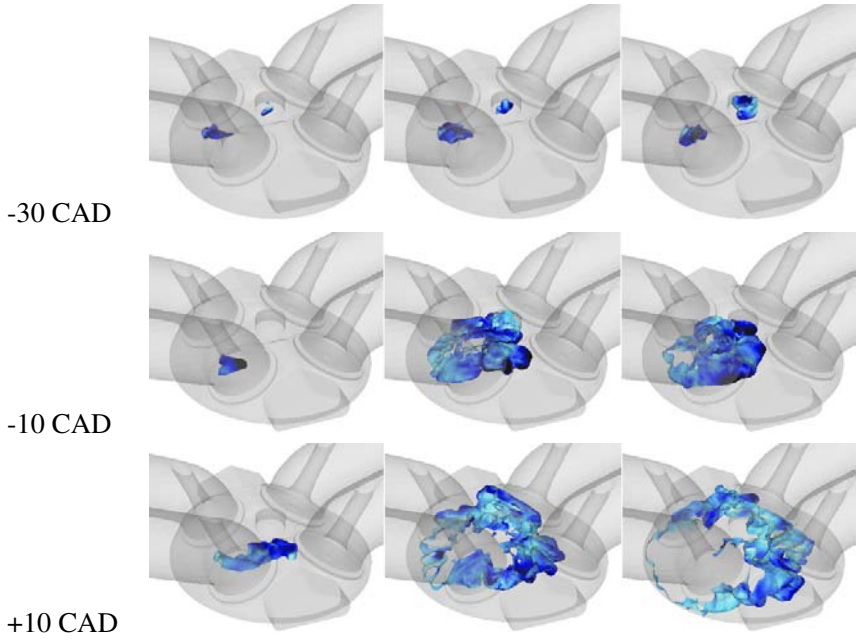


FIG. 3.35: F7P engine : progress variable iso-surface at different CA for LW (left), ESO_2 (middle) and TTGC (right).

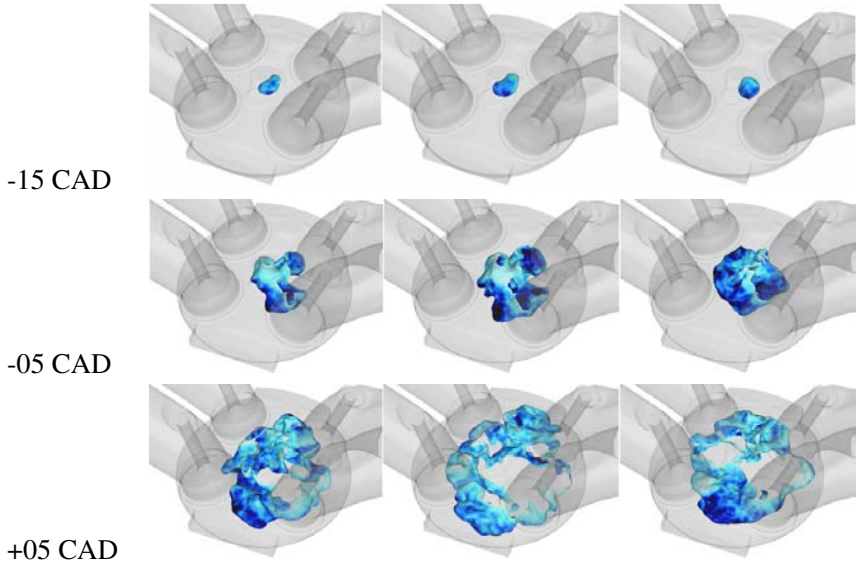


FIG. 3.36: Ecosural engine : progress variable iso-surface at different CA for LW (left), ESO_2 (middle) and TTGC (right).



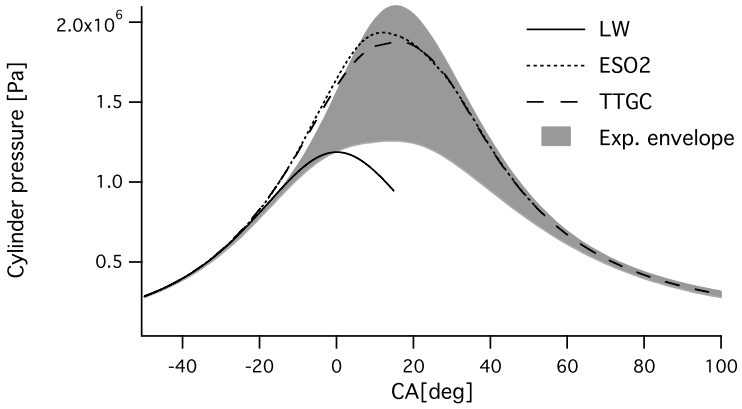


FIG. 3.37: F7P engine : mean in-cylinder pressure for TTGC, LW and ESO_2.

TAB. 3.11: Estimated restitution times normalized by the LW restitution time. The constant coefficient Smagorinsky model is used for all cases.

	F7P	Ecosural
LW	1	1
ESO_2	1.08	1.15
TTGC	1.84	1.82

3.2.7 Conclusion

The objective of this study was to evaluate the feasability and the possible benefits of using high order schemes and state-of-the-art SGS models in LES of ICE. For this purpose a first part was dedicated to the comparison of two convective schemes from the Taylor-Galerkin family, namely TTGC and TTG4A with the classical Lax-Wendroff one. Numerical findings indicate that all set-up lead to similar evolutions of the flow properties (kinetic energy, SGS viscosity) during compression and intake even if slightly more turbulent structures were found for TTG schemes. On the other hand, the free flame propagation phase exhibited completely different behaviors between the schemes. A good flame-turbulence interaction prediction with TTG schemes enables the use of the classical low efficiency constant ($\beta = 0.3$) while the higher dissipation of LW had to be balanced by an increased of this constant ($\beta = 2$). Because of this lower importance of the modeling contribution, TTG schemes are preferred to increase the precision in further studies. However, the counterpart of this increased precision is a higher restitution time (almost twice the cost of LW).

In a second part, several SGS turbulence models were compared, namely the constant coefficient and dynamic Smagorinsky and the Sigma closure, keeping the Lax-Wendroff scheme for all simulations. It was shown that the sigma model allows a slightly better resolution of the velocity field because of a lower SGS viscosity without additionnal CPU time. On the contrary the dynamic Smagorinsky model generates high viscosity levels, especially at the walls, which is not a physical behavior, with a small increase (about 5%) of computational times. Nevertheless, discrepancies between the models were low and all quantities remained in the CCV envelopes, suggesting that the change in SGS closure mainly acts



like a numerical perturbation of the flow.

Finally a new hybrid approach is evaluated to take advantage of the better precision of TTGC without being penalized by too large CPU times. This new approach, called ESO_2 (Engine Stroke Optimal Order) consists in using LW during intake and compression, where differences with TTGC are low, and TTGC during combustion to better resolve the flame. Results were very close to TTGC, with a reasonable increase of the CPU cost (about 10%) compared to LW. The fact that similar findings were obtained for both engine configurations, operating in very different conditions, may confer them a general character, even if statistics should be necessary to draw definitive conclusions. Finally, ESO_2 appears as a promising method for future LES studies of ICE. This approach may be ideally used with the Sigma model. However, first tests indicate that combining Sigma with TTGC may lead to numerical instabilities because of the very low levels of viscosity introduced in this case. As the constant coefficient Smagorinsky model gave results quite close to those of Sigma, it could also be retained for future practical applications in complex geometries.

3.2.8 Acknowledgments

This work was granted access to the HPC resources of CCRT under allocations 2012-026139 and 2012-026074 made by GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif).

Appendix : SGS models

In the compressible AVBP solver, the filtered Navier-Stokes equations are solved. The application of the filtering operation to the instantaneous set of compressible Navier-Stokes equations leads to the following equations which contain some SGS quantities that need modeling :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{Y_k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}\tilde{Y_k}\tilde{u_i}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{J_{k,i}} + \overline{J_{k,i}^{SGS}}\right) \tag{3.23}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\tilde{u_i}\tilde{u_j}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(P\delta_{ij} - \overline{\tau_{i,j}} - \overline{\tau_{i,j}^{SGS}}\right) \tag{3.24}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{e_t}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\tilde{e_t}\tilde{u_j}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{u_i(P\delta_{ij} - \tau_{i,j})} - \overline{q_{i,j}} - \overline{q_{i,j}^{SGS}}\right) \tag{3.25}$$

where Einstein notation is used. Here the index k is reserved to refer to the kth species and does not follow the summation rule. The following symbols ρ, Y_k, u_i, J, e_t, P, τ_{ij} and q_{ij} denote respectively the density, the species mass fractions, the velocity vector, diffusions fluxes, the total energy per unit mass, pressure, the stress tensor and heat fluxes. A large variety of modeling can be found in the literature for the closure of the SGS stress tensor τ_{ij}^{SGS} :

$$\tau_{ij}^{SGS} = -\bar{\rho}\left(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u_i}\tilde{u_j}\right) \tag{3.26}$$



The present article focuses on three eddy viscosity based models (Eq. 3.27), namely Smagorinsky and its dynamic version as well as the Sigma closure :

$$\tau_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3}\tau_{kk}^{SGS}\delta_{ij} = 2\rho\nu_{SGS}\widetilde{S_{ij}} \tag{3.27}$$

where ν_{SGS} is the SGS viscosity given in a generic form by :

$$\nu^{SGS} = C_{op}^2\Delta^2 D_{op} \tag{3.28}$$

with C_{op}^2 a model constant, Δ the mesh size and D_{op} the model operator.

3.2.8.1 Static models

- Smagorinsky model [126] :

$$D_{op} = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \tag{3.29}$$

  where S_{ij} is the Reynolds tensor.
- Sigma model [132] :

$$D_{op} = \frac{\sigma_3(\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma_2 - \sigma_3)}{\sigma_1^2} \tag{3.30}$$

  where the σ_i are the singular values of the velocity gradient tensor of the resolved scales.

3.2.8.2 Dynamic procedure

The dynamic procedure is introduced to determine the model constant in order to account for the local mesh size and the turbulence intensity. This coefficient is obtained within the simulation and is no more a user defined variable. The expression from which C_{op} is obtained stems from the Germano inequality and follows Lilly's procedure [82] :

$$D_{op} = \frac{1}{2}\frac{L_{ij}M_{ij}}{M_{ij}M_{ij}} \tag{3.31}$$

In the previous expression, the following tensors are defined by :

$$M_{ij} = \hat{\Delta}\sqrt{2\left\langle\widetilde{S_{ij}}\right\rangle\left\langle\widetilde{S_{ij}}\right\rangle\left\langle\widetilde{S_{ij}}\right\rangle} \tag{3.32}$$

$$L_{ij} = <\tilde{u_i}><\tilde{u_j}> - <\tilde{u_i}\tilde{u_j}> \tag{3.33}$$

and introduce the notion of « test » filter of characteristic length $\hat{\Delta}$ equal to the cubic root of the volume defined by all the cells surrounding the cell of interest.



3.3 Outils d'analyse du couplage acoustique / chimie pour les combustions anormales.

Les deux parties précédentes ont détaillé les développements effectués durant cette thèse au niveau du couplage entre les modèles numériques, mais également au niveau de la configuration numérique utilisée dans les calculs moteur. Cette dernière partie est quant à elle consacrée à la mise en place des post-traitements en lien avec les combustions anormales, et notamment l'étude des interactions entre l'auto-inflammation et les ondes de pression.

En effet, l'acoustique semble jouer un rôle important dans le déroulement des combustions anormales en moteur automobile. Ainsi, depuis quelques années, différents travaux de recherches ont été publiés pour étudier ces phénomènes, et notamment Bradley & al. [14] qui proposent un diagramme déterminant les conditions d'apparition d'une transition vers la détonation ou "developing detonation".

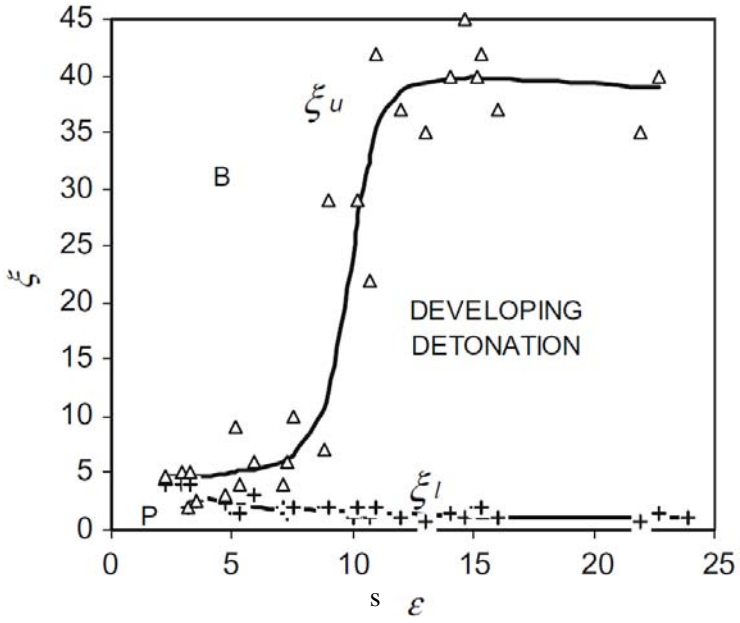


FIG. 3.38: Diagramme de Bradley [14].

Basé sur des calculs DNS, représentés par les symboles (triangles et croix) sur la figure 3.38, Bradley & al. proposent ce diagramme permettant de se positionner à partir des deux paramètres ε et ξ dans une zone de déflagration ou de "developing detonation".

Paramètre de réactivité ε
Le premier paramètre ε, appelé paramètre de réactivité, s'exprime :

$$\varepsilon = \frac{l/c}{\tau_e} \tag{3.34}$$

l est une longueur caractéristique de l'AI correspondante à la distance sur laquelle l'AI peut se propager,



et c la vitesse du son dans les gaz frais. La variable τ_e représente le temps d'excitation, qui correspond au temps nécessaire pour passer de 5% au maximum du dégagement de chaleur de l'AI comme illustré par la figure 3.39.

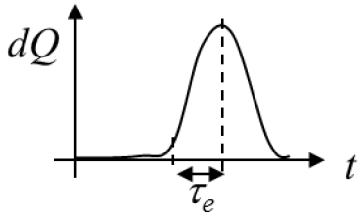


FIG. 3.39: Illustration du temps d'excitation τ_e.

Ce paramètre ε s'apparente donc à une condition d'émission d'une onde de pression générée par l'AI dans la chambre de combustion. En effet, pour qu'il y ait formation d'une onde de pression, le temps l/c pour que celle-ci sorte de la zone d'AI doit être très grand devant le temps de dégagement de chaleur par l'AI τ_e. Ceci amène donc à la relation $\varepsilon = \dfrac{l/c}{\tau_e} >> 1$.

Paramètre de résonance ξ

Le paramètre ξ, appelé aussi paramètre de résonance, est donné par l'expression :

$$\xi = \frac{c}{u} = \frac{c}{\frac{\partial \tau}{\partial x}} \tag{3.35}$$

avec c la vitesse du son dans les gaz frais, u la vitesse de propagation de l'AI et τ le délai d'AI local.
La formation d'une détonation nécessite un couplage entre le front de réaction et l'onde de pression qui s'auto-alimentent. Ces deux phénomènes doivent alors se propager à des vitesses proches, et le paramètre ξ compare ainsi la vitesse du son c (et donc de l'onde de pression) à la vitesse u de propagation de l'AI. Cette dernière peut s'exprimer dans un cas homogène en fonction du gradient spatial de délai d'AI $\frac{\partial \tau}{\partial x}$, et dépend directement du gradient de température. En effet, dans des conditions considérées comme homogène, le délai d'AI est étroitement lié à la température locale, mais il est important de garder en tête que dans un cas plus général, ce délai dépend également de la richesse et de la dilution des gaz.
Différents scénarii d'AI sont envisageables en fonction du gradient de température présent au voisinage du départ en AI :

- ✓ **Fort gradient de température :**
  Dans ce cas, le gradient de délai d'AI sera très fort, et l'AI aura des difficultés pour se propager de proche en proche. On obtient ainsi la relation $\frac{\partial \tau}{\partial x} << c$ et donc $\xi >> 1$. Aucun couplage n'est possible vu que l'onde de pression se déplace beaucoup plus rapidement que le front d'AI.

- ✓ **Gradient de température négligeable :**
  Le front d'AI est infiniment rapide, et tout le volume des gaz frais s'auto-inflamment instantanément, sans possibilité de couplage avec l'onde de pression. On est donc dans le cas d'une explosion thermique ($\frac{\partial \tau}{\partial x} >> c$ et $\xi << 1$).



✓ **Gradient de température intermédiaire :**
La situation envisagée ici est une situation dans laquelle le gradient de température est relativement faible, permettant d'avoir une vitesse de propagation de l'auto-inflammation proche de celle du son dans les gaz frais. On obtient donc la relation $\frac{\partial \tau}{\partial x} \approx O(c)$ et donc $\xi \approx O(1)$. Dans ce cas, un couplage entre l'auto-inflammation et l'onde de pression (si les conditions d'émissions sont réunies) est envisageable.

Ainsi, basé sur des calculs DNS des deux paramètres ε et ξ, Bradley & al. définissent des zones de transitions permettant de savoir si on se trouve dans les conditions de déflagration (zone B), dans la zone de "developing detonation" ou dans la zone d'explosion thermique (zone P) de la figure 3.38.

La définition des frontières reste toutefois approximative, notamment dû à l'utilisation d'un mélange H2-CO, mais également au mécanisme cinétique utilisé qui peut avoir une forte influence sur le calcul de τ_e comme ont pu le mettre en évidence Rudloff & al. [122].
Il est plus approprié de parler de zones de transition sur une plage de valeurs pour les paramètres ε et ξ. En pratique, cette transition semble s'effectuer autour d'une valeur $\varepsilon = 10$ pour le paramètre de réactivité, alors que la zone de détonation correspond à des valeurs du paramètre de couplage $5 < \xi < 40$.
De plus, un des atouts majeurs de la LES est de donner accès aux stratifications cycle à cycle dans la chambre de combustion, les paramètres ε et ξ peuvent donc être directement extraits des simulations LES en chaque point du maillage.

Cependant, localiser les régions situées dans la zone de transition vers la détonation nécessite à ce stade de croiser visuellement les deux informations fournies indépendamment par ε et ξ. Dans un esprit de simplification, l'objectif est ici de pouvoir visualiser directement, grâce à un indicateur unique fourni par les calculs LES, les régions situées dans la zone de transition vers la détonation.

Une efficacité est alors proposée pour chacun des deux paramètres grâce à des expressions basées sur des tangentes hyperboliques :

$$\eta_\varepsilon = \frac{1}{2}\left(\tanh(\varepsilon - 10) + 1\right) \tag{3.36}$$

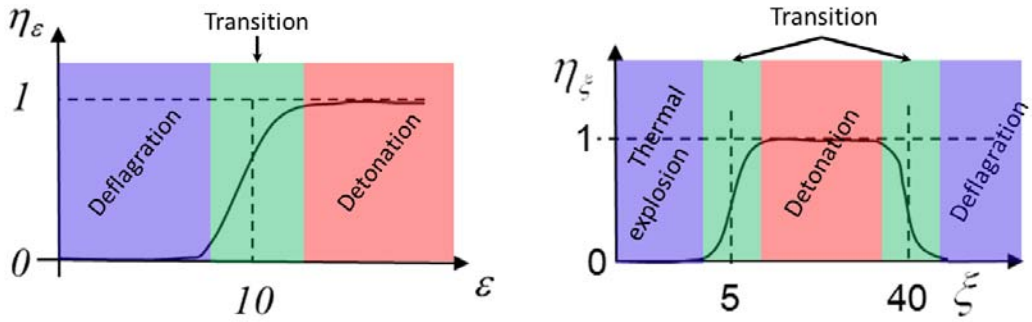
$$\eta_\xi = \frac{1}{2}\left(\tanh(\xi - 5) - \tanh(\xi - 40)\right) \tag{3.37}$$

Les profils résultants des équations 3.36 et 3.37 sont présentés respectivement sur les figures 3.40a et 3.40b. On retrouve des valeurs de η_ε et η_ξ proches ou égales à 1 pour des valeur de ε et ξ correspondantes à la zone de transition vers la détonation ($\varepsilon > 10$ et $5 < \xi < 40$).
Un indice de détonation noté $\mathbb{R}$ est alors proposé ici. Il peut être directement calculé en chaque point du maillage et correspond au produit des deux efficacités η_ε et η_ξ (Eq. 3.36 et 3.37) :

$$\mathbb{R} = \eta_\xi * \eta_\varepsilon \tag{3.38}$$

Les deux paramètres de Bradley sont ainsi regroupés en un unique indice qui est égal à 0 dans la zone de déflagration, 1 dans la péninsule de détonation et d'explosion thermique, et est compris entre ces deux extrema dans la zone de transition vers la détonation comme l'illustre la figure 3.41a. Cet indice

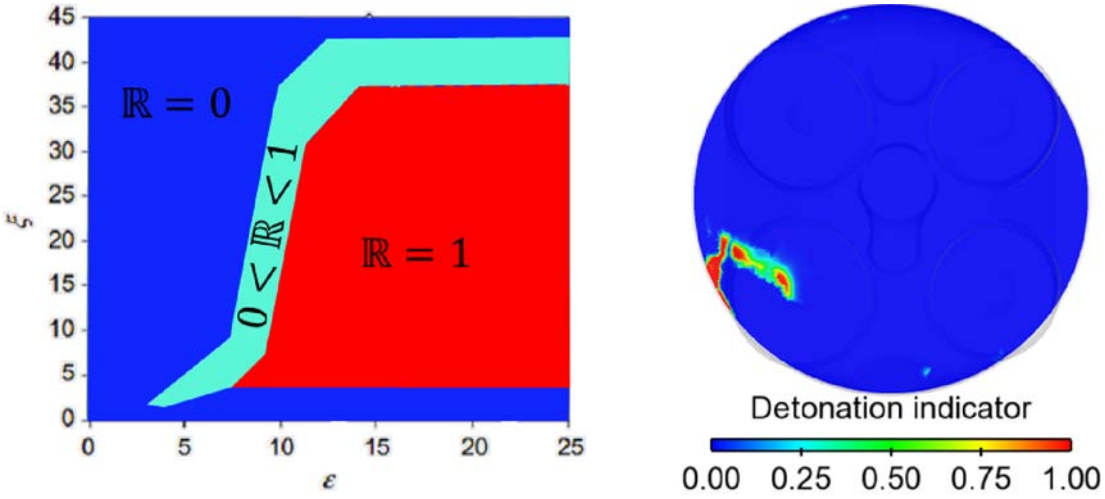




(a) Profil de η_ε (b) Profil de η_ξ

FIG. 3.40: Profils d'évolution des efficacités des deux paramètres du diagramme de Bradley.

permet ainsi de déterminer les zones dans lesquelles un couplage détonant est possible grâce à une visualisation des champs instantanés à chaque instant au cours du cycle. La figure 3.41b présente ainsi une coupe horizontale proche de la culasse coloriée par l'indice de détonation. On remarque que l'indice de détonation est nul dans la quasi-totalité de la chambre, à l'exception d'une petite zone où un couplage entre l'AI et l'onde acoustique semble s'établir. Cette image est simplement une illustration de l'intérêt de la mise en place de cette indice, dont la validation sur différents cycles et dans différentes conditions sera réalisée au §6.4.5.



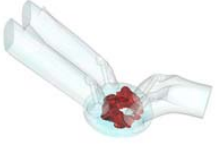
(a) Valeurs de l'indice de détonation dans le diagramme de Bradley (b) Exemple d'un calcul LES

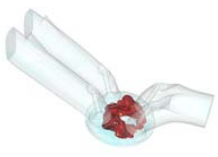
FIG. 3.41: Visualisation de l'indice de détonation dans le diagramme de Bradley, ainsi que localement sur une coupe horizontale proche de la culasse pour un cycle LES.

Une nuance doit tout de même être apportée concernant le calcul de la longueur l entrant en jeu dans le calcul du paramètre ε. Son estimation est relativement complexe, car elle nécessite de déterminer le gradient de température environnant pour chaque point du maillage et à chaque instant. Il est également



important de remarquer que le choix du paramètre l n'influence que la position horizontale des points dans le diagramme de détonation. Ce calcul est une des perspectives de ces travaux, car pour simplifier la mise en place des simulations, cette longueur a été estimée en première approximation à partir de visualisations réalisées sur les premiers cycles LES. Elle est ainsi fixée à 1cm pour l'ensemble de cette étude.





CHAPITRE

4

La base de données expérimentale ICAMDAC

Les travaux de cette thèse se réfèrent à une base de données (BDD) expérimentale réalisée dans le cadre du projet ANR ICAMDAC (Instabilités et Combustions Anormales dans les Moteurs Downsizés à Allumage Commandé). Ce projet de recherche français [3] dirigé par IFP Energies nouvelles (IFPEN), regroupe autour de la problématique des combustions anormales en moteur automobile plusieurs laboratoires (CERFACS, PRISME, IMFT) ainsi que les constructeurs français PSA Peugeot Citroën et Renault. L'objectif de cette collaboration est de mener conjointement une étude expérimentale et numérique pour aboutir à une meilleure compréhension de ces phénomènes. La BDD a ainsi été spécialement pensée pour permettre la comparaison entre les résultats expérimentaux (issus de nombreux essais balayant une large gamme de conditions moteur) et les résultats LES reproduisant certains points de fonctionnement. Cette étude a été effectuée sur un moteur suralimenté 4 temps essence comportant 4 soupapes, ce monocylindre ayant été spécialement dessiné pour l'étude des combustions anormales. Deux configurations ont été nécessaires pour caractériser dans un premier temps l'aérodynamique interne, dont l'étude expérimentale a été réalisée par D. Maligne, et ensuite la combustion dont l'étude a été réalisée par L. De Francqueville. Les principales caractéristiques de ces deux moteurs, conçus de manière relativement similaires, sont récapitulées dans le tableau 4.1.

Le nombre de points de fonctionnement de la BDD étant très grand, un choix a été effectué pour simuler uniquement certains points en LES. Les caractéristiques des points de référence sélectionnés sont détaillées dans une première partie de ce chapitre. La description de chaque configuration et le détail des données disponibles sur ces deux moteurs font l'objet des deux parties suivantes. Pour finir, les différents post-traitements communs entre l'expérience et la LES sont rappelés succinctement.



Configuration	OPTIQUE	OPAQUE
Cylindrée (cm^3)	400	400
Volume mort (cm^3)	42.8	42.2
Alésage (mm)	77	77
Course (mm)	85.8	85.8
Bielle (mm)	144	132.2
Taux de compression	10.34	10.64
Richesse	1	1
AOA/RFA à 0.7mm $(^\circ V)$	$-3/34$	7/24
AOE/RFE à 0.7mm $(^\circ V)$	$53/-4$	43/6
Combustion	NON	OUI
Hublots sur culasse	OUI	NON
Cylindre transparent	OUI	NON
Piston transparent	OUI	NON
Accès endoscopique	NON	OUI

TAB. 4.1: Caractéristiques des moteurs optique et opaque

4.1 Les points de fonctionnement choisis

L'objectif étant d'étudier les combustions anormales, deux points de la base de données (favorisant soit le cliquetis, soit le rumble) ont été choisis comme points de référence, et leurs principales caractéristiques sont regroupées dans le tableau 4.2.

Points de fonctionnement	RUMBLE	CLIQUETIS
Régime [tr/min]	1200	1800
PMI [bar]	18	19
Pression admission [bar]	1.561	1.802
Température admission [K]	306.35	308.05
AVA [°V après le PMH]	13	8

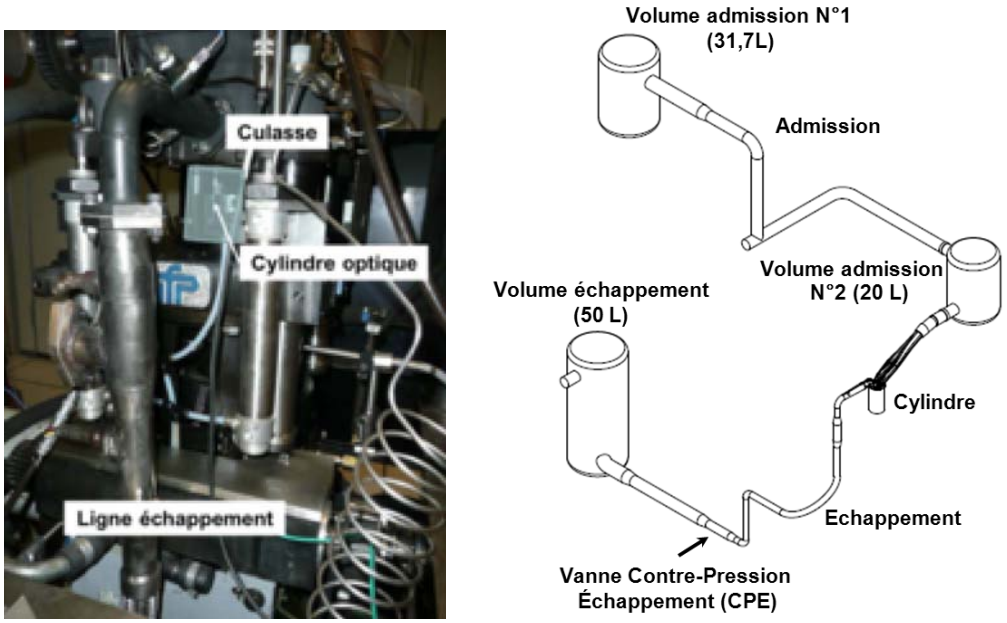
TAB. 4.2: Présentation des deux points de fonctionnement choisis dans la BDD ICAMDAC

Le phénomène de rumble apparaissant à faible régime et forte charge, un point à 1200 tr/min et 18 bars de pression moyenne indiquée (PMI) a été choisi. Pour le cliquetis, le point est également fortement chargé avec une PMI de 19 bars mais à un régime plus élevé de 1800 tr/min. Les grandeurs fournies dans le tableau 4.2 sont cependant les valeurs de référence, et de nombreuses variations ont été réalisées au sein de la BDD (Tab. 4.3). Certaines variations comme l'avance à l'allumage (AVA) seront également simulées numériquement pour valider la représentativité de la LES sur une large gamme de points moteur.



Dénomination	Régime (tr/min)	Variations mono-paramétriques	Plages de variations
Cliquetis	1800	Carburant AVA Dilution (N2 additif) Aérodynamique Transitoire rapide d'AVA	Iso-octane ou Sans Plomb 95 AVA opti +1 et 2°V, sous-calage de 0 à 25% Tumble de 1.3 à 1.45 Entre -6°V à -3°V et inversement
Rumble	1200	Carburant AVI AVA Aérodynamique Dilution (N2 additif) Température eau Température admission	Iso-octane ou Sans Plomb 95 220, 280 et 300°V -13 et -18°V Tumble de 1.3 à 1.45 0 et 10% 90 et 100°C 30,35 et 45°C

TAB. 4.3: Variation mono-paramétriques effectuées dans la BDD ICAMDAC.



(a) Banc moteur (b) CAO

FIG. 4.1: Présentation de la configuration optique étudiée expérimentalement au cours du projet ICAMDAC.

4.2 Caractérisation de l'aérodynamique : la configuration optique

La première partie de l'étude expérimentale a été menée sur moteur transparent pour obtenir une bonne caractérisation de l'aérodynamique interne. La géométrie présentée sur la figure 4.1 est composée à l'admission de deux plénums en amont du cylindre, permettant grâce à leur grand volume de tranquilli-



ser l'écoulement avant que les gaz frais ne soient admis dans le moteur. Le volume N°2 est également équipé d'une bande chauffante permettant d'imposer au fluide la température d'admission désirée. A l'échappement, une vanne de contre-pression a été mise en place entre le cylindre et le gros volume, permettant de simuler la contre-pression induite par l'utilisation d'un turbocompresseur sur les moteurs downsizés.

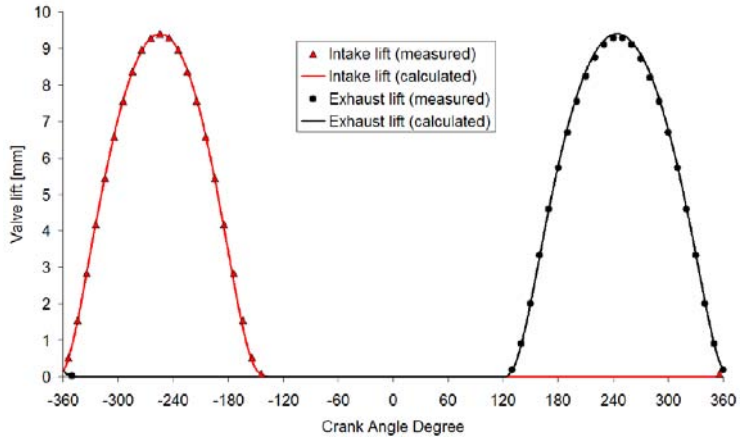


FIG. 4.2: Lois de levées des soupapes d'admission et d'échappement pour la configuration optique.

Les lois de levées de soupapes pour cette configuration sont présentées sur la figure 4.2. Le croisement de soupapes a été volontairement minimisé (la hauteur maximale de croisement est de 0.17mm), permettant de ne pas le prendre en compte dans les simulations 3D.

Concernant l'instrumentation du moteur, il est équipé d'un grand nombre de capteurs pour suivre l'évolution de la pression et de la température aussi bien dans les tubulures que dans la chambre de combustion. La pression cylindre instantanée est par exemple enregistrée au cours du temps grâce à un capteur rapide implanté dans la culasse, et peut être comparée avec la pression prédite par les calcul LES.

Enfin, le principal avantage de ce moteur est d'être équipé de différents accès optiques en quartz comme représentés sur la figure 4.3. On retrouve :

- ✓ un piston transparent pour réaliser des visualisations dans le plan passant par l'injecteur ;
- ✓ un cylindre transparent permettant le passage d'un plan laser pour la réalisation de PIV par exemple ;
- ✓ deux accès optiques de part et d'autres de la culasse (également appelés hublots) pour des visualisations au niveau du toit de culasse.

Différents diagnostics optiques ont ainsi pu être utilisés pour caractériser l'écoulement interne, à commencer par de la vélocimétrie par images de particules ou Particle Image Velocimetry (PIV) pour un fonctionnement en moteur entraîné sans injection. Dans ce cas, l'écoulement est ensemencé en particules en amont du collecteur d'admission, particules qui peuvent être suivies grâce à l'utilisation d'un plan



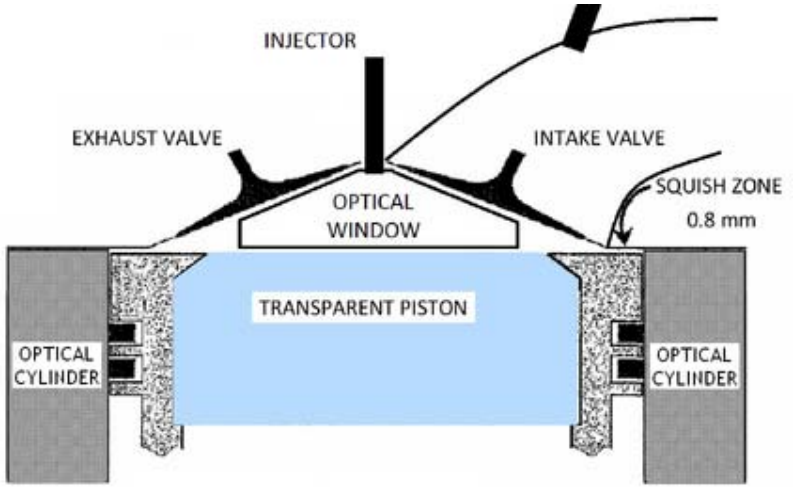


FIG. 4.3: Schéma des différents accès optiques présents sur le mono-cylindre optique du projet ICAM-DAC.

laser au travers du cylindre quartz. Une caméra placée perpendiculairement à ce plan récupère alors une image grâce à la diffusion de Mie. Après traitement des données pour corriger les réflexions du plan laser sur les parois du cylindre ou encore la courbure induite par la forme même du cylindre, l'évolution du tumble est visible en réalisant une moyenne d'ensemble sur 200 cycles moteur, i.e. une moyenne de 200 images prises à un même instant pour chaque cycle moteur.

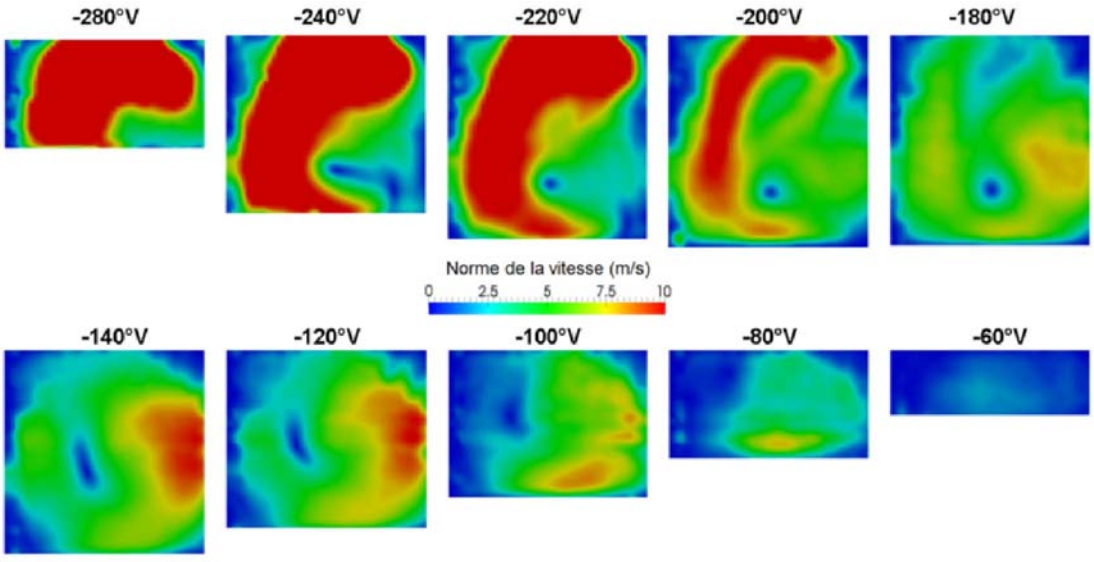


FIG. 4.4: Evolution de l'aérodynamique interne du moteur optique (point rumble) au cours du temps pour une moyenne statistique sur 200 cycles moteurs [30].



La figure 4.4 représente l'écoulement à différents instants du cycle pour un point à 1200 tr/min (sans combustion). Les visualisations sont moyennées sur un échantillon de 200 cycles consécutifs, et l'origine temporelle est fixée par rapport au PMH combustion. L'analyse de ces champs de vitesses met bien en évidence la présence de fortes vitesses durant la pleine ouverture des soupapes d'admission (coin supérieur droit de chaque image) entre -280°V et -200°V. Le mouvement de tumble (cf. 1.6b, sec 1.1) est aussi clairement identifiable entre -180°V et -120°V. Une fois le PMB dépassé, le piston remonte faisant augmenter la pression et la température des gaz. Les gouttes de traceurs disséminées dans l'écoulement commencent alors à s'évaporer et il est difficile d'obtenir des visualisations de bonne qualité. On atteint ainsi les limites de ce diagnostic, mais les visualisations optiques sont néanmoins exploitables durant le début de la compression et jusqu'à environ -100°V avant le PMH.

Une analyse PIV similaire a été menée sur le deuxième point de fonctionnement de référence choisi (1800 tr/min et 20 bars de PMI). Cependant, ces nouvelles conditions de régime et de charge entraînent des problèmes d'évaporation prématurée, mais aussi de dépôt des gouttes de traceur sur les parois du cylindre transparent. Ces problèmes ont engendré une diminution du signal enregistré par la caméra, ce qui a considérablement altéré les résultats issus des PIV malgré des démontages et nettoyage réguliers des parois du cylindre. La figure 4.5 présente l'évolution des champs de vitesses pour ce nouveau point de fonctionnement.

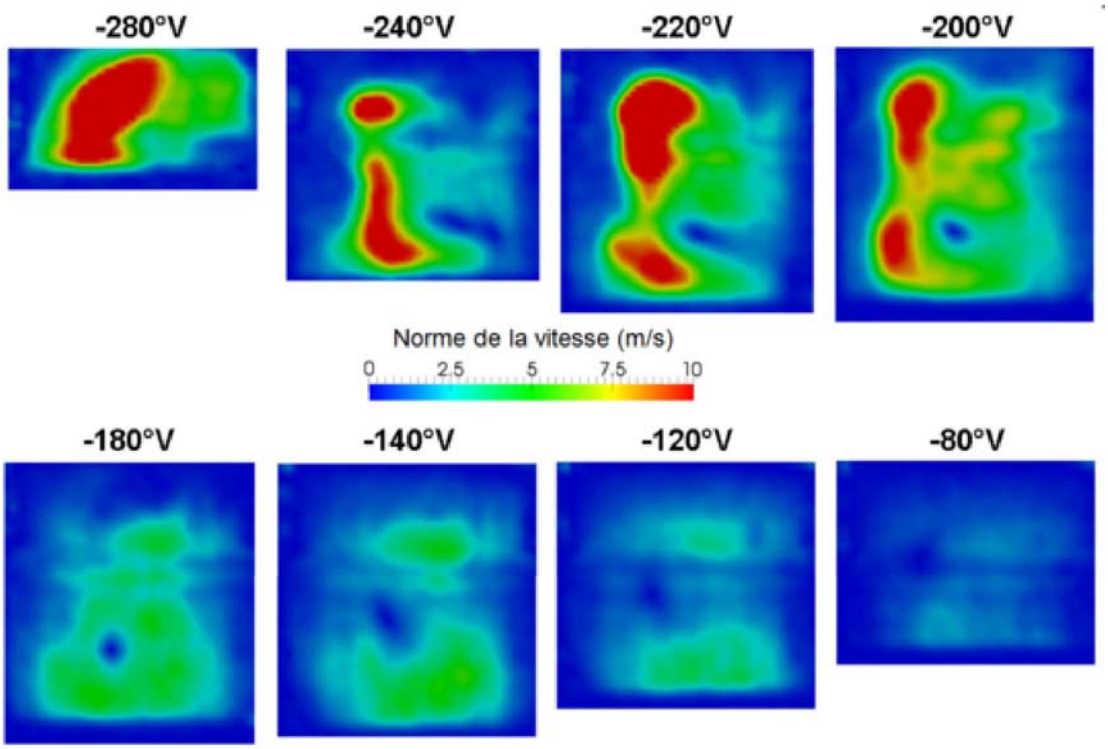


FIG. 4.5: Evolution de l'aérodynamique interne du moteur optique (point cliquetis) au cours du temps pour une moyenne statistique sur 200 cycles moteurs [30].

On constate que les champs de vitesses ne correspondent pas à l'écoulement physique du moteur. En effet, durant l'admission, la PIV ne capture aucune vitesse proche des soupapes d'admission (coin supé-



rieur droit de chaque image), alors que l'air est en train d'être admis à plusieurs mètres par seconde. De plus, au PMB par exemple, le mouvement de tumble caractéristique des moteurs essence n'est pas clairement identifiable. Enfin, plus de la moitié de la chambre semble être au repos aux différents instants, ce qui n'est pas envisageable pour les moteurs downsizés étudiés ici et dont la principale caractéristique est leur forte aérodynamique interne. Ces champs de vitesses PIV ne sont donc pas utilisables pour une comparaison avec les champs de vitesse LES.

De la PIV LIEF utilisant un tracer TEA-benzene a également été utilisée pour visualiser la phase vapeur du carburant. Des champs de richesse sont obtenus grâce aux deux hublots transparents (Fig. 4.3) et on retrouve sur la figure 4.6 deux champs de richesse au PMH issus de deux cycles différents à une même AVI de 280°V par rapport au PMH combustion.

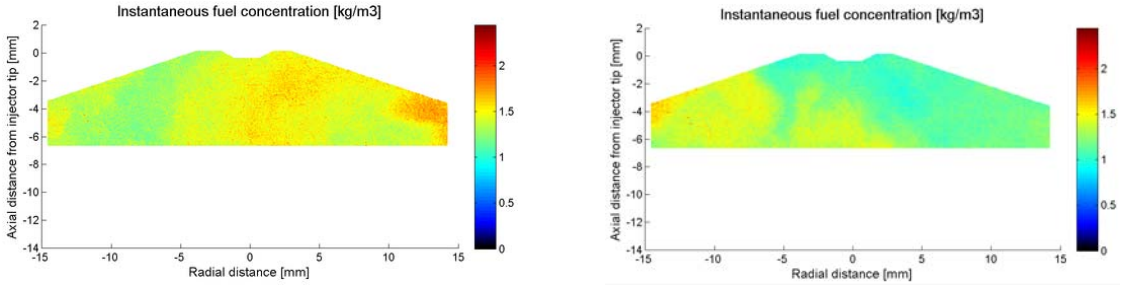


FIG. 4.6: Champs instantanés de richesse au PMH pour deux cycles moteur différents avec injection directe (AVI = 280°V) [30].

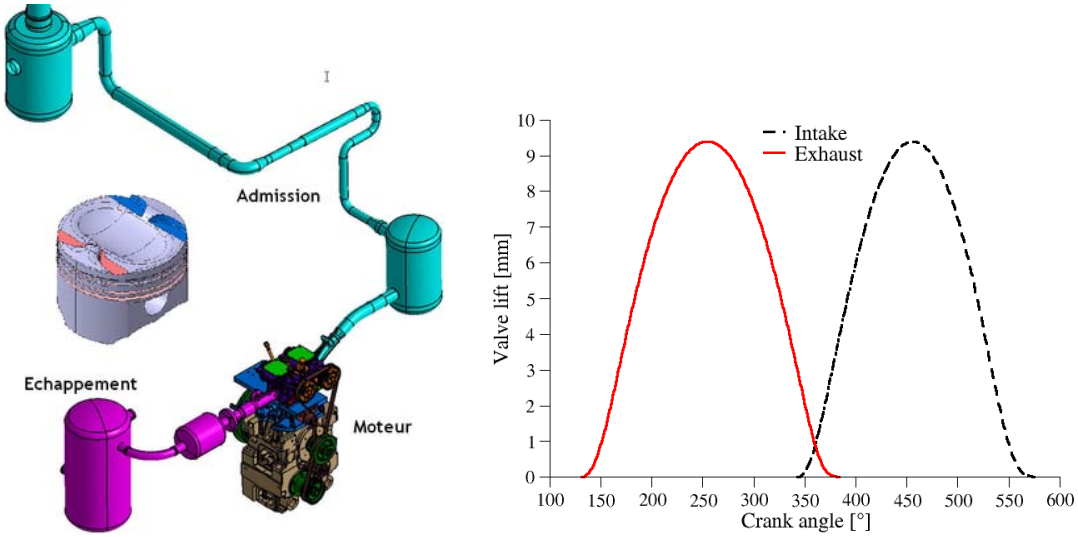
Les stratifications en richesse observées sont importantes et devront être gardées en tête lors de la comparaison des résultats expérimentaux et LES. En effet, la turbulence ou les hétérogénéités de richesse induites par l'injection directe peuvent jouer un rôle dans l'apparition des combustion anormales. Cependant, la partie injection directe en LES dans AVBP fait actuellement l'objet de développement à IFPEN, et n'était pas disponible pour cette thèse. Les calculs LES présentés par la suite ont donc été effectués avec un mélange parfaitement prémélangé.

4.3 Analyse des combustions anormales : configuration opaque

Une configuration sans accès optique a été mise en place au cours du projet ICAMDAC pour réaliser les essais expérimentaux avec combustions normales et anormales. La figure 4.7b présente les lois de levées des soupapes, comme pour la configuration optique, le croisement a été minimisé au maximum. Cependant il est ici de l'ordre du millimètre et est donc pris en compte dans l'ensemble des calculs LES de cette configuration.

Au niveau de l'architecture du moteur (Fig. 4.7a), on retrouve volontairement de fortes similarités avec le moteur précédent pour pouvoir transposer les résultats aérodynamiques (obtenus grâce aux accès optiques sur moteur transparent) sur ce nouveau moteur. La ligne d'admission est similaire en tout point à la configuration optique, avec deux plenums de tranquillisation en amont du collecteur qui est lui-même emprunté directement au moteur optique. A l'échappement, le collecteur reste aussi inchangé,





(a) Configuration opaque

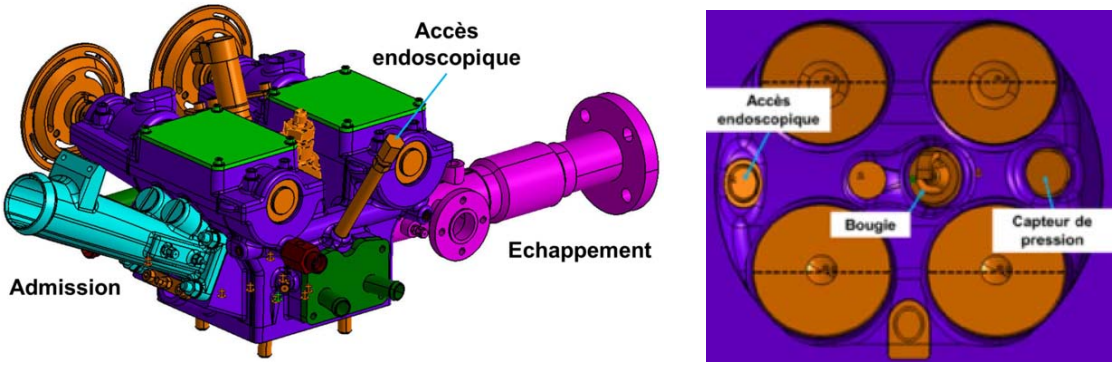
(b) Lois de levées des soupapes admission et échappement

FIG. 4.7: Présentation de la configuration opaque étudiée expérimentalement au cours du projet ICAMDAC.

mais la ligne est totalement différente pour des raisons techniques de mise en place sur le banc moteur. Un premier petit plenum se trouve proche moteur, et est suivi d'un plus gros volume (de 50L) pour tranquilliser totalement les gaz brûlés. La vanne de contre-pression échappement (CPE) est disposée en aval du second volume, ce qui simplifiera la modélisation vu que la simulation numérique s'arrêtera au niveau du gros volume qui s'est avéré suffisant pour tranquilliser l'écoulement.
Enfin, au niveau du bloc moteur, quelques changements sont à noter. Le piston n'est plus rigoureusement plat, mais légèrement incurvé comme présenté sur la figure 4.7a. On retrouve sur la figure 4.8 la position du capteur rapide qui enregistre la pression cylindre au cours du temps. Ce capteur est situé au même endroit que dans la configuration optique, et les figures 4.9a et 4.9b représentent respectivement les courbes de pression pour 800 cycles avec combustion obtenues sur un point cliquetis et un point rumble. Un cycle est mis en rouge dans chacun des cas pour mettre en évidence la présence de combustions anormales dans l'échantillon expérimental.

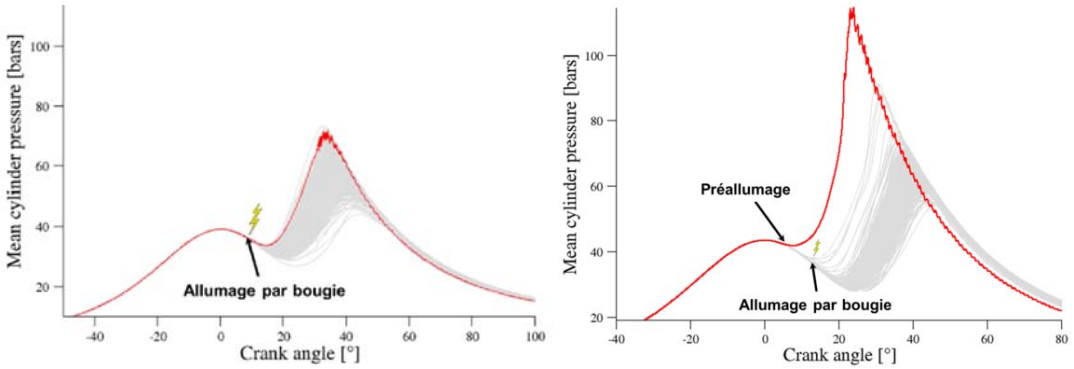
Pour finir, les hublots sur la culasse ont été supprimés pour laisser place à un accès endoscopique (Fig 4.8) permettant d'obtenir des visualisations à l'intérieur du moteur au cours de son fonctionnement. Un exemple de vue endoscopique est présenté sur la figure 4.10 sur laquelle les positions de la bougie et des soupapes ont été schématisées. Ainsi, des visualisations cycle à cycle du déroulement de la combustion lors d'un fonctionnement normal, mais également lors des combustions anormales sont accessibles. Un cycle avec combustion anormale (rumble) est présenté sur la figure 4.11, avec une première AI dans la zone de chasse coté échappement à 21°V. Un front de flamme se propage alors, et on distingue également à 25°V le front de flamme initié par la bougie. Des zones de combustion riches sont visibles plus tard dans le cycle vers 41°V au niveau de la zone de segmentation (SPC : Segment-Piston-Chemise).





(a) Vue extérieure de la culasse (b) Culasse vue de dessous

FIG. 4.8: Vue globale et inférieure de la culasse.



(a) point cliquetis (b) point rumble

FIG. 4.9: Enveloppes expérimentales de pression cylindre instantanée [30].

4.4 Mise en place de post-traitements commun entre LES et expérience.

Pour pouvoir comparer au mieux les résultats numériques et expérimentaux, des post-traitements communs ont été mis en place.

Les champs de vitesses issus des PIV peuvent directement être comparés aux champs de vitesses LES sur une coupe au centre de la chambre. Cependant, pour étudier plus en détails la représentation par la LES des vitesses expérimentales, des profils de vitesse radiale Ux ont été tracés en trois endroits de la chambre (Fig. 4.12). Un premier profil au centre de la chambre, et deux autres de part et d'autre du premier à une distance correspondante à un demi-rayon de chambre.

Enfin, pour réaliser une première étude quantitative des combustions anormales, de nouveaux post-traitements ont été mis en place principalement basés sur les signaux de pression disponibles au même endroit de la culasse. Une méthodologie développée en interne à IFP Energies nouvelles [52] a ainsi été



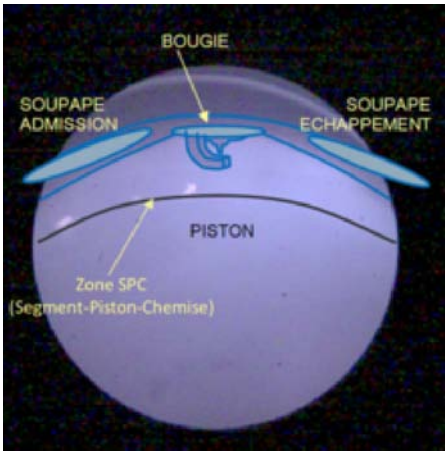


FIG. 4.10: Visualisation endoscopique d'un cycle rumble [30].

utilisée par les expérimentateurs (puis appliquée aux signaux de pression LES), et les différentes étapes sont rappelées succinctement ci-dessous :

✓ **Extraction de la pression cylindre sur la plage angulaire [-AVA+25°V ;-AVA+115°V] (Fig. 4.13)**

✓ **Filtrage passe-bande du signal de pression cylindre sur la plage [5kHz ;9kHz] :** Ce filtrage est assuré par 2 filtres de Butterworth d'ordre 4 en cascade (un passe-haut suivi d'un passe-bas). Cette plage de fréquence est caractéristique du cliquetis, et le signal obtenu est représenté par la courbe bleue sur la Fig. 4.14.

✓ **Extraction du signal filtré :** Le signal obtenu précédemment est à présent redressé puis un filtre passe-bas est appliqué, permettant d'obtenir le nouveau signal filtré (courbe verte, Fig. 4.14).

✓ **Calcul du maximum du signal filtré :** le niveau maximal atteint par le signal filtré (courbe verte, Fig. 4.14) quantifie l'intensité "brute" de cliquetis d'un cycle moteur. Différents traitements sont ensuite appliqués à ces valeurs de maximum afin de caractériser la séquence de pressions cylindre acquises.

✓ **Seuillage des niveaux maximum :** Lorsque l'intensité de cliquetis déterminée précédemment dépasse le seuil fixé expérimentalement, on considère que du cliquetis est présent. Le nombre de cycles pour lesquels le seuil est franchi permet de déterminer le nombre d'occurrence de cliquetis dans l'échantillon de pressions cylindre. La valeur de ce seuil est cartographiée au banc moteur en fonction du régime moteur, mais l'expérience de l'opérateur de banc peut influencer le niveau de seuil paramétré.

✓ **Détection de l'intensité maximale :** Elle est déterminée en prenant le maximum des maximum de chacun des cycles de l'échantillon choisi.



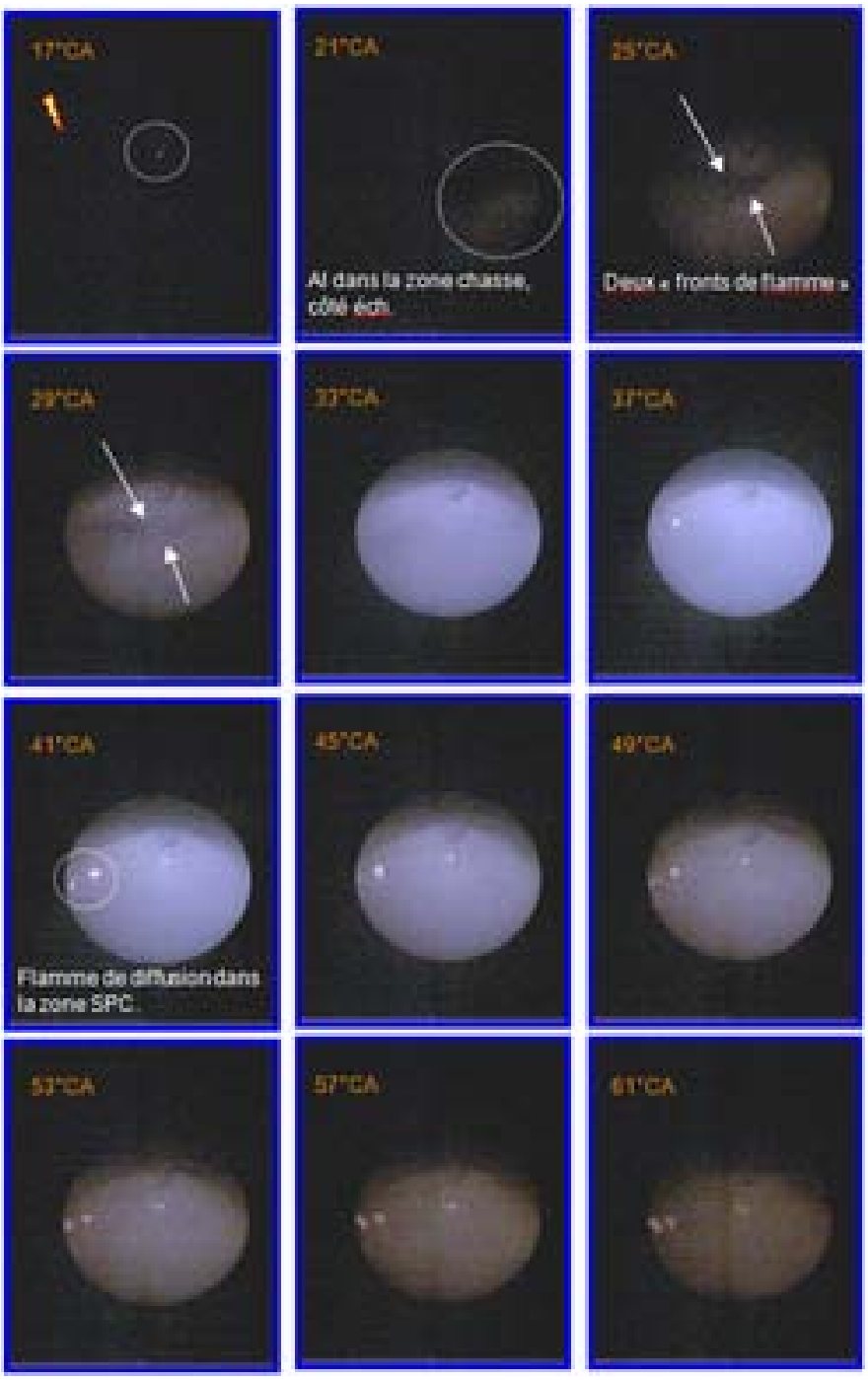


FIG. 4.11: Visualisation endoscopique d'un cycle moteur contenant du pré-allumage [30].



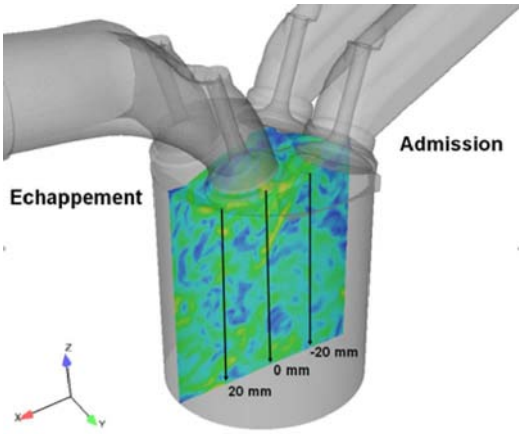


FIG. 4.12: Localisation des profils de vitesses analysés expérimentalement et numériquement.

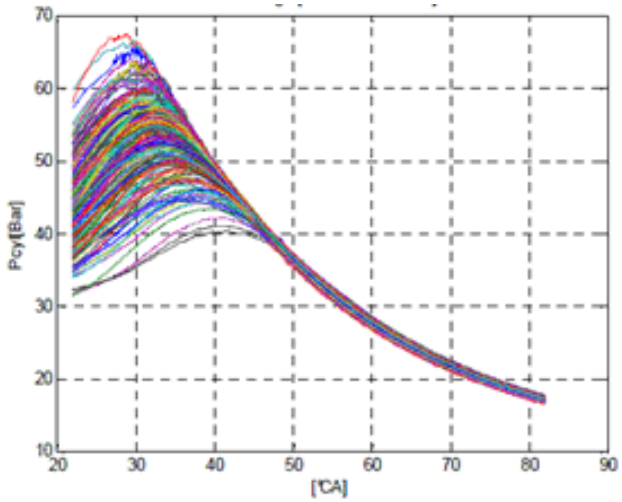


FIG. 4.13: Pression cylindre extraite sur la plage angulaire [-AVA+25°V ;-AVA+115°V] [52].

L'intensité maximale de cliquetis et le pourcentage de cycle en cliquetis peuvent ainsi être directement comparés. De plus, un seuillage sur la dérivée du dégagement de chaleur a été mis en place, permettant d'avoir accès à l'angle moyen de départ en AI lors des manipulations expérimentales mais également en LES.



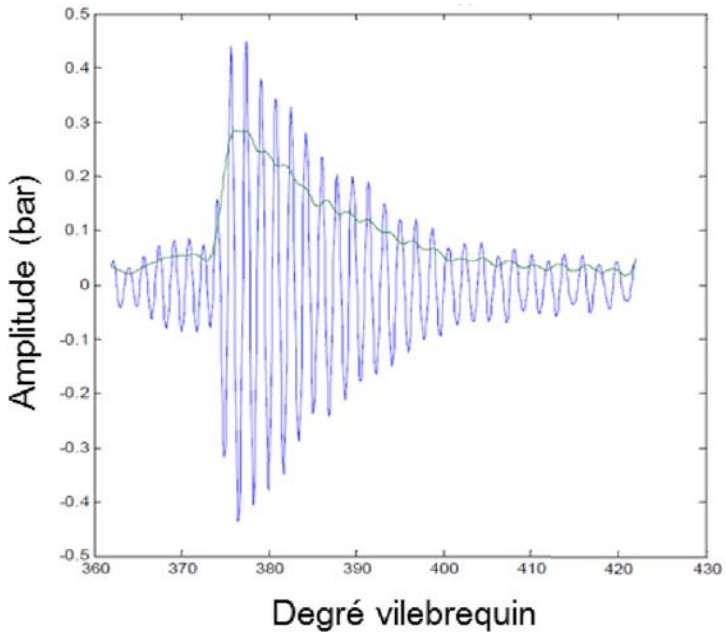


FIG. 4.14: Les différents signaux filtrés au cours du traitement des signaux de pression cylindre [52]. Le signal vert est issu d'un filtrage du signal bleue à l'aide d'un filtre passe-bas.





CHAPITRE

5

Mise en place et validation d'une configuration suralimentée en moteur entraîné

La première partie de la base de données ICAMDAC est dédiée à l'étude d'une configuration optique dont la géométrie est présentée sur la figure 4.1. D'un point de vue numérique, il est primordial de valider la représentativité de la LES sans combustion pour ne pas remettre en cause l'aérodynamique lors de l'obtention des résultats en combustion. Cette configuration en moteur transparent est ainsi étudiée numériquement dans ce chapitre, les résultats pouvant être ensuite directement transposés sur la configuration opaque dont la géométrie est très proche.
Dans un premier temps, la configuration numérique utilisée pour les calculs est détaillée. Les résultats LES sur le point rumble (1200 tr/min, 20 bars de PMI) sont ensuite analysés, et une variation de régime est enfin réalisée avec l'étude LES du point cliquetis (1800 tr/min, 19 bars de PMI). Il est tout de même important de noter que les régimes de référence utilisés sont nommés dans ce chapitre sous les termes cliquetis ou rumble, bien qu'à l'évidence il n'y ait ni cliquetis ni rumble dans cette section sans combustion. Cette dénomination a pour seul but de rappeler que les conditions moteurs correspondent aux cas cliquetis ou rumble de la BDD.

5.1 Mise en place des calculs LES

5.1.1 Réalisation des maillages

La difficulté lors de la réalisation de calculs moteur réside dans le maillage des parties mobiles (piston et soupapes). En effet, contrairement à des mailles hexaédriques, la qualité des tétraèdres peut très



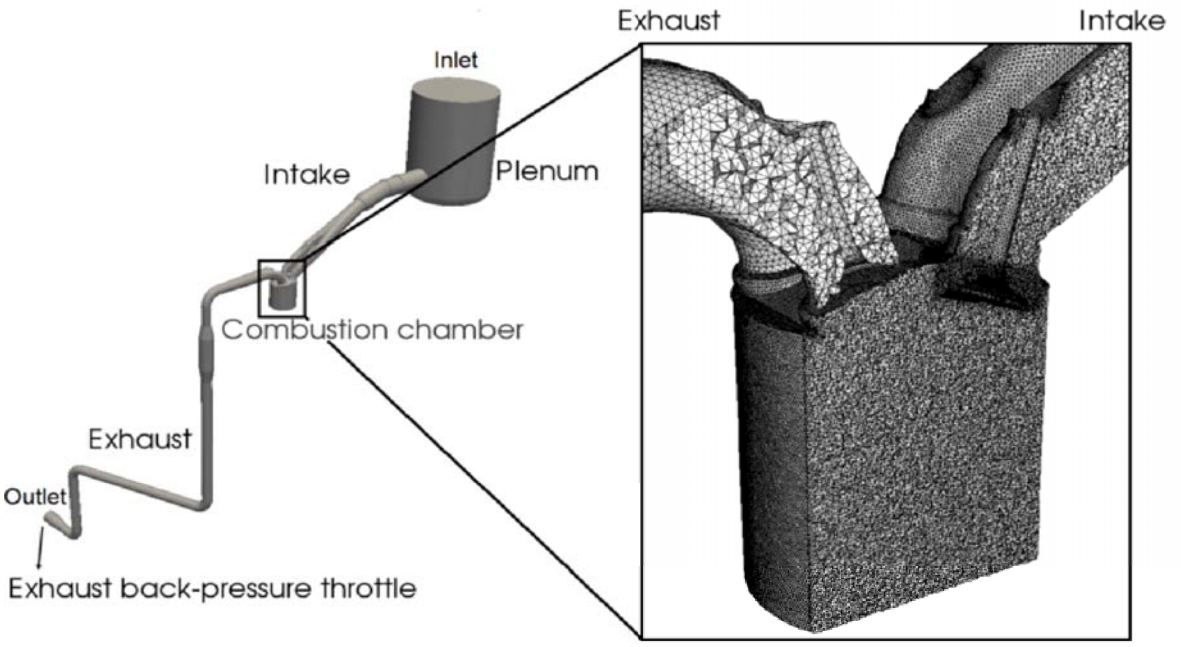


FIG. 5.1: Présentation du domaine de calcul LES, et d'un maillage pendant l'admission

vite se dégrader lors de la compression ou la détente du maillage. Il est donc nécessaire de découper les cycles en plusieurs phases contenant chacune un maillage, la solution finale d'une phase étant interpolée sur le maillage initial de la phase suivante.
Le domaine de calcul simulé en LES est représenté sur la figure 5.1, et les maillages utilisés sont entièrement tétraédriques. Pour ce moteur, chaque cycle est découpé en 44 phases, avec des maillages contenant de 1.07 à 12 millions de cellules selon la position au cours du cycle. Les tailles de mailles sont uniformes dans la chambre de combustion, et le maillage est déraffiné dans les tubulures pour conserver un temps de calcul raisonnable. On remarque sur la figure 5.1 un raffinement autour de la soupape ouverte pour arriver à une résolution fine de l'écoulement qui est admis ou évacué du moteur selon les cas. Les principales tailles de mailles des différentes parties de la géométrie sont récapitulées dans le tableau 5.1.

Cylindre [mm]	0.8
Tubulures [mm]	de 1 à 6
Levée résiduelle soupapes [mm]	0.06
Levée maximale soupapes [mm]	0.4

TAB. 5.1: Tailles caractéristiques des cellules du maillage.

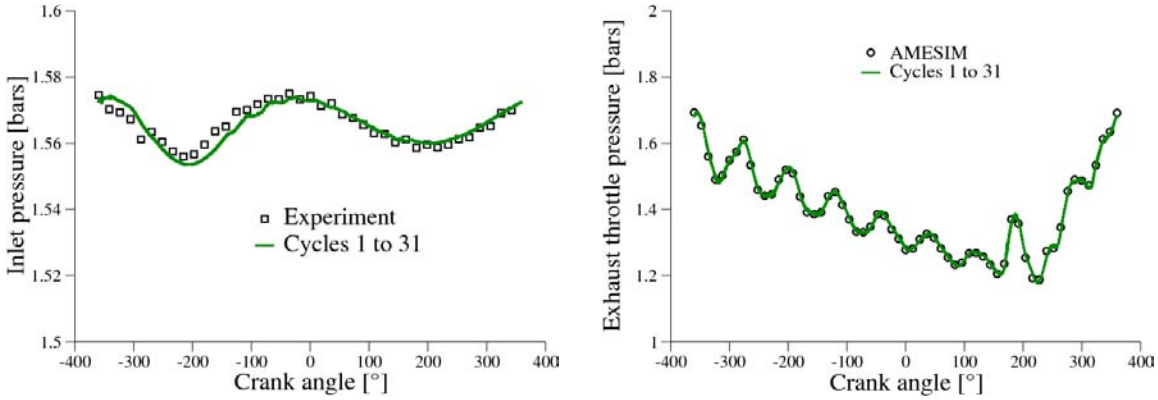


5.1.2 Conditions limites

Les conditions aux limites utilisées en entrée et sortie dans les calculs LES ICAMDAC sont des conditions de type NSCBC (Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions [108]) en pression et en température, et sont récapitulées dans le tableau 5.2.

Localisation	Nom de la condition limite	Origine des signaux imposés
INLET	INOUT_RELAX_P_T_Y	Pression (Fig. 5.2a) et température expérimentaux
OUTLET	INOUT_RELAX_P_T_Y	Pression (Fig. 5.2b) et température fournis par AMESIM

TAB. 5.2: Conditions limites imposées dans les calculs LES.



(a) Signal de pression expérimental imposé à l'admission

(b) Signal de pression AMESIM imposé à l'échappement

FIG. 5.2: Evolution de la pression imposée en condition aux limites pour le point rumble.

A l'admission, la condition limite d'entrée est imposée sur la partie supérieure du premier plénum en amont de la culasse (Fig. 5.1). Ce choix évite de tronquer le domaine de calcul à proximité des soupapes, ce qui nécessiterait d'imposer des conditions thermodynamiques très fluctuantes. En effet, le phénomène de refoulement (ou 'back-flow') présent dans cette partie de la tubulure complique la mise en place de la condition limite qui doit gérer des vitesses entrantes et sortantes sur des intervalles de temps très court. De plus, l'analyse des pressions et températures expérimentales révèle que le plénum de tranquillisation joue pleinement son rôle, et les valeurs par exemple de pression issues de l'expérience sont assez stables pour être imposées facilement en LES (Fig. 5.2).

A l'échappement, le domaine de calcul a été tronqué au niveau de la vanne CPE présente sur le banc moteur pour simuler la contre-pression induite par la présence d'un turbocompresseur sur un moteur à fort downsizing. En effet, cette vanne n'a pas été caractérisée expérimentalement de manière précise, il était donc difficile de la représenter numériquement sans connaître la position exacte du papillon. Ce choix a également été possible grâce à son éloignement important par rapport au cylindre, permettant d'obtenir un écoulement tranquillisé en sortie du domaine de calcul. Enfin, aucun capteur expérimental n'étant situé à proximité de celle-ci, les conditions limites en température et en pression sont issues d'un



simulateur 0D AMESim de ce moteur réalisé à IFPEN par V. Renouard [111].

5.1.3 Configuration numérique

L'étude présentée au § 3.2.1 a mis en évidence que l'utilisation d'un schéma numérique d'ordre élevé comme TTGC n'a pas une influence assez conséquente sur les résultats en aérodynamique pour justifier un temps de calcul deux fois plus important que celui d'un cycle LW. La configuration numérique choisie est donc similaire à celle utilisée dans les études précédentes [50], et est récapitulée dans le tableau 5.3. En effet, ces études ont mis en évidence la bonne représentativité des résultats LES, ainsi qu'une bonne robustesse des calculs nécessaire pour simuler un grand nombre de cycles consécutifs. Le choix du schéma numérique sera amené à évoluer lors des calculs en combustion, avec la mise en application de la méthode ESO_2 décrite au § 3.2.1.

Schéma numérique	Lax-Wendroff
Modèle de sous-maille	Smagorinsky
	Cs = 0.18
Viscosité artificielle	$\epsilon_2 = 0.1$ et $\epsilon_4 = 0.005$
Type de senseur	iavisc = 2 [22]

TAB. 5.3: Paramètres numériques utilisés pour la simulation LES en moteur entraîné

5.2 Validation des résultats numériques pour le point rumble en moteur entraîné

La comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux sur ce point de fonctionnement est effectuée selon différents axes de validation :

- ✓ la masse enfermée
- ✓ la pression cylindre
- ✓ la caractérisation de l'aérodynamique (tumble, swirl, profils de vitesse radiale, champs PIV)

Pour rappel, ce point de fonctionnement est dans des conditions typées rumble, à forte charge (20 bars de PMI) et faible régime (1200 tr/min). Il est cependant étudié ici sans combustion.

5.2.1 Masse enfermée

La masse enfermée a été choisie comme critère pour valider la convergence des résultats au cours des différents cycles consécutifs simulés. En effet, les calculs LES sont initialisés à l'aide de champs de température, de pression et de vitesse uniformes. Le ou les premiers cycles peuvent être directement perturbés par les conditions initiales et ne doivent donc pas être pris en compte dans le post-traitement des résultats pour ne pas fausser les moyennes.



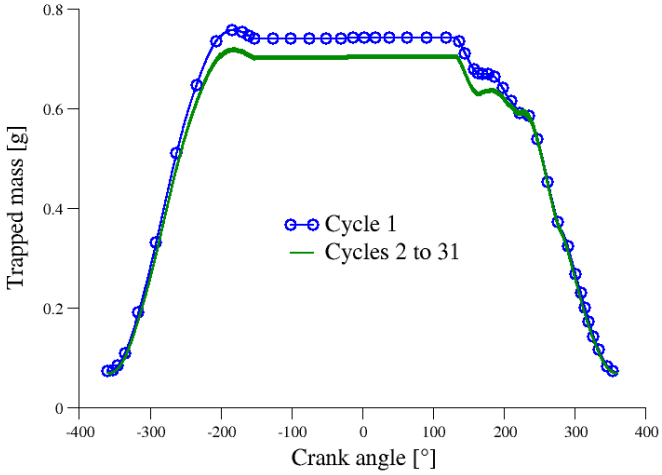


FIG. 5.3: Évolution de la masse enfermée au cours du temps pour les différents cycles consécutifs simulés

On retrouve sur la figure 5.3, la masse enfermée au cours du temps pour les différents cycles LES. Il apparaît une nette variation de masse entre le premier cycle et les suivants, ce qui met bien en évidence l'influence des conditions initiales sur le premier cycle. Cependant, la variation se limite ensuite à moins de 1% pour les cycles 2 à 31, et l'ensemble de ces cycles a donc été pris en compte pour les comparaisons suivantes entre les résultats numériques et expérimentaux.

5.2.2 Validation de la pression cylindre

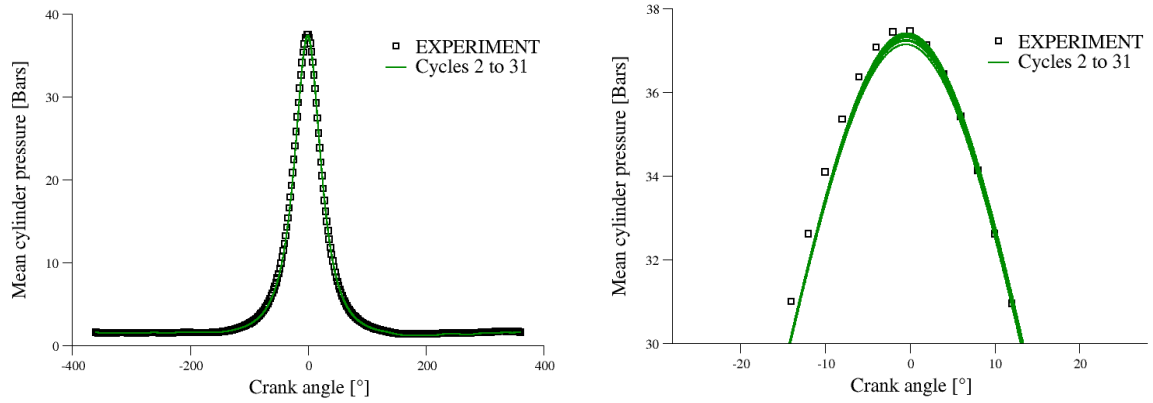
La comparaison des résultats débute avec l'analyse de la pression cylindre locale dans la chambre. La figure 5.4b présente l'évolution des pressions LES et expérimentale, et met bien en évidence la bonne représentativité de la LES au cours du cycle. Les niveaux de pression prédits par les trente réalisations numériques sont cohérents avec l'expérience quel que soit l'instant, et la faible variabilité cycle à cycle observée expérimentalement est bien capturée par la LES.

Si on s'intéresse à la pression proche du PMH (Fig. 5.4a) sachant que l'incertitude de mesure expérimentale est de +/- 0.8 bars, les niveaux maximum de pression cylindre LES sont parfaitement en accord avec les résultats expérimentaux.
Enfin, la pression maximale au cours du cycle est atteinte expérimentalement à -1°V avant le PMH avec une incertitude de +/-0.5°V. Sur les différentes réalisations LES, la pression maximale est atteinte en moyenne à -0.4°V avant le PMH, ce qui est donc cohérent avec la valeur de la BDD car le signal expérimental n'est discrétisé que tous les 0.5°V.

5.2.3 Comparaison de l'aérodynamique interne

L'étude se porte maintenant sur l'analyse de l'aérodynamique interne du moteur, qui peut être comparée à l'expérience grâce aux différents accès optiques disposés sur le moteur (Fig. 4.3).





(a) Vue globale sur l'ensemble du cycle

(b) Zoom proche du PMH

FIG. 5.4: Évolution de la pression cylindre au cours du temps pour les 30 cycles LES sur le point rumble.

Mouvements de swirl et de tumble :
Deux principaux mouvements aérodynamiques (§ 1.2) peuvent être présents en moteur automobile : le swirl (principalement pour les moteur Diesel) et le tumble présent dans les moteurs essence et notamment dans les moteurs à fort "downsizing".
Au cours du cycle, un nombre adimensionnel caractérisant l'intensité de chacun des deux phénomènes précédents peut être calculé numériquement.
Si l'on note les coordonnées d'un point i du maillage (x_i, y_i, z_i) et sa vitesse $U = (u_i, v_i, w_i)$, l'intensité du tumble (par rapport à un axe perpendiculaire à l'axe formé par les tubulures d'admission et d'échappement) est donnée par la relation :

$$Tumble = \frac{60}{2\pi rpm} \frac{\sum\limits_{domaine} m_i[(x_i - x_{centre})w_i - (z_i - z_{centre})u_i]}{\sum\limits_{domaine} m_i[(x_i - x_{centre})^2 + (z_i - z_{centre})^2]} \tag{5.1}$$

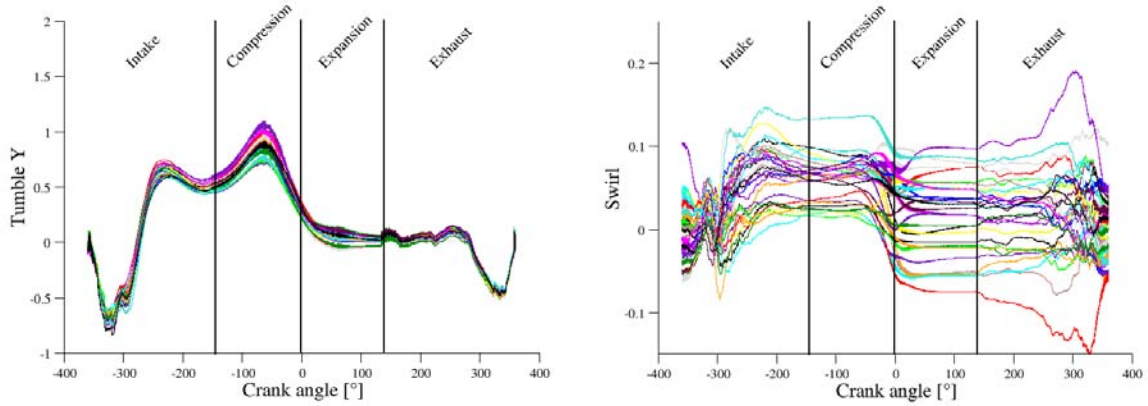
où rpm désigne le régime du point moteur considéré, et $(x_{centre}, y_{centre}, z_{centre})$ les coordonnées du centre du tumble fixés par l'utilisateur.

De même, l'intensité du swirl est obtenue grâce à la formule :

$$Swirl = \frac{60}{2\pi rpm} \frac{\sum\limits_{domaine} m_i[(x_i - x_{centre})u_i - (y_i - y_{centre})u_i]}{\sum\limits_{domaine} m_i[(x_i - x_{centre})^2 + (y_i - y_{centre})^2]} \tag{5.2}$$

L'intensité de tumble est représentée sur la figure 5.5a. Cette grandeur permet de mettre en évidence la formation du tumble durant l'admission avec des valeurs croissantes, mais également un éclatement de celui-ci lors de la remontée du piston pour aboutir à niveau proche de zéro durant la détente. En comparant le niveau de tumble avec le niveau de swirl (Fig. 5.5b), on remarque une prédominance du tumble par





(a) Nombre de tumble

(b) Nombre de swirl

FIG. 5.5: Nombre de tumble et de swirl au cours du temps pour les 30 cycles simulés en LES.

rapport au mouvement de swirl, ce qui était attendu vu que la configuration étudiée est un moteur essence.

Analyse des champs de vitesse

Sur le banc moteur, une nappe laser est envoyée au travers du cylindre transparent permettant d'obtenir un plan de visualisation au centre de la chambre de combustion selon l'axe formé par les tubulures d'admission et d'échappement. Ce même plan de visualisation est choisi pour les champs de vitesse LES (Fig. 5.6).

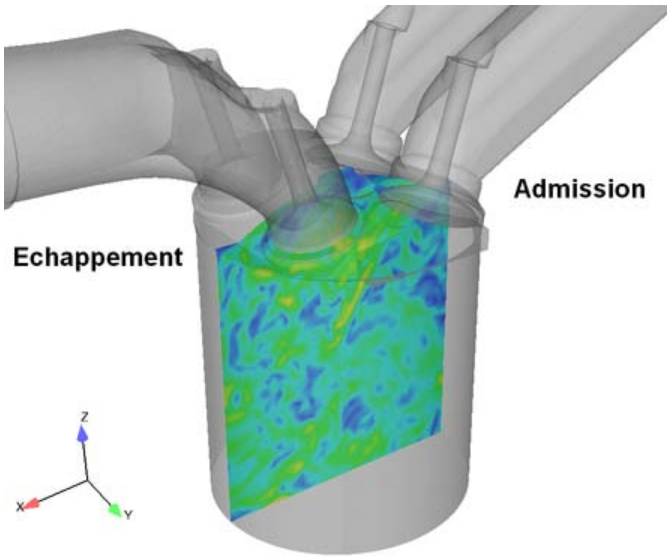


FIG. 5.6: Localisation du plan PIV au centre de la chambre de combustion.

On retrouve sur la figure 5.7 l'évolution du champ LES moyen de vitesse au cours du cycle sur le plan de la figure 5.6. Ces champs confirment les conclusions formulées à partir de l'intensité du tumble.



Durant l'admission, le mouvement de tumble créé est clairement visible sur les champs LES. Lors de la remontée du piston, le tumble est comprimé et commence à se déstructurer. Cependant, les images présentées sur la figure 5.7 ne sont pas assez proches du PMH pour suivre l'éclatement du tumble.

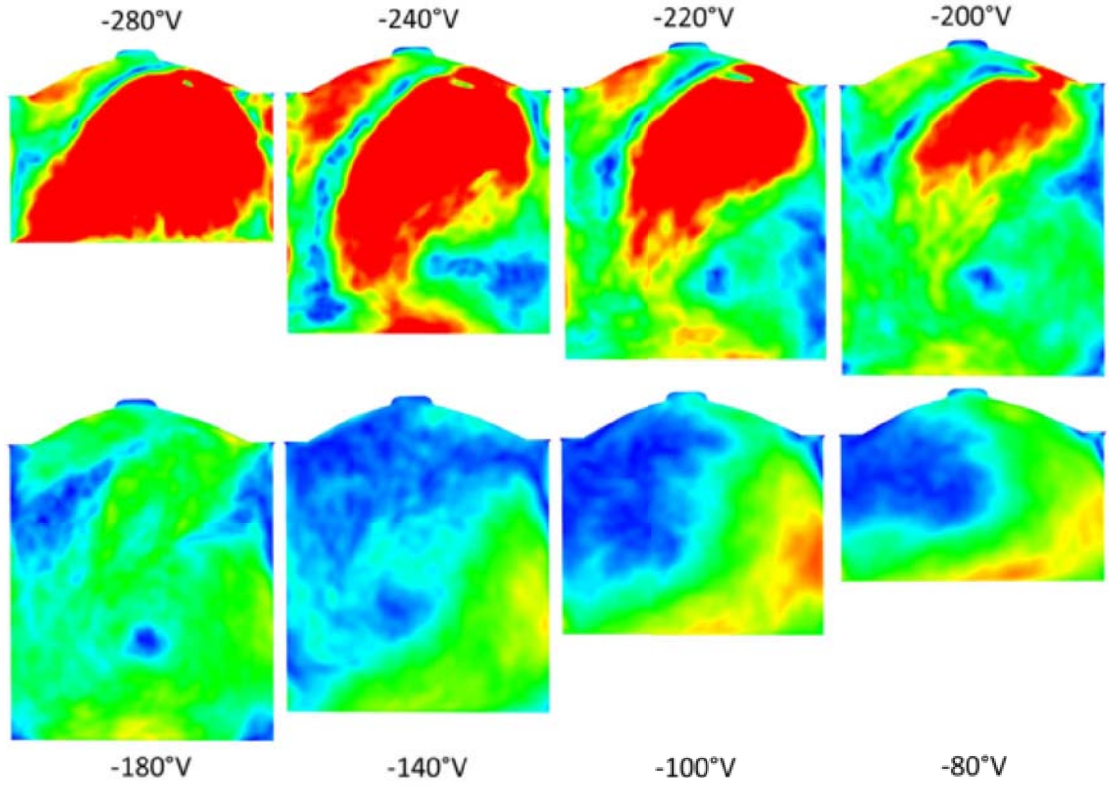


FIG. 5.7: Evolution du champ LES moyen de la norme de la vitesse sur un plan au centre de la chambre de combustion.

Les champs de vitesse issus de la LES et des expériences étant issus du même plan de coupe au centre de la chambre, ils peuvent être directement comparés. La figure 5.8 présente les champs PIV moyens sur un échantillon de 200 cycles expérimentaux et pour deux angles vilebrequin donnés (120°V et 180°V après le PMH admission) par rapport aux champs de vitesse LES moyennés sur les 30 cycles simulés.

De fortes similitudes peuvent ainsi être mises en évidence :

- ✓ le mouvement macroscopique du tumble expérimental se retrouve sur les champs de vitesse numériques, et le centre du tumble (repérable visuellement par la zone de vitesse nulle) est bien localisé en LES.
- ✓ les niveaux globaux de vitesse sont comparables à chaque angle vilebrequin, mettant bien en évidence que la LES arrive à prédire les fortes vitesses durant l'admission, mais également la décroissance du niveau de vitesse dans le cylindre au cours du cycle.

Néanmoins, les visualisations montrent dans certaines régions une légère sous-estimation par la LES de la vitesse du fluide (de l'ordre du mètre par seconde), qui est probablement due au manque de convergence des résultats LES. En effet, l'aérodynamique forte des moteurs downsizés implique une grande



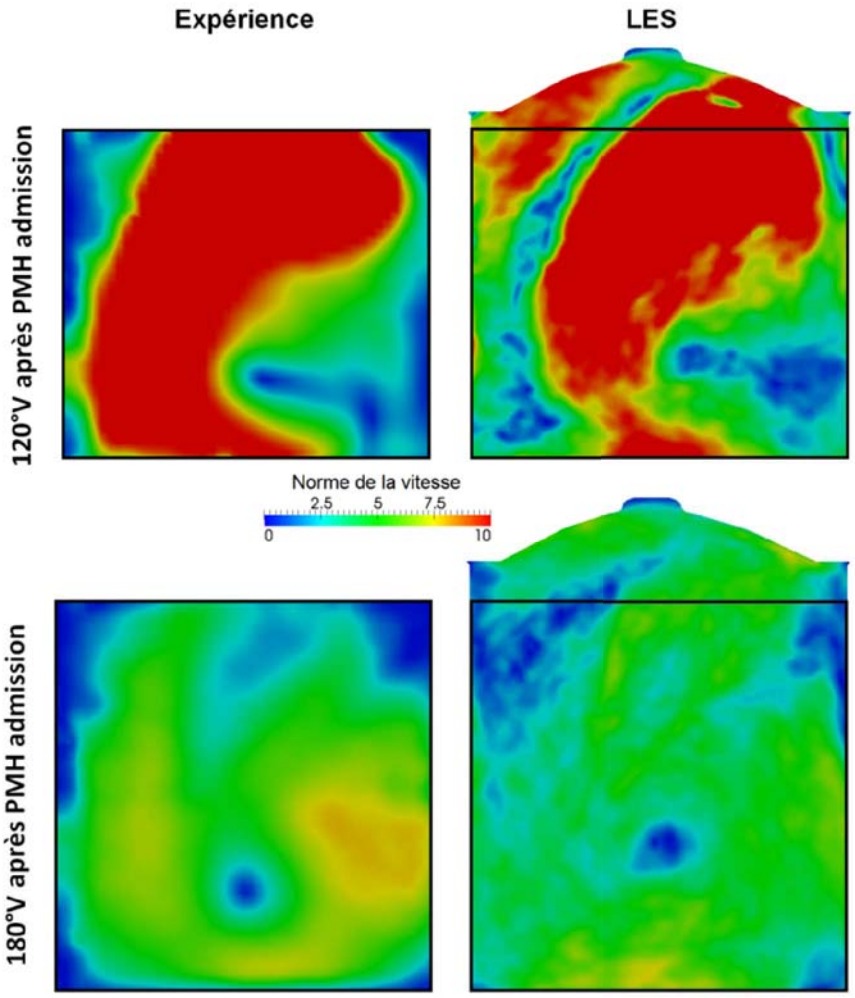


FIG. 5.8: Comparaison des champs moyens de la norme de la vitesse pour deux angles vilebrequin : PIV (gauche) et LES (droite), et deux instants : 120˚V après PMH admission (haut) et au PMB (en bas).

disparité des champs de vitesse entre chaque cycle, et les champs LES présentent localement un manque de réalisations pour obtenir une moyenne numérique totalement convergée.
La figure 5.9 permet de comparer à deux instants les champs de vitesse instantanés pour trois cycles différents. Quel que soit le cycle ou l'instant analysé, le mouvement aérodynamique dans la chambre est complexe. Le mouvement moyen de tumble existe, mais de la turbulence se superpose à celui-ci, et c'est précisément la forte variation cycle à cycle de cette turbulence qui est visible sur chacun des cycles instantanée. Le mouvement de tumble est cependant clairement identifiable si on fait une moyenne de 30 cycles LES (Cf. colonne de droite de la figure 5.9).

Il est également important de garder à l'esprit que les moyennes expérimentales ont été effectuées sur un échantillon de 200 cycles consécutifs. Ce nombre de cycles représente un temps physique relative-



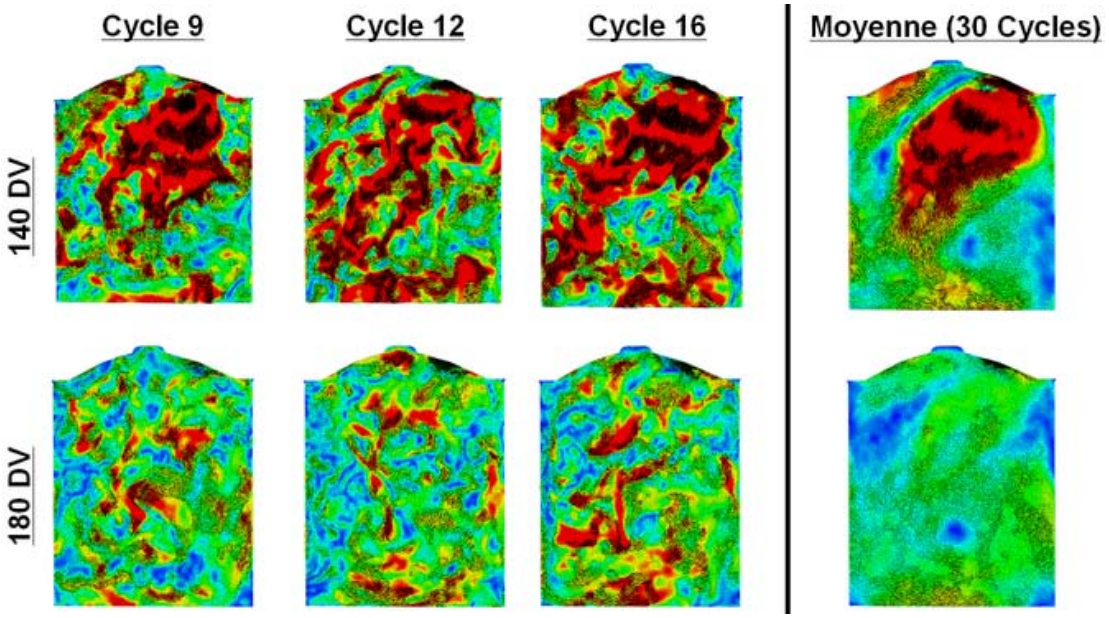


FIG. 5.9: Champs LES instantanés de la norme de la vitesse pour trois cycles et deux degrés vilebrequin comparés à la moyenne LES sur 30 cycles consécutifs.

ment long qu'il n'est pas envisageable de simuler en LES. En effet, augmenter le nombre de processeurs utilisés dans les simulations n'est pas utile car la nombre minimal de cellules par processeur (de l'ordre de quelques milliers pour AVBP) est déjà atteint. Ainsi, simuler un long temps physique, engendre la réalisation de très nombreuses itérations, et le temps de retour des résultats n'est alors pas compatible avec une telle étude. Par exemple, réaliser 200 cycles en LES nécessiterait au minimum 210 jours de calculs sur une moyenne de 450 processeurs, en supposant que les processeurs nécessaires au calcul sont disponibles en permanence sur la machine de calcul utilisée.
Une étude de convergence a été réalisée et la figure 5.10 présente la moyenne statistique d'un champ de vitesse sur un échantillon de 10, 20 et 30 cycles LES. Quel que soit le nombre de cycles dans l'échantillon utilisé pour effectuer la moyenne, les champs de vitesse ne sont pas totalement convergés. Ceci laisse donc penser que l'étude d'un point de fonctionnement fortement chargé nécessite de simuler un grand nombre de cycles en LES pour obtenir des résultats convergés contrairement à des points à plus faible charge. Cependant, l'augmentation du nombre de cycles dans l'échantillon choisi pour effectuer la moyenne statistique a une influence. On remarque une différence par exemple dans le bas de la zone de fortes vitesses entre le champ moyenné sur 10 cycles et les deux autres. Les deux champs issus d'une moyenne sur 20 et 30 cycles sont quant à eux relativement proches, permettant d'affirmer qu'un échantillon de trente cycles semble un compromis acceptable entre le temps de calcul et la convergence des résultats.

Profils verticaux de vitesse radiale U_x :
De manière plus quantitative, les profils de vitesse radiale (U_x) sont analysés, et la figure 5.11 présente la position de ces différents profils dans la chambre de combustion. Trois axes ont été choisis sur le plan PIV, avec un premier profil au centre de la chambre (0 mm) et deux autres à environ mi-distance de la

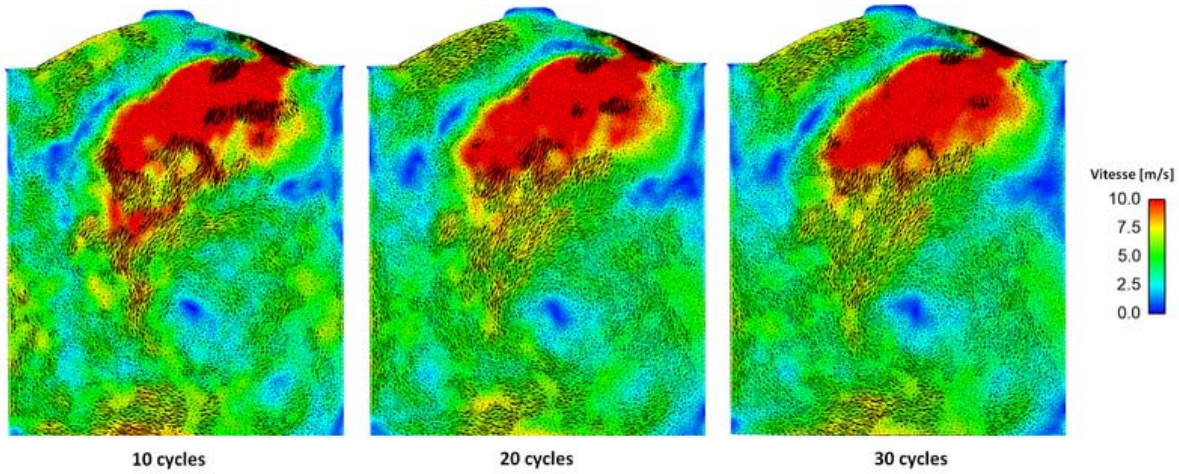


FIG. 5.10: Comparaison de la convergence des champs de vitesse moyenne pour 10 (gauche), 20 (centre) et 30 (droite) réalisations LES.

chemise, de part et d'autre du profil central (+/- 20 mm). Pour l'ensemble des profils analysés sur les figures 5.12 et 5.13, la moyenne et la variance expérimentales sont présentées (en noir), mais également la moyenne et la variance des résultats numériques (en rouge), ainsi que les profils de chacun des 30 cycles LES simulés (en gris).

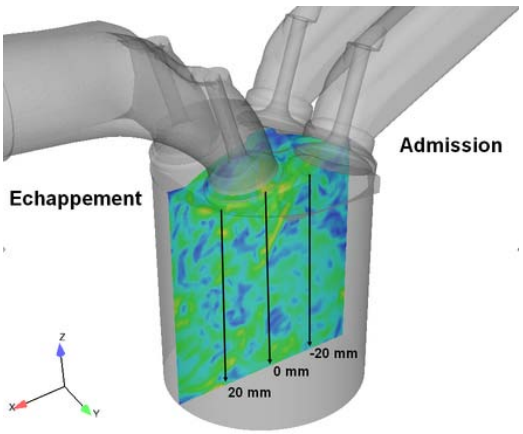


FIG. 5.11: Schéma des profils de vitesse radiale U_x tracés en 3 positions différentes sur le plan de coupe.

L'évolution de la vitesse U_x au cours du cycle et sur l'axe du cylindre est tout d'abord comparée sur la figure 5.12. On retrouve une très bonne cohérence quel que soit le degré vilebrequin, mettant bien en évidence que la LES capture le mouvement macroscopique de tumble, mais également la décroissance en vitesse localement dans la chambre. Ces observations confirment de manière quantitative les conclusions issues de l'analyse des champs de vitesse.
Pour valider les constatations précédentes, les profils de U_x sont analysés sur la figure 5.13 en diffé-



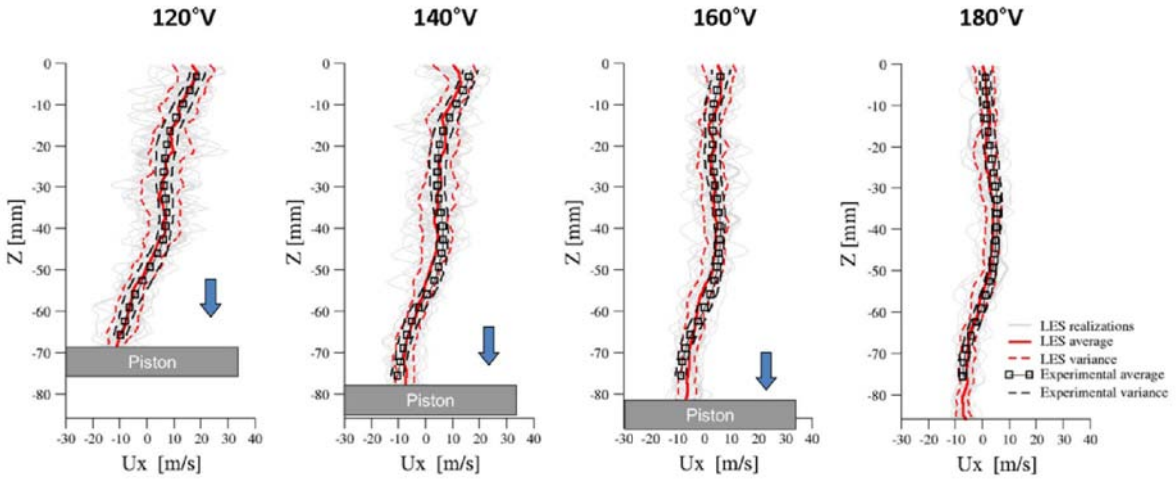


FIG. 5.12: Evolution des profils de vitesse U_x (moyennes et variances) sur l'axe du cylindre pour quatre angles vilebrequin au cours du cycle.

rentes positions de la chambre et pour deux angles vilebrequin donnés (120°V et 160°V après le PMH admission). Malgré le faible nombre de réalisations numériques (comparé aux 200 réalisations expérimentales), les moyennes expérimentales et LES restent très proches quelle que soit la position dans le moteur. On peut cependant noter que l'enveloppe de variance expérimentale est inférieure ou égale à la variance numérique, mais cette différence s'explique par le filtre plus grossier utilisé pour obtenir les PIV (environ 1.7 mm) alors que la taille de mailles LES est inférieure au millimètre (environ 0.8mm dans toute la chambre).

5.3 Variation de régime : simulation LES du point cliquetis

Une variation de régime a été effectuée sur la même configuration. Le point simulé à présent est le point cliquetis dont la vitesse de rotation est de 1800 tr/min (l'ensemble des caractéristiques sont présentées dans le tableau 4.2 du §4.1). Il s'agit ici de valider la capacité de la LES à reproduire un changement de régime et de charge, en conservant les paramètres numériques issus de la simulation du point rumble.

Masse enfermée

Comme pour le point précédent, la masse enfermée des 31 cycles est analysée (Fig. 5.14), et le premier cycle n'a pas été conservé pour les post-traitements suivants à cause de sa dépendance à la condition initiale. Les moyennes numériques suivantes sont donc effectuées sur 30 cycles alors que les moyennes expérimentales sont toujours effectuées sur un échantillon de 200 cycles.

Pression cylindre locale

La pression cylindre (Fig. 5.15a et 5.15b) est en parfait accord avec l'expérience au cours de l'ensemble du cycle, mais également au niveau de la pression maximale moyenne et de l'angle vilebrequin auquel elle est atteinte. Cette comparaison apporte un élément supplémentaire mettant en évidence la représen-



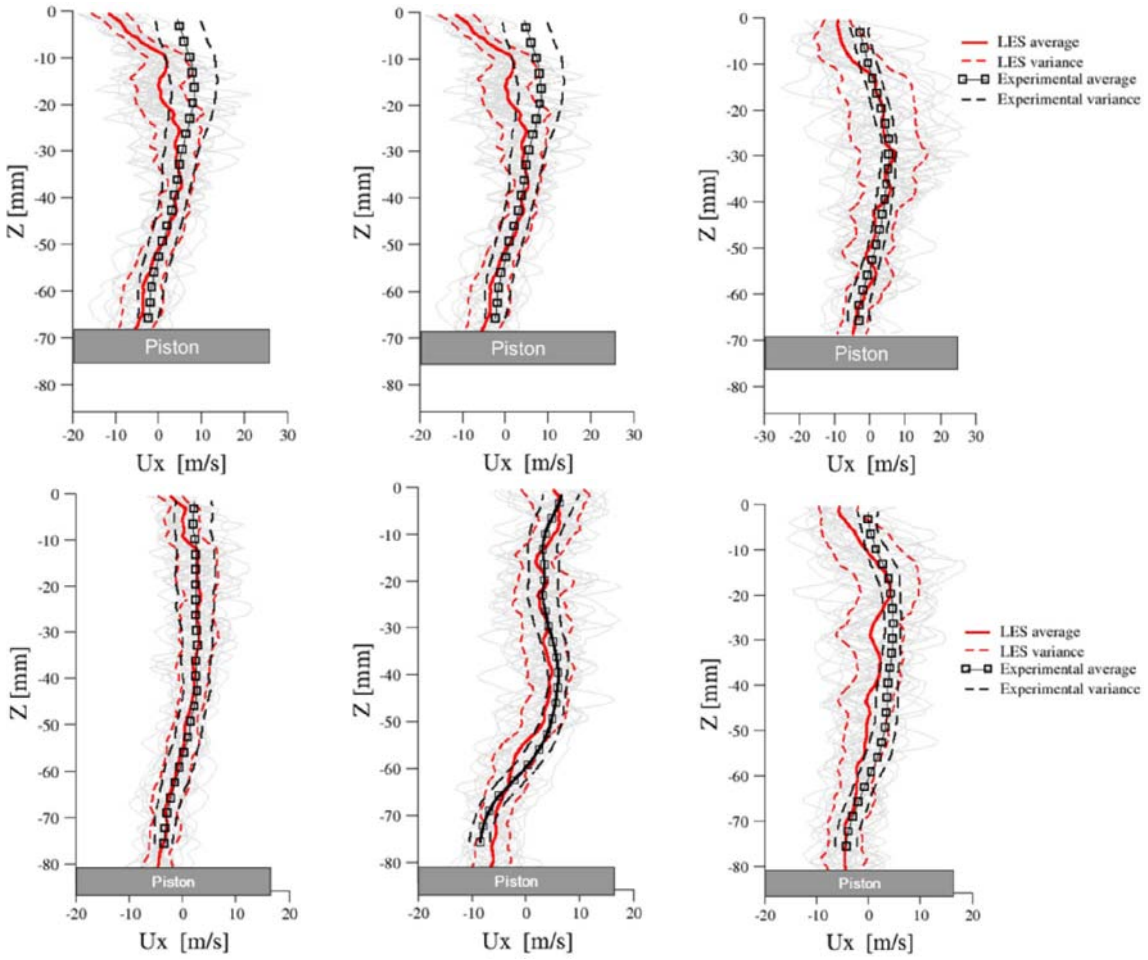


FIG. 5.13: Profils de vitesse U_x selon les trois axes représentés sur la figure 5.11 (-20 mm à gauche, 0 mm au centre, 20 mm à droite) et pour deux angles vilebrequin (120°V en haut et 160°V en bas).

tativité de la LES par rapport aux résultats expérimentaux. En effet, il est important de se rappeler que seules les conditions limites et le régime moteur ont été modifiées par rapport à la configuration numérique utilisée pour simuler le point rumble.

Analyse des champs de vitesse

On s'intéresse à présent aux champs de vitesse PIV et LES. Cependant comme mentionné au §4.2, des problèmes d'évaporation des particules de traceur et/ou de dépôts sur les parois du cylindre ont été observés dans les conditions de fonctionnement de ce point moteur. La figure 5.16 permet de comparer les résultats expérimentaux (Fig. 5.16a) et les résultats numériques (Fig. 5.16b) sur le point de fonctionnement cliquetis. Ces images moyennes sont réalisées à -240°V avant le PMH combustion, ce qui correspond à un instant en pleine admission. Comme on peut le voir sur la PIV expérimentale (en haut à droite de l'image), aucune vitesse n'est enregistrée dans les essais. Or, c'est précisément la région la plus proche de la soupape d'admission, donc une zone soumise en réalité à de fortes vitesses que l'on

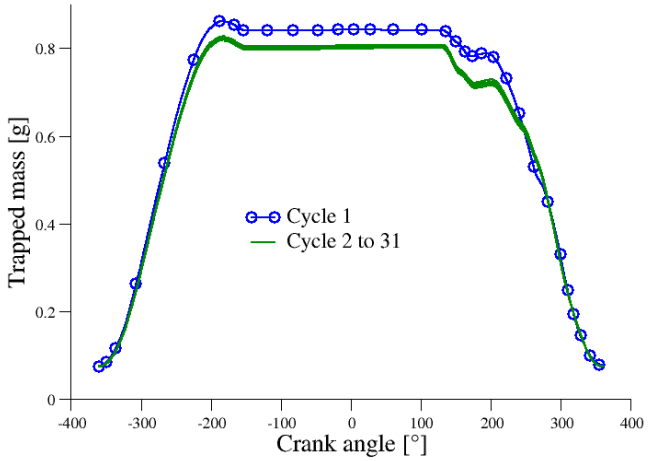
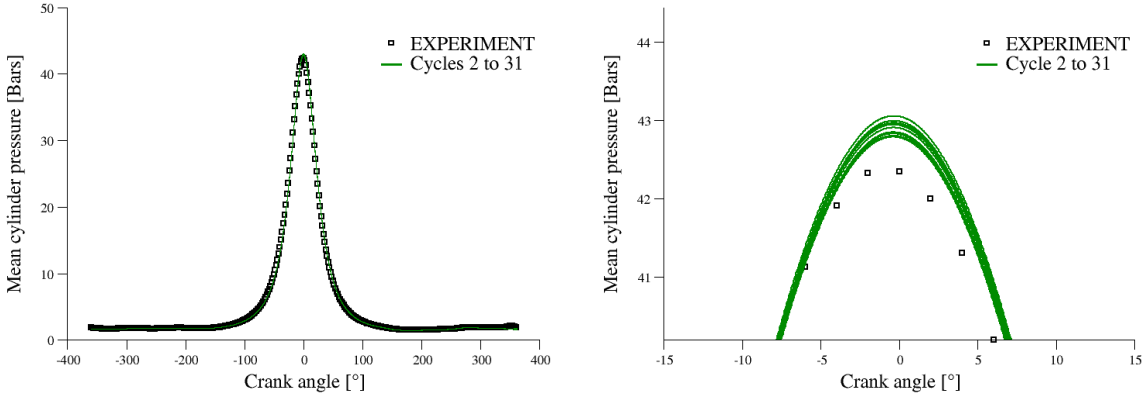


FIG. 5.14: Évolution de la masse enfermée au cours du temps pour les différents cycles consécutifs simulés (point cliquetis).



(a) Vue globale sur l'ensemble du cycle

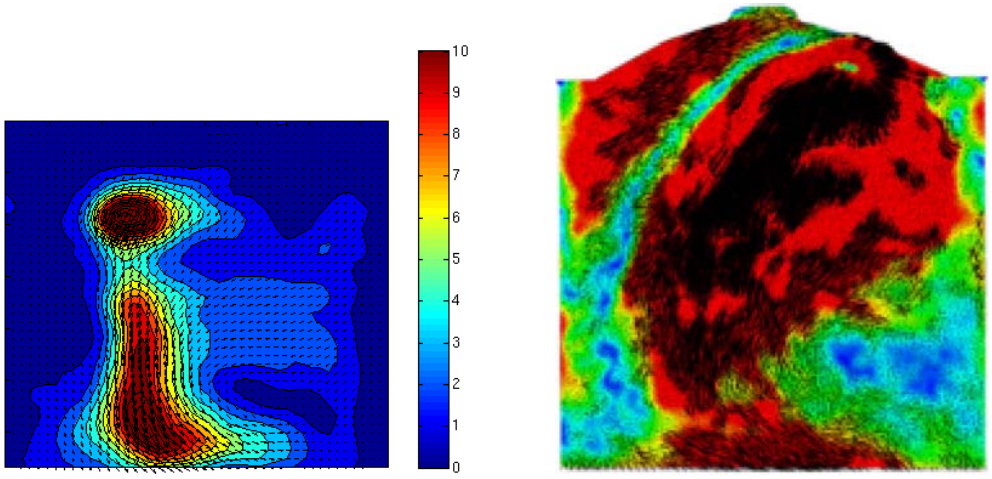
(b) Zoom proche du PMH

FIG. 5.15: Évolution de la pression cylindre au cours du temps pour les 30 cycles LES sur le point cliquetis.

retrouve sur le champ de vitesse LES. Ces visualisations nous permettent donc de confirmer le problème expérimental soulevé lors de la réalisation des essais.

On peut néanmoins comparer qualitativement ces résultats LES aux résultats du point rumble étudié au §5.2. La figure 5.17 permet de comparer les champs moyens de vitesse à deux instants et pour ces deux points de fonctionnement. Durant l'admission (-220°V avant le PMH combustion), le mouvement de tumble est visible dans les deux cas, mais on retrouve de fortes vitesses dans la région proche du piston pour le point cliquetis. Durant la compression (-120°V avant le PMH combustion), une structure aérodynamique similaire pour les deux points de fonctionnement est visible, mais les niveaux de vitesse dans la chambre sont clairement plus élevés pour le point cliquetis. On peut également noter à cet angle vilebrequin des vitesses de l'ordre de 5 m/s dans le toit de culasse alors que les vitesses sont faibles dans





(a) Expérience (b) LES

FIG. 5.16: Comparaison des champs de la norme de la vitesse PIV et LES, à -240°V avant le PMH combustion.

cette même région pour le point rumble.
La LES capture ainsi l'augmentation du niveau de vitesse due à la variation de régime et de charge.

5.4 Conclusions sur les résultats en moteur entraîné

Dans cette partie, les résultats en moteur entraîné sur les deux points de fonctionnement choisis dans la base de données sont présentés. Une validation complète des résultats LES est tout d'abord effectuée sur le point rumble, attestant de la bonne représentativité de la LES par rapport aux résultats expérimentaux tant au niveau des grandeurs quantitatives (masse enfermée, pression cylindre, profils de vitesse) que des comparaisons plus qualitatives au niveau des champs de vitesse. Une augmentation de régime et de charge est également réalisée en conservant la même configuration numérique que pour le point rumble. Elle permet de confirmer la bonne représentativité de la LES sur ce nouveau point de fonctionnement, notamment par l'augmentation du niveau moyen de vitesse reproduit. Les résultats LES sont donc validés, permettant de poursuivre dans les parties suivantes l'étude avec des calculs en combustion sur la configuration opaque. En effet, les géométries de la ligne d'admission et de la culasse des moteurs optique et opaque sont similaires, l'aérodynamique ne pourra donc pas être mise en cause dans d'éventuelles différences entre les résultats expérimentaux et numériques.



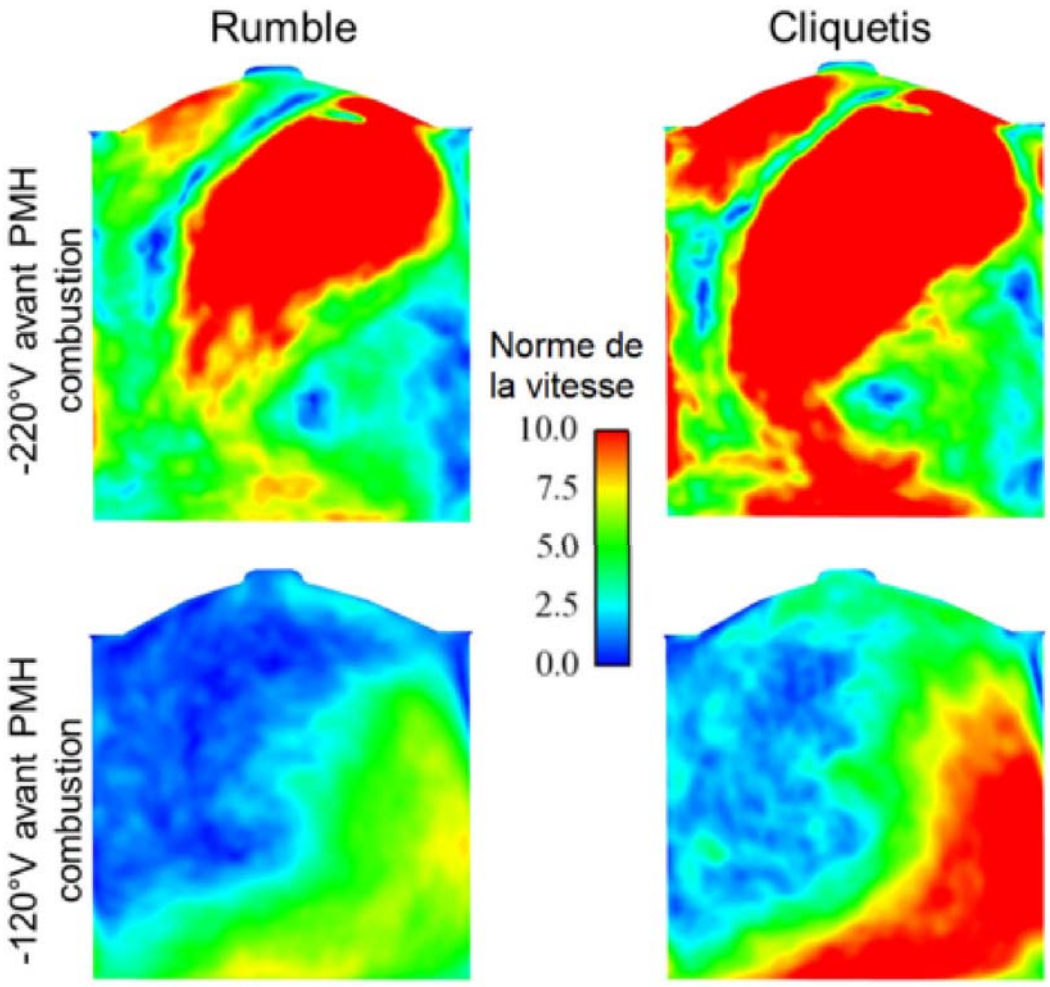


FIG. 5.17: Comparaison des champs LES de la norme de la vitesse pour le point de fonctionnement rumble (gauche) et cliquetis (droite) et pour deux angles vilebrequin, -220˚V avant PMH combustion (haut) et -120˚V avant PMH combustion (bas).

CHAPITRE

6

Etude LES du cliquetis

L'étude de cette partie s'effectue avec prise en compte de la combustion dans la configuration opaque présentée sur la figure 4.7a. L'objectif de ce chapitre est de mettre en évidence la capacité de la LES à reproduire des phénomènes locaux et instationnaires que sont les combustions anormales, et plus particulièrement ici le cliquetis.
Dans une première partie, la configuration numérique utilisée et les différences par rapport à la configuration optique du chapitre précédent sont présentées. L'étude LES du point choisi comme référence fait l'objet d'une deuxième partie, et est suivie par un balayage d'avance à l'allumage permettant de comparer la représentativité de la LES sur une des variations paramétriques disponibles dans la base de données expérimentale. Cette étude est complétée par une analyse 3D de la localisation des départs en auto-inflammation, et l'ensemble de ces travaux fera l'objet d'une présentation au 35^{th} Symposium International de Combustion ([119] disponible à l'annexe A). Enfin, la dernière partie de ce chapitre est consacrée à l'analyse LES des interactions entre l'acoustique et l'auto-inflammation qui semblent jouer un rôle majeur dans le déroulement des combustions anormales. Les travaux de cette dernière partie sont présentés sous la forme d'un article qui sera prochainement soumis dans la revue Combustion & Flame.

6.1 Configuration numérique pour ce point de fonctionnement

Le tenseur des contraintes de sous-maille est décrit par un modèle de Smagorinsky [126], la discrétisation en temps et en espace est assurée par la stratégie numérique hybride ESO_2 (§3.2.1). Cette stratégie est résumée sur la figure 6.1 avec une utilisation du schéma de Lax-Wendroff (LW) [78] pour les phases d'admission et le début de la compression. L'allumage a lieu assez tardivement dans la détente (à +8°V après le PMH pour le point de référence), il est donc primordial de ne pas dissiper la faible turbulence présente dans la chambre après l'éclatement du tumble grâce à l'utilisation d'un schéma d'ordre élevé. Le schéma TTGC [27] est ainsi utilisé durant la compression, mais également durant la combustion pour



assurer une bonne résolution des interactions flamme / turbulence. Il est ensuite remplacé par un schéma de LW durant la fin de la détente et l'échappement.

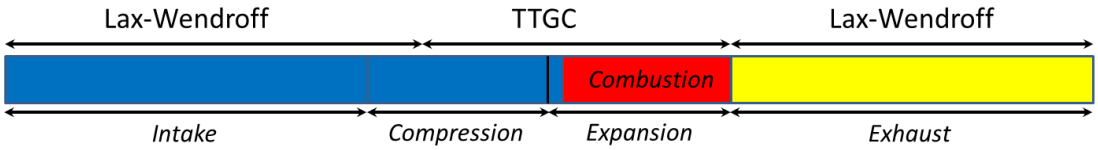


FIG. 6.1: Représentation schématique de la stratégie ESO_2 utilisée pour les calculs en combustion.

Le cycle moteur a été découpé en 40 phases pour cette configuration, et les maillages entièrement tétraédriques comportent entre 3 et 12.4 millions de cellules selon la position dans le cycle. Le tableau 6.1 récapitule les principales tailles de mailles utilisées, et la différence majeure par rapport à la configuration optique s'effectue durant la combustion avec un raffinement de toute la chambre (0,5mm pendant les premières phases de combustion), mais également un raffinement autour de la bougie (0,2 mm sur une sphère de 3 mm de rayon, et 0,35 mm sur une sphère de 6mm de rayon) comme on peut le voir sur la figure 6.2.
Deux points importants sont à noter, le croisement des soupapes n'a pas pu être négligé contrairement à l'étude aérodynamique car il est dans ce cas de l'ordre du millimètre. Les maillages sont quant à eux similaires pour ce point de fonctionnement mais également pour le point rumble (§7) car seul le point de fonctionnement change mais la même géométrie est utilisée.

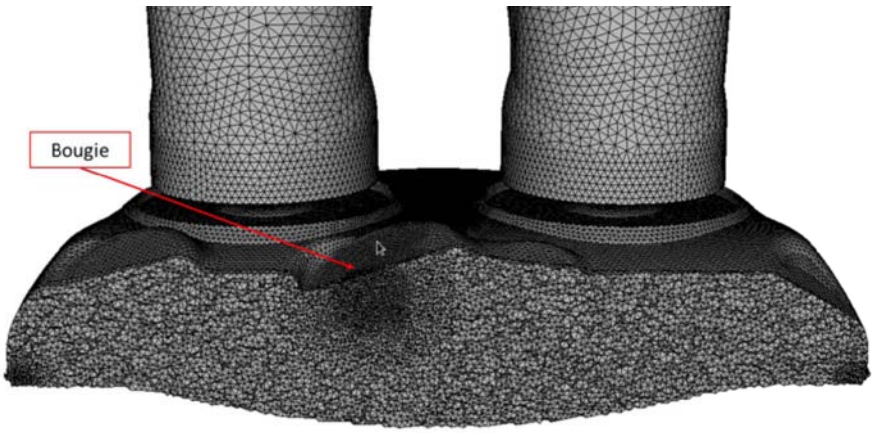


FIG. 6.2: Raffinement autour de la bougie durant la phase d'allumage.

On s'intéresse maintenant aux conditions aux limites mises en place dans les calculs LES. Contrairement au moteur optique, la vanne CPE est à présent montée en aval du plus gros plenum échappement. Le domaine de calcul LES s'étend donc du premier plenum à l'admission jusqu'aux deux volumes de tranquillisation à l'échappement comme on peut le voir sur la figure 6.3. Des conditions en pression et en température issues des capteurs expérimentaux sont imposées au niveau de ces volumes (Fig. 6.4).



Cylindre hors combustion [mm]	0.8
Cylindre pendant combustion [mm]	0.5
Voisinage de l'électrode pendant allumage [mm]	0.5
Tubulures [mm]	de 1 à 6
Levée résiduelle soupapes [mm]	0.06
Levée maximale soupapes [mm]	0.4

TAB. 6.1: Tailles caractéristiques des cellules du maillage.

De plus, en considérant que le mélange admis expérimentalement est très faiblement stratifié en première approximation, un mélange isooctane-air parfaitement prémélangé et à richesse 1 est admis dans le moteur au niveau du plénum d'admission. La table TKI est quant à elle générée en utilisant le mécanisme de Jerzembeck & al. [62] comportant 669 réactions et 99 espèces. Comme on l'a vu précédemment, le croisement de soupapes n'est pas négligeable dans cette configuration, et le balayage des gaz brûlés vers l'échappement qu'il engendre permet d'obtenir un faible taux de gaz brûlés résiduels dans la chambre de combustion. Le mélange est donc faiblement dilué une fois qu'il a été admis.

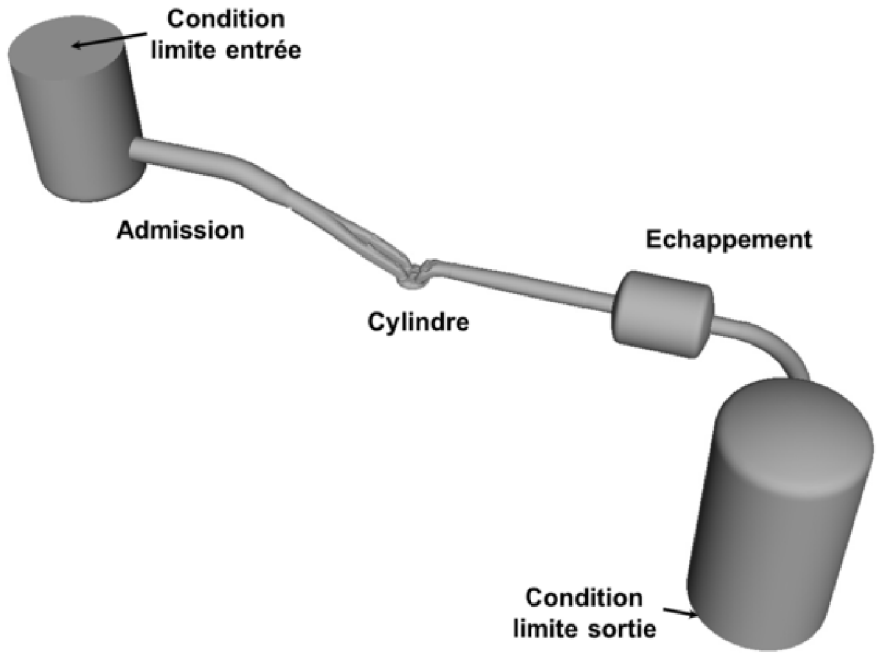
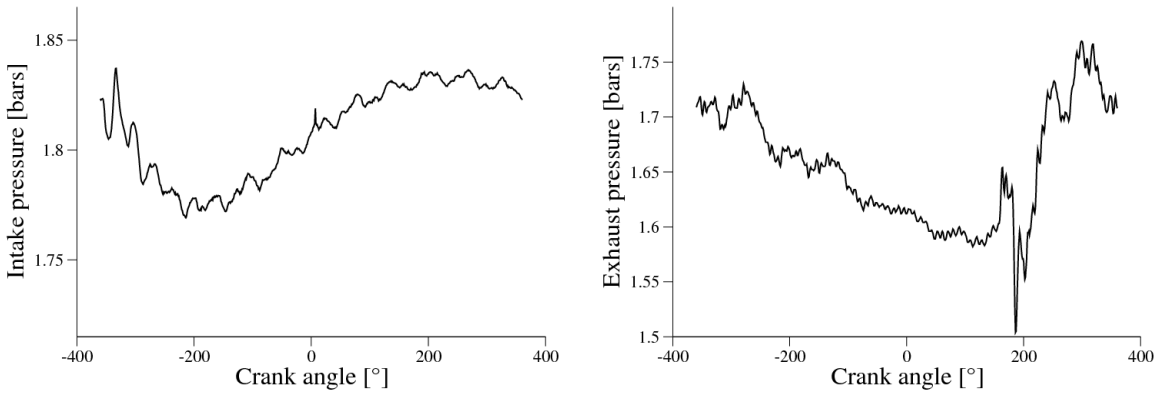


FIG. 6.3: Domaine de calcul simulé en LES pour la configuration opaque.

Enfin, sur le reste des parois du moteur, une température constante au cours du cycle est imposée. Des tests paramétriques ont mis en évidence la forte influence des températures parois sur l'apparition des combustions anormales, les valeurs imposées en LES sont donc issues d'un simulateur thermique 0D détaillé du moteur ICAMDAC réalisé à IFPEN par S. Richard [114]. Il permet d'avoir accès de manière





(a) Pression imposée à l'admission

(b) Pression imposée à l'échappement

FIG. 6.4: Pressions expérimentales imposées en condition aux limite d'entrée et sortie des calculs LES.

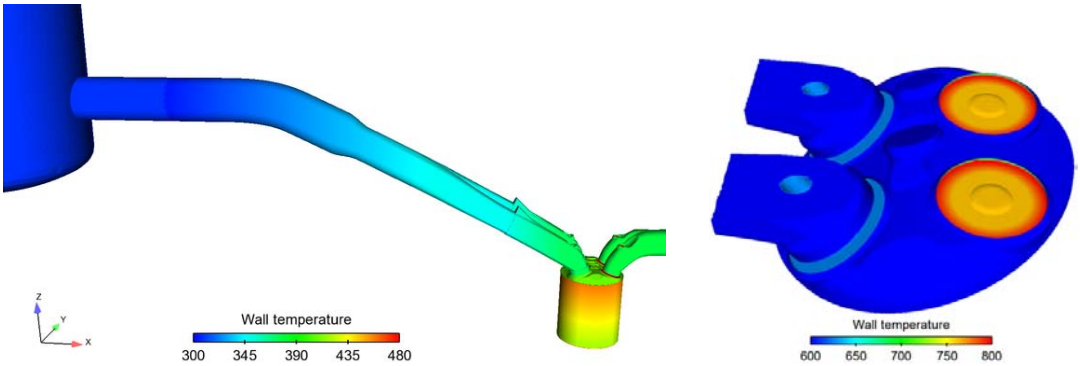
fine aux températures des différents éléments du moteur qui sont récapitulées dans le tableau 6.2.

Haut de chemise	459 K
Bas de chemise	418 K
Piston	497 K
Soupapes admission	639 K
Queues de soupapes admission	383 K
Soupapes échappement	784 K
Queues de soupapes échappement	403 K
Culasse	409 K
Collecteur admission	374 K
Collecteur échappement	379 K

TAB. 6.2: Récapitulatif des températures parois issues du simulateur thermique 0D et imposées dans les calculs LES.

La figure 6.5a représente les températures imposées sur les parois de l'admission et de la chambre de combustion. En considérant la résistance thermique des matériaux constante le long de la ligne d'admission, la conduction thermique suit une loi linéaire permettant d'imposer une évolution linéaire de la température entre le plenum et le collecteur d'admission. De même, une augmentation linéaire est imposée sur la chemise à partir des données du tableau 6.2. Enfin, la figure 6.5b présente un zoom sur la culasse, et on remarque une évolution de la température entre le centre et le bord des soupapes échappement. En effet d'après [38, 89, 121], le bord des températures d'échappement est plus chaud d'environ 50 K sur des points à forte charge comme c'est le cas dans cette étude. Les combustions anormales étant sensibles à la température parois, cet ordre de grandeur est donc utilisé dans nos calculs LES.
Ces valeurs sont calculées avec une température pour le circuit de refroidissement de 363 K, mais le simulateur a également été développé pour prendre en compte une variation de cette température de refroidissement ainsi qu'un changement de régime et de charge.





(a) Température de la ligne d'admission en Kelvin (b) Température de la culasse en Kelvin

FIG. 6.5: Visualisation des températures parois imposées dans les calculs LES.

6.2 Première comparaison sur le point de référence (AVA = -8˚V)

Une première étude est réalisée sur un point cliquetis (1800 tr/min, 19 bars de PMI) et à l'AVA optimale déterminée par l'opérateur (AVA = -8˚V, soit un allumage à +8˚V après le PMH). Elle correspond à l'AVA maximale où l'opérateur considère que le niveau de cliquetis est acceptable. Des points avec +1 et +2˚V d'AVA supplémentaire ont également été effectués expérimentalement pour obtenir du cliquetis, mais l'augmentation d'AVA n'a pas été poursuivie pour éviter d'endommager le moteur. Ce balayage d'AVA fait l'objet d'une étude LES au §6.3.

La géométrie expérimentale est équipée de différents capteurs dont un positionné sur la culasse (Fig. 4.8b, §4.3). Dans les calculs LES, une sonde numérique a été disposée au même endroit de la culasse que le capteur expérimental permettant de comparer les pressions cylindre instantanées entre l'expérience et la LES. La figure 6.6 présentent ainsi les 500 cycles expérimentaux (marron) et les 15 cycles LES (noir).

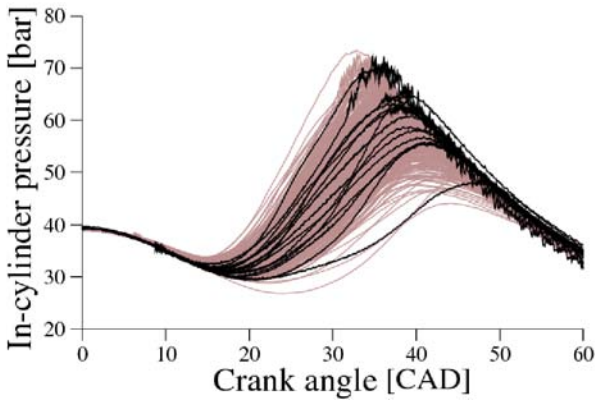


FIG. 6.6: Pression cylindre instantanée au cours du cycle pour l'expérience (marron) et la LES (noir).

Cette première comparaison permet de mettre en évidence plusieurs points de cohérence entre les



deux résultats LES et expérimentaux. Tout d'abord, la pression durant la compression, ainsi que le niveau de pression au PMH sont bien reproduits par la LES avec un faible niveau de fluctuations comme l'expérience. Ceci représente une validation des températures parois utilisées comme conditions aux limites car prédire une pression cohérente au PMH nécessite une bonne prise en compte des transferts thermiques aux parois.
De plus, la LES arrive à bien reproduire l'enveloppe expérimentale avec seulement 15 cycles. Certains cycles brûlent lentement (bas de l'enveloppe) et d'autres ont une combustion rapide atteignant des niveaux de pression plus élevés. La LES capture donc bien les variations cycle-à-cycle, mais également des combustions anormales. En effet, les cycles les plus hauts dans l'enveloppe présentent des fluctuations de pression caractéristiques du cliquetis, attestant que la limite cliquetis sur ce point de fonctionnement est bien reproduite numériquement.

Cependant, une étude plus quantitative est nécessaire pour valider ces conclusions. Comme déjà évoqué, 15 cycles consécutifs ont été simulés en LES, ce qui en fait un échantillon relativement réduit par rapport aux 500 cycles expérimentaux. Les comparaisons statistiques doivent donc être effectuées avec précaution, mais l'objectif principal de cette étude est de mettre en évidence la représentativité de la LES vis-à-vis des combustions anormales, en montrant qu'elle permet de reproduire les tendances observées sur le banc moteur. Ainsi, pour arriver à une comparaison plus quantitative vue l'impossibilité de réaliser plusieurs centaines de cycles en LES avec un temps de retour acceptable, la stratégie inverse a été utilisée et les 500 cycles expérimentaux ont été découpés en échantillons de 15 cycles choisis au hasard. Les post-traitements sont effectués sur l'ensemble des 500 cycles expérimentaux, mais également sur l'ensemble des échantillons de 15 cycles, permettant de fournir une enveloppe minimale et maximale dans laquelle doivent se trouver les résultats LES qui sont toujours effectués sur les 15 cycles disponibles.

Pour commencer, la PMI moyenne, ainsi que son coefficient de variation (COV) déterminé par le rapport de l'écart type sur la valeur moyenne de la PMI pour N cycles sont définis comme :

$$PMI_{moy} = \sum_{i=1}^{N} \frac{PMI}{N} \tag{6.1}$$

$$COV(PMI) = \frac{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N}(PMI - PMI_{moy})^2}{N}}}{PMI_{moy}} \tag{6.2}$$

	PMI moyenne	COV de la PMI
Expérience (Min des échantillons de 15 cycles)	18,62	1,7 %
Expérience (Moy des 500 cycles)	19,01	2,6 %
Expérience (Max des échantillons de 15 cycles)	19,25	3,7 %
LES	19,12	2,7 %

TAB. 6.3: Comparaison de la PMI et du COV de la PMI sur le point de référence (AVA = -8°V).

Le tableau 6.3 présente la PMI et le COV de PMI à l'AVA de référence pour l'expérience et la LES. On remarque ainsi que la PMI prédite par la LES est proche de la PMI sur les 500 cycles expérimentaux,



mais surtout comprise dans l'enveloppe expérimentale issue du découpage aléatoire de l'échantillon expérimental. Cette conclusion est également valable pour le COV de PMI, permettant de valider à nouveau les fluctuations cycle à cycle prédites par la LES.

6.3 Réalisation d'une variation paramétrique de la BDD : balayage d'AVA

Les résultats présentés dans la partie précédente sont prometteurs, et la comparaison est maintenant étendue à un balayage d'AVA qui est une des variations mono-paramétriques disponibles dans la BDD ICAMDAC. Cependant, réaliser 15 cycles LES consécutifs pour chaque AVA est réalisable mais relativement coûteux en temps de calcul, et ce choix n'a pas été jugé optimal pour cette étude. Une nouvelle stratégie numérique est donc présentée dans la partie suivante avant d'analyser en détails les résultats des différentes AVA simulées.

6.3.1 Stratégie mise en place pour limiter le temps de calcul

La LES nécessite des ressources en temps de calcul assez conséquentes, et cette étude s'effectuant dans le cadre d'une thèse CIFRE, l'objectif est de trouver la solution optimale pour un industriel. Simuler les 15 cycles consécutifs à l'AVA de référence de cette étude (§6.2) représente environ 300 000h CPU sur des processeurs Intel Sandy Bridge 2.7GHz. Il est donc inconcevable de simuler plusieurs centaines de cycles à une même AVA comme dans la BDD ICAMDAC, mais également de simuler 15 cycles consécutifs pour les huit AVA différentes qui sont analysées par la suite. Ce balayage d'AVA représenterait alors 120 cycles moteur, environ 2,4 Millions d'heure CPU et surtout un temps de retour incompatible avec la durée de cette étude.

Une stratégie a donc été mise en place pour limiter les ressources nécessaires, mais également le temps de retour des résultats numériques. Les 15 cycles simulés à l'AVA de référence sont utilisés comme conditions initiales (champs de pression, température, vitesse ...), ces solutions pouvant être considérées comme indépendantes car issues d'une simulation multi-cycles. La variation d'AVA n'est alors effectuée qu'en rejouant les phases de combustion des différents cycles.
La mise en place de cette stratégie repose sur deux hypothèses majeures :

- ✓ seule l'AVA est modifiée, mais les points de fonctionnement sont similaires en tout point ;
- ✓ la dépendance d'un cycle à l'autre est supposée faible. En effet, dans un moteur 4 temps, le découplage des phases d'admission et d'échappement limite l'influence d'un cycle sur l'autre. Ceci a également été mis en évidence expérimentalement dans le projet ICAMDAC en réalisant une brusque variation d'AVA. Le fonctionnement du moteur a été stabilisé sur un point limite cliquetis, et en quelques cycles l'AVA a été avancée de 3°V, entraînant l'apparition de cliquetis quasiment à tous les cycles pendant plusieurs dizaines de cycles. Le moteur a alors été brusquement ramené à l'AVA limite cliquetis, et après seulement quelques cycles, l'occurrence du cliquetis s'est stabilisée à son niveau initial, mettant bien en évidence qu'aucun effet d'histoire n'est observé.

Au final, cette stratégie permet de diviser par deux les ressources nécessaires en temps de calcul. Une rapide estimation des économies réalisées peut être effectuée en se basant sur un coût moyen de 5 centimes d'euros par heure CPU. Le multi-cycle à l'AVA de référence étant nécessaire quelle que soit la



stratégie choisie, le temps de calcul est divisé par deux uniquement pour les sept autres AVA que comporte le balayage réalisé ici. En considérant que simuler 15 cycles LES consécutifs représentent 300 000 heures CPU, cette stratégie permet de réaliser une économie de 150 000 heures CPU, soit 7500 euros pour chaque AVA. Sur l'ensemble du balayage, l'économie est donc de plus de 50 000 euros uniquement en heures de calcul.
L'autre avantage de cette nouvelle stratégie est le temps de retour des résultats. En effet, elle permet de lancer en parallèle les 15 cycles pour une même AVA, voire pour plusieurs AVA. En considérant que la disponibilité des machines de calcul est optimale et que les 7 simulations multi-cycles pourraient être calculés en parallèle, le gain minimum au niveau du temps de retour des résultats est estimé à 15 jours. Cependant, ce cas de figure est bien trop idéal, et une réduction du temps de retour grâce à la stratégie proposée ici d'un facteur 3 voire 4 semble plus réaliste.

6.3.2 Comparaisons des résultats pour les différentes AVA

Un large balayage d'AVA entre -6 et -17°V (avec une discrétisation de 1°V) est disponible dans la BDD sur ce point de fonctionnement. Un choix a été fait parmi ces AVA car il n'est pas nécessaire pour valider la représentativité de la LES de réaliser l'ensemble des AVA expérimentales, et notamment les plus faibles pour lesquelles aucun cliquetis n'est détecté expérimentalement. Ainsi le tableau 6.7 récapitule les différentes AVA réalisées en LES par rapport aux AVA disponibles expérimentalement.

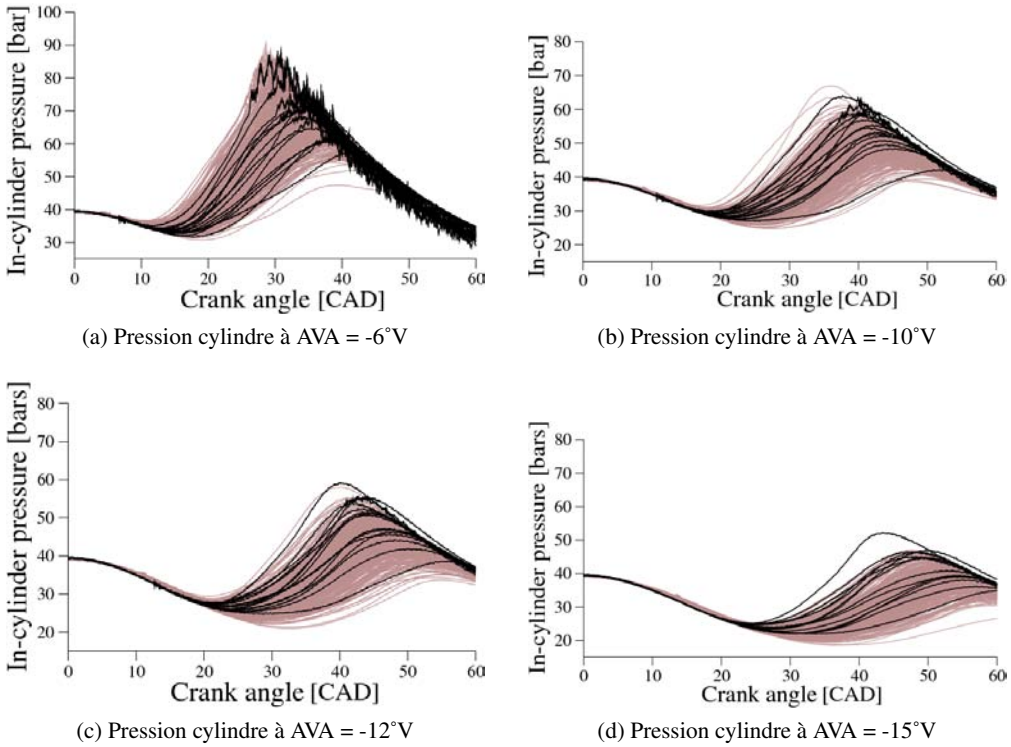
AVA	4	2	0	-6	-7	-8	-9	-10	-11	-12	-13	-15	-17
Exp.	✗	✗	✗	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
LES	✓	✓	✓	✓	✗	✓	✗	✓	✗	✓	✗	✓	✗

FIG. 6.7: Balayage d'avance à l'allumage réalisé en LES et dans la BDD ICAMDAC (Coche verte = disponible / Croix rouge = non disponible).

La discrétisation du balayage LES est plus faible que dans l'expérience, mais on retrouve en plus de l'AVA de référence présentée au § 6.2, 4 AVA supplémentaires et communes entre la LES et l'expérience. L'AVA égale à -6°V permet de valider l'augmentation de la tendance au cliquetis lorsque l'AVA augmente, et les 3 AVA plus faibles que celle de référence valident la décroissance de l'apparition du cliquetis dans ce cas-là, permettant d'analyser la physique d'un cliquetis naissant. On remarque pour finir que 3 AVA beaucoup plus fortes (+4, +2 et 0°V) ont été réalisées uniquement en LES avec pour objectif d'explorer les mécanismes intervenant dans l'apparition d'un cliquetis extrême (§ 6.4). En effet, un des avantages de la LES est de pouvoir explorer des conditions non réalisables en moteur sans craindre de l'endommager. Ainsi l'AVA = -6°V a été déterminée comme limite par l'opérateur de banc, mais la LES peut explorer des AVA beaucoup plus fortes.

Pression cylindre locale :
Une première comparaison est effectuée au niveau de la pression cylindre locale de la culasse. En plus de la figure 6.6 regroupant la pression cylindre pour l'AVA de référence, la figure 6.8 présente l'enveloppe expérimentale (marron) et les 15 cycles LES (noir) pour les AVA -6°V, -10°V, -12°V et -15°V.





(a) Pression cylindre à AVA = -6°V

(b) Pression cylindre à AVA = -10°V

(c) Pression cylindre à AVA = -12°V

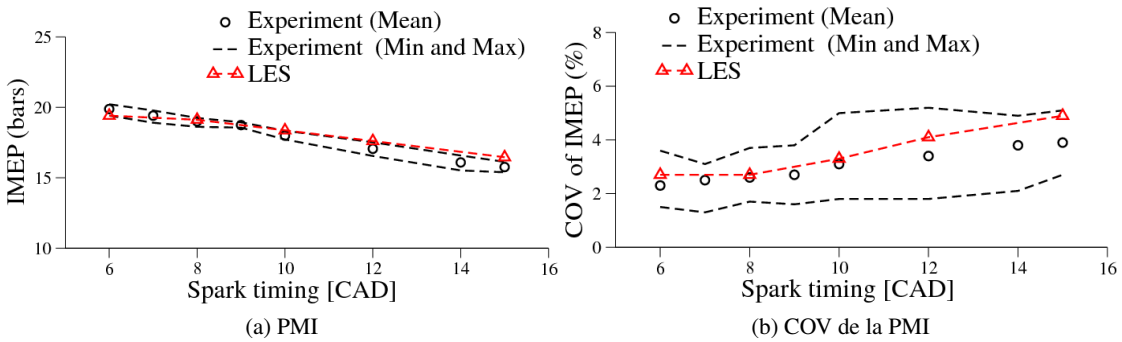
(d) Pression cylindre à AVA = -15°V

FIG. 6.8: Comparaison des pressions cylindres locales entre LES et expérience pour les AVA communes du balayage d'AVA.

Quelle que soit l'AVA choisie, les 15 cycles LES sont contenus dans l'enveloppe expérimentale durant la compression ou la combustion, ce qui constitue une nouvelle preuve de la bonne représentativité de la LES. De plus, si on s'intéresse aux fluctuations de pression, la tendance à l'augmentation de l'intensité du cliquetis avec l'augmentation de l'AVA semble bien capturée par la LES. Aucune fluctuation caractéristique du cliquetis n'est observée pour les AVA -12 et -15°V, alors que ces fluctuations augmentent quand l'AVA augmente, et sont significatives à l'AVA -6°V.

Analyse de la PMI et du COV de la PMI :
Une nouvelle analyse de la PMI et du COV de la PMI peut être mise en place sur les AVA communes. Les résultats sont présentés dans cette section sous forme de graphiques en fonction de l'AVA, la PMI sur la figure 6.9a et son COV sur la figure 6.9b.
Quelle que soit l'AVA analysée, les résultats LES sont cohérents avec l'expérience, tant au niveau de la PMI (même si on peut noter une légère surestimation par la LES à l'AVA = -15°V) que du COV, avec des résultats parfaitement dans l'intervalle expérimental.

Quantification du cliquetis :
Le paragraphe §1.5 a bien mis en évidence qu'à ce jour aucune étude quantitative du cliquetis n'a été réalisée en LES. C'est précisément l'objet de ces travaux dont l'un des points forts est de réaliser exactement les mêmes post-traitements entre l'expérience et la LES (§4.4). Pour rappel de la méthodologie,



(a) PMI (b) COV de la PMI

FIG. 6.9: Evolution de la PMI et du COV de la PMI en fonction de l'instant d'allumage.

une intensité est calculée grâce à un traitement numérique des signaux locaux de pression cylindre. Un seuil est déterminé a posteriori par les expérimentateurs et pour l'ensemble du balayage d'AVA. Lorsque ce seuil est dépassé, le cycle est considéré comme cliquetant.

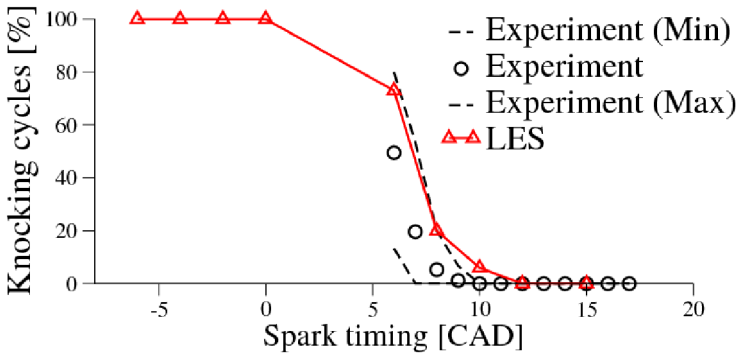
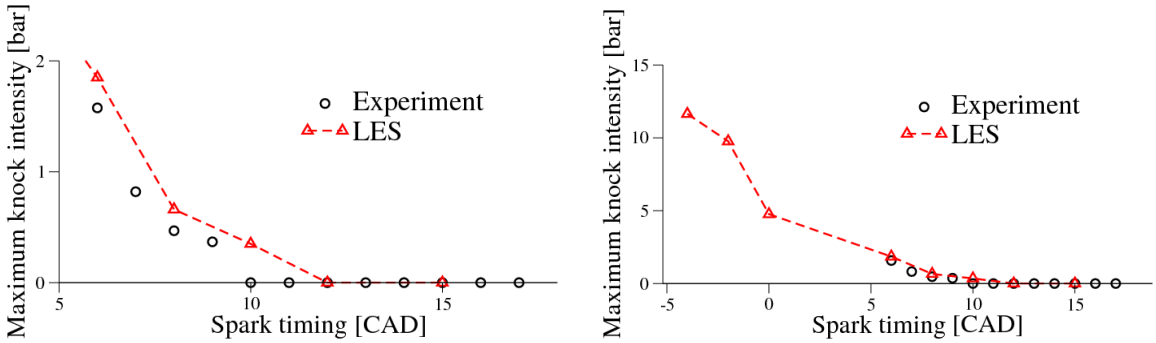


FIG. 6.10: Pourcentage de cycle qui partent en cliquetis en fonction de l'AVA.

On s'intéresse tout d'abord au nombre de cycles qui partent en cliquetis en fonction de l'AVA (Fig. 6.10). Aux faibles AVA, aucun cycle ne cliquète aussi bien en expérience qu'en LES, alors qu'aux plus fortes AVA, tous les cycles LES cliquètent. Entre ces deux extrema, les tendances expérimentales sont bien reproduites par la LES, avec une augmentation similaire du nombre de cycles qui cliquètent lorsque l'AVA augmente. Ce graphique confirme également les observations de la figure 6.8 , sur laquelle les fluctuations de pression liées au cliquetis sont de plus en plus présentes lorsque l'AVA augmente, et aucun cycle ne cliquète à une AVA de -12°V ou -15°V.
On peut également noter que le pourcentage LES devient non nul à AVA = -10°V, alors que le premier cycle détecté expérimentalement apparaît à l'AVA = -9°V. Cette légère différence ne remet cependant pas en cause les tendances observées et bien reproduites par la LES.

Le deuxième facteur important pour réaliser une étude quantitative est l'intensité maximale de cliquetis représentée sur la figure 6.11a pour les AVA communes entre la LES et l'expérience, et sur la figure 6.11b pour l'ensemble du balayage d'AVA. Les niveaux d'intensité prédits sont parfaitement en

accord avec l'expérience pour les AVA communes, et l'accroissement de l'intensité est bien capturée par la LES lorsque l'AVA est de plus en plus forte. De plus, lorsque l'on continue d'augmenter l'AVA, l'intensité croît fortement en LES, ce qui justifie le fait de ne pas avoir fait les essais sur le banc moteur à ces AVA là.
Le calcul de l'intensité du cliquetis étant basé sur les fluctuations du signal de pression cylindre, ces résultats montrent que la LES capture bien la physique du cliquetis grâce à l'utilisation d'un code compressible avec des schémas d'ordre élevés qui prédisent bien la création et la propagation de ces ondes de pression, mais également grâce à un modèle d'AI qui prédit les bons délais et dégagements de chaleur.



(a) Zoom sur les instants d'allumage communs à l'expérience et la LES

(b) Vue générale pour l'ensemble des instants d'allumage simulés

FIG. 6.11: Intensité maximale des cycles qui partent en cliquetis en fonction de l'instant d'allumage.

La dernière validation s'intéresse à l'angle d'apparition de la première auto-inflammation pour les cycles détectés comme partant en cliquetis. Cet angle est calculé pour chaque cycle à partir de la dérivée temporelle du dégagement de chaleur moyen dans la chambre. Comme pour l'intensité du cliquetis, une valeur seuil est déterminée arbitrairement par les expérimentateurs. Lorsque cette dérivée dépasse le seuil choisi (qui reste le même pour les résultats expérimentaux et numériques), l'angle de départ en auto-inflammation est connu. Une moyenne est alors effectuée sur l'ensemble des cycles détectés comme contenant du cliquetis pour une même AVA, et la figure 6.12 présente l'évolution de cet angle moyen en fonction de l'AVA. On remarque que les résultats LES sont parfaitement dans l'intervalle expérimental pour les AVA communes. De plus quand on augmente l'AVA, le cliquetis apparait de plus en plus tôt, mettant en évidence que le modèle d'auto-inflammation prédit bien les bons délais quelles que soient les conditions thermodynamiques.

L'ensemble des post-traitements quantitatifs présentés précédemment permettent de valider le nouveau couplage numérique mis en place dans cette thèse. De plus, la cohérence des résultats avec l'expérience souligne la représentativité de la LES, mais elle permet également de montrer qu'un échantillon de seulement 15 cycles LES permet déjà de capter les bonnes tendances expérimentales tout en conservant un coût en temps de calcul raisonnable.

6.3.3 Analyse 3D des spots de départ en AI

Un des gros avantages de la simulation numérique, et en particulier de la LES, est de pouvoir découpler facilement les différents phénomènes qui se déroulent au cours d'un cycle moteur. Les deux

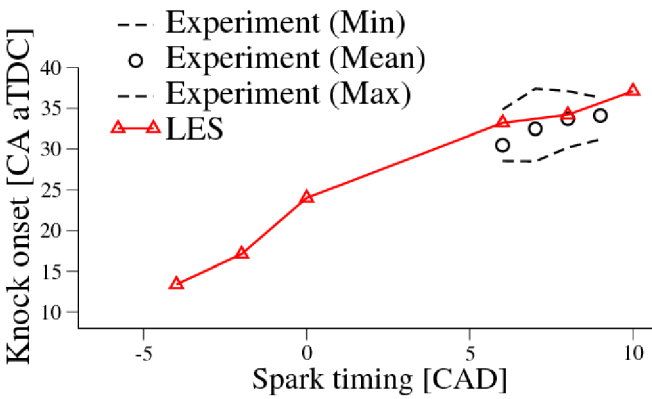


FIG. 6.12: Angle moyen de l'ensemble des cycles qui partent en auto-inflammation en fonction de l'AVA.

variables d'avancement du modèle ECFM-LES et TKI-LES permettent ainsi de suivre l'avancement de la flamme de prémélange et de l'AI de manière indépendante comme l'illustre la figure 6.13. Ainsi, une isosurface de variable d'avancement $\tilde{c}_\Sigma$ de la FP permet de visualiser la position du front de flamme au moment de l'AI, qui est quant à lui localisé grâce à une isosurface de variable d'avancement $(1-\tilde{c}_\Sigma)*\tilde{c}_{ai}$ à 0.9 (en jaune sur la figure 6.13).

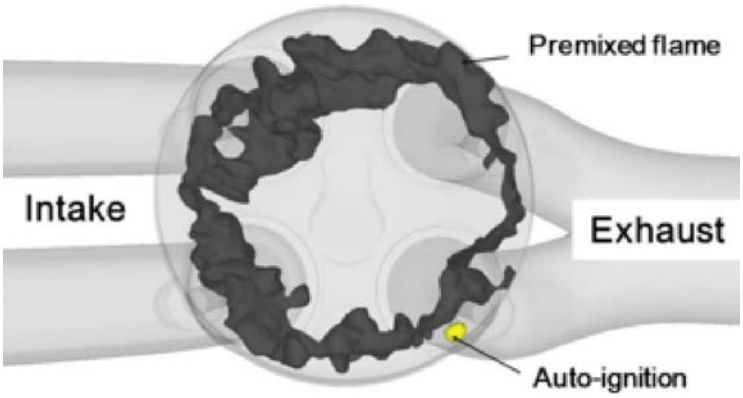


FIG. 6.13: Visualisation au moment du départ en AI d'une isosurface de variable d'avancement liée à la flamme de prémélange (gris) et à l'auto-inflammation (jaune).

Ainsi, en réalisant pour chaque cycle LES une isosurface de $(1-\tilde{c}_\Sigma)*\tilde{c}_{ai}$ juste après le déclenchement de l'AI, il est possible de localiser dans la chambre les départs en AI. Le facteur $1-\tilde{c}_\Sigma$ devant la variable d'avancement liée à l'AI $\tilde{c}_{ai}$ permet de déterminer l'avancement en AI non conditionné à la zone de gaz frais. La figure 6.14 permet de visualiser les spots initiaux d'AI grâce à une vue de dessous de la chambre de combustion (en haut) et une vue de côté (en bas) pour trois AVA différentes. Pour les points de fonctionnements à AVA = -8°V et AVA = -6°V, plusieurs cycles de l'échantillon de 15 cycles LES partent en AI, et l'ensemble des isosurfaces sont regroupées sur une même image pour chaque AVA.
Deux phénomènes sont mis en évidence sur ces images. Les départs en AI sont principalement localisés



du côté échappement de la chambre, ce qui était attendu à cause des températures plus élevées des soupapes échappement. Cependant, la convection thermique liée à l'écoulement résiduel dans la chambre semble avoir un rôle, et la vue de coté (Fig. 6.14 bas) permet de visualiser la répartition volumique des départs en AI dans le moteur. Des conclusions similaires sont disponibles dans la littérature [60] pour des moteurs fortement chargés et dans des conditions de fonctionnement relativement proches de la configuration étudiée dans cette thèse.
On peut noter tout de même la présence de départs en AI coté d'admission, deux pour l'AVA = -8°V et un seul à l'AVA = -6°V. En effet, le tumble résiduel au moment de l'allumage convecte la flamme coté échappement. Cependant, si les conditions thermodynamiques à l'échappement ne sont pas favorables à une AI, les gaz frais à l'admission disposent de plus de temps pour atteindre leur délai. Ceci explique dans certains cas les départs en AI coté admission malgré les températures de soupapes moins élevées que celles d'échappement.

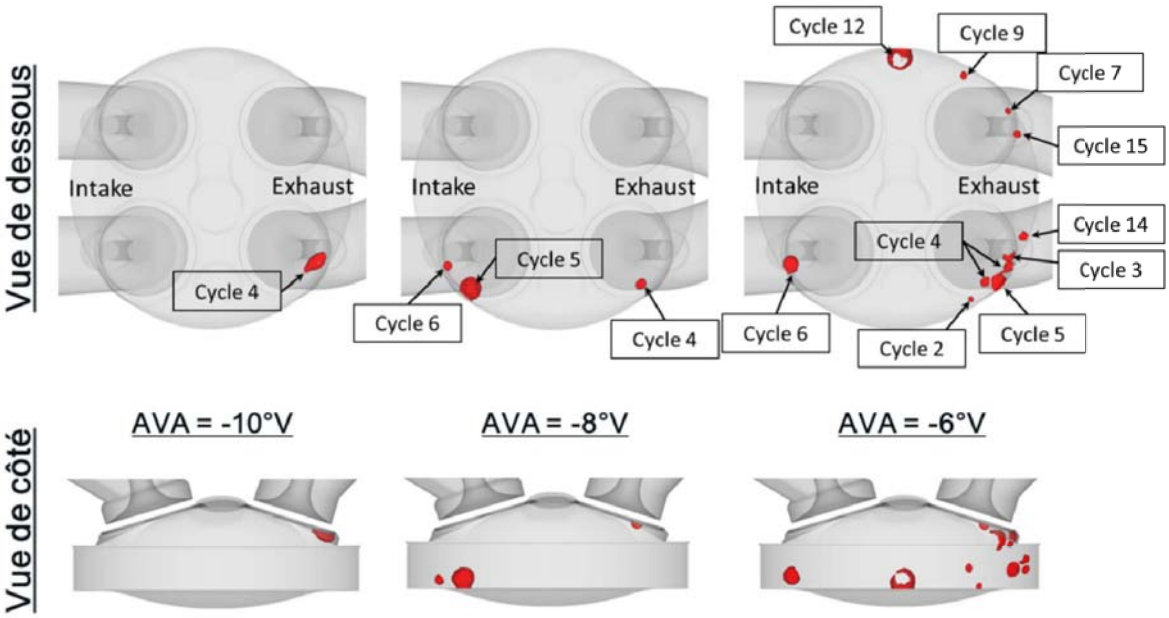


FIG. 6.14: Visualisations des départs en AI à partir d'une vue de dessous (haut) et de coté (bas) de la chambre de combustion.

6.4 Analyse de la transition vers la détonation

Les résultats précédents permettent de valider la représentativité de la LES quant à la prédiction du cliquetis. De plus, au vue des fortes intensités atteintes lors des allumages les plus précoses, des phénomènes complexes et non encore élucidés semblent se mettre en place durant la combustion. Une étude LES directe des interactions auto-inflammation/ondes de pression est ainsi effectuée ici sur le même point de fonctionnement. En effet, la LES permet de visualiser directement les phénomènes physiques locaux et instantanés qui se déroulent dans la chambre de combustion pour en améliorer la compréhension.

Cette étude est présentée ici sous la forme d'une version étendue d'un article intitulé "LES study of deflagration to detonation mechanisms in a downsized spark ignition engine", et soumis pour publication dans la revue *Combustion and Flame*.

6.4.1 abstract

Using 15 LES cycles of a high load/low speed spark ignition engine operating point, two different fresh gases autoignition regimes called knock and super-knock are analyzed. A direct "a posteriori" analysis of pressure waves and autoignition heat release observed in LES is proposed. It reveals that low to moderate knock intensity, corresponding to late spark timings (ST) is characterized by one or several random autoignition (AI) spots which consume the surrounding fresh gases without coupling with the AI heat release. On the contrary, the highest knock intensities correspond to what is usually called super-knock, a very intense knock observed under pre-ignition conditions or for very early ST, as done in this study. LES shows that the pressure waves generated by one or a couple of AI spots are strong enough to induce locally a strong fresh gases temperature increase leading itself to a substantial decrease of the AI delay. This allows to generate a coupling between the pressure wave and the AI reaction rate which reinforce each other, leading to maximum pressures and propagation speeds close to those of a detonation. These results therefore strongly support the hypothesis proposed in the literature that super-knock is characterized by a deflagration to detonation transition (DDT). An "a priori" analysis is also performed thanks to the use of a local detonation indicator based on Bradley's DDT diagram. It is shown that this tool not only predicts the change of combustion regime as a function of the ST, but it also roughly succeeds in predicting the location and time of appearance of the DDT in the chamber. Unfortunately, the first AI spot is not always responsible for the DDT, implying that using cold flow LES to calculate the detonation indicator instead of a reacting LES as proposed here, would lead to a failure of the indicator in many cases.

Keywords : LES, Spark ignition, Engine, Combustion, Knock, Super-knock, Deflagration to detonation transition



6.4.2 Introduction

In the last decade downsized spark ignition (SI) engines running under high loads have become more and more attractive for car manufacturers because of their increased thermal efficiency and lower CO_2 emissions. However, high loads also induce more severe thermodynamic conditions in the cylinder, promoting the occurrence of abnormal combustion phenomena like knock or super-knock.
In a normal cycle, a premixed flame is generated at spark timing (ST) by the spark plug, and its propagation leads to an increase of pressure and temperature of the end gases that are located between the premixed flame front and the cylinder walls. In the case of knock, the autoignition (AI) delay is short enough in part of these fresh gases to allow AI prior to the complete consumption of the fresh gases by the premixed flame. Knock therefore highly depends on the premixed flame combustion velocity as well as on species composition and temperature fluctuations in the cylinder, which all influence the autoignition delays, making knock a recurrent but non-cyclic phenomenon. The experimental study of such phenomenon is difficult but some attempts are available in the litterature [127]. On the other hand, preignition, also called LSPI (Low Speed Pre-Ignition) [4] corresponds to the autoignition of a fresh gases spot before ST that acts as a spark plug itself, leading to the creation of a premixed flame before ST. A pre-ignition cycle can be schematically understood as a cycle experiencing a very early ST as experimentally shown in [4]. As the premixed flame develops earlier in a pre-igniting cycle (or with a very early ST), autoignition of the end gas is often observed, but not systematically [134, 53]. If this autoignition event is weak, it is similar to knock under standard spark ignition, this is why it is still called knock. On the contrary, extremely strong autoignitions can be observed at a very low frequency, leading to a fast and intense pressure rise [134, 4, 53]. Physically, this means that a large amount of fresh gases autoignites suddenly, leading to extreme pressure levels reaching several hundred bars. These extreme knock events are called super-knock.

Flame speeds between 1 and 2 km/s were measured in some specific super-knock operating conditions [67, 66], which are at least two orders of magnitude larger than the turbulent premixed flame speed. Besides, the pressure levels recorded by pressure transducers indicate that the pressure rise can be sometimes larger than the constant volume pressure increase observed in a homogeneous autoignition [53]. These observations suggest that super-knock is characterized by a deflagration to detonation transition (DDT). As super-knock causes the rapid destruction of the engine, and is extremely fast (a couple of crank angle degrees (CAD)), a detailed experimental investigation is nearly impossible.

This motivated the use of CFD for better understanding knock and super-knock. RANS simulations were used to predict and understand the occurrence of knock [29, 77, 125] and super-knock [112]. However the RANS approach is limited to the description of the mean cycle, which is not necessarily subjected to knock or super-knock because of their sporadic nature. New approaches have been developed for the study of DDT in piston engines thanks to the use of probability functions to extract knock statistics from RANS simulations [83, 105]. A direct analysis of DDT still remains difficult to achieve in RANS because all variables correspond to a mean engine cycle which does not provide local time-resolved informations. Large Eddy Simulation (LES) appears as an attractive alternative because it allows the simulation of individual cycles, thus reproducing the sporadicity of abnormal combustions. Our recent study [119] shows that LES can capture knock characteristics (frequency of occurence, intensity) over a wide range of ST. In addition, an exponential increase of knock intensity was observed at the earliest ST, suggesting the occurence of a DDT as previously mentioned but without clear evidence.



The present paper focuses on the mechanisms leading to detonation, when going from standard knock to super-knock, using LES for a high load / low speed operating point presented in [119]. The LES models employed and knock statistics obtained for this operating point are briefly presented in Sec. 6.4.3 along with comparisons to experimental data.
A first a priori analysis is performed in Sec. 6.4.4 applying the theoretical DDT indicator proposed Bradley and coworkers [14, 51, 13, 64] to LES fields. Then, an a posteriori analysis of the existence of a DDT is performed in Sec. 6.4.5 using the pressure waves and autoignition heat release from the LES fields. Three operating points with ST representative of moderate, strong and super-knock are analysed using different cycles to highlight the large cycle-to-cycle variability of autoignition phenomena in piston engines.

6.4.3 Quantification of knock using LES

6.4.3.1 LES model and solver

The AVBP compressible and reactive LES solver co-developed by IFPEN and CERFACS [96] was used in this study. The premixed turbulent flame is described by the flame surface density model ECFM-LES [136] and the spark ignition model ISSIM [28], while the autoignition reaction rate is given by the tabulated autoignition model TKI (Tabulated Kinetics of Ignition) [25]. First simulations performed with both ECFM-LES and TKI [81] showed that the premixed flame and autoignition phenomena were not fully decoupled. This is why the present LES were performed with improved versions of ECFM-LES, ISSIM and TKI models proposed in [119]. In this version, the autoignition and flame propagation are described by two independant progress variables $\tilde{c}_{ai}$ and $\tilde{c}_{\Sigma}$ that allow a full decoupling of both phenomena. The interested reader will find the details of this improved version in [119].

6.4.3.2 Knock statistics from LES

The operating point computed here corresponds to the high load / low speed operating point of [119], summarized in Tab. 6.4.

For this case, Fig. 6.15, extracted from [119], shows that LES is able to capture the in-cylinder pressure envelope recorded at the cylinder head for different spark timings. The 15 LES cycles (black) agree well with the 500 experimental cycles (brown) in terms of pressure level and knock occurrence as pressure oscillations characterizing this phenomenon are only present for cycles presenting a fast propagative combustion (i.e. cycles in the upper part of the pressure envelope). LES and experiment also agree in terms of the angle of knock appearance and the percentage of knock occurrence at all ST values.
The maximum knock intensity is presented in Fig. 6.16a for the experimentally available ST. This intensity is calculated both for experiments and LES using a numerical filtering algorithm of the local in-cylinder pressure signal. LES predicts correct levels of maximum intensities, and captures the intensity increase as the spark timing decreases. Fig. 6.16b presents the same quantity for all the spark timings computed in LES. When the spark timing occurs before Top Dead Center (bTDC), an exponential increase of the maximum intensity is observed, which suggests complex combustion behavior. This phenomenon is well known, but still misunderstood.

Engine manufacturers are used to correlate knock intensity with the Burned Mass Fraction (BMF) by autoignition [65, 117], using a linear relationship between these two quantities. The same analysis is car-



Engine features	single cylinder
Cylinder capacity (cm^3)	400
Dead volume (cm^3)	42.2
Bore (mm)	77
Stroke (mm)	85.8
Conrod (mm)	132.2
Compression ratio	10.64
Operating point	**Knock**
RPM [tr/min]	1800
IMEP [bars]	19
Intake pressure[bars]	1.802
Intake temperature [K]	308.05
Spark timings	- 4 CAD to 15 CAD aTDC
Fuel	Isooctane

TAB. 6.4: Engine features and operating conditions.

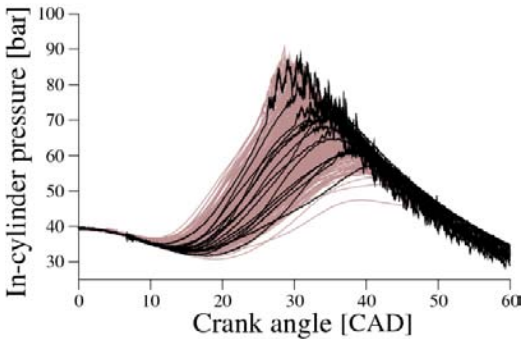


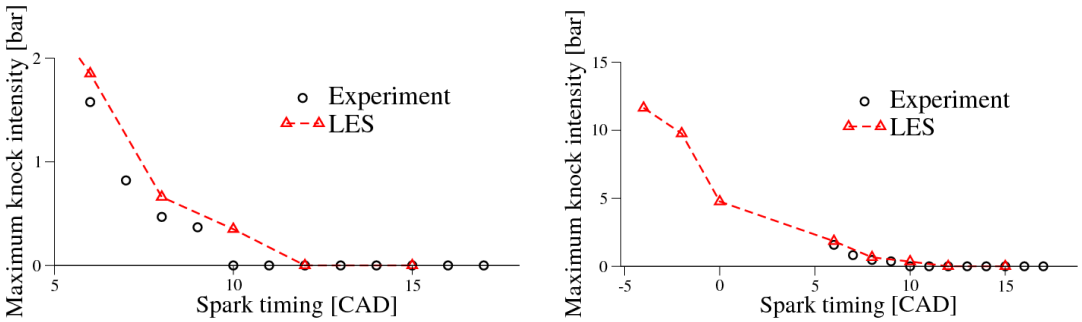
FIG. 6.15: Local in-cylinder pressure with a spark ignition at 6 CAD aTDC [119].

ried out here using the LES results, and Fig. 6.17 presents the evolution of the maximum knock intensity against the percentage of mass burned by AI. The linear correlation is confirmed by LES, with a knock intensity proportional to the mass burned by AI below a knock intensity of 4.5 bar. However, LES shows a second regime at the earliest ST, which is characterized by a faster increase of the knock intensity. For the present conditions, this regime appears approximately for ST at and before Top Dead Center (bTDC).

6.4.3.3 Definition of the knock regimes

Based on Fig. 6.16 and 6.17, three levels of knock intensity can be identified as proposed in Tab. 6.5. The latest ST leads to a low knock intensity which is qualified as "trace to moderate knock", and roughly corresponds to the maximum acceptable knock level in a production SI engine. Another regime is qualified as "strong knock" for cases with a maximum intensity comprised between 1 and 5 bars, and a knock





(a) Focus on common ST between LES and experiment

(b) Full ST sweep

FIG. 6.16: Maximum intensity of knocking cycles on the spark timing sweep [119].

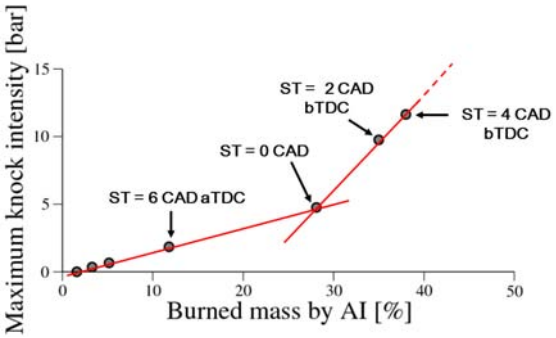


FIG. 6.17: Evolution of the maximum knock intensity over the percentage of mass burned by autoignition for the LES spark timing sweep.

frequency around 50%. This regime extends from ST = 6 to 0 CAD after Top Dead Center (aTDC). ST at TDC therefore corresponds to a threshold point between the strong knock regime and the third one. In this last regime, corresponding to ST of 2 and 4 CAD bTDC, the premixed flame propagation happens very early in the cycle and is followed by the most intense knock events. As discussed in the introduction, these features are characteristic of a pre-ignition followed by super-knock, although here they are not obtained through a pre-ignition of a fresh gases hot spot, but through a very early ST, as experimentally done by Amann et al. [4]. This last regime is consequently called 'super-knock" regime.

Spark Timing	-4	-2	0	6	8	10
Knock	Super-knock		Strong knock		Trace/moderate knock	

TAB. 6.5: Classification of knock intensity for the several ST of the chosen engine configuration.



6.4.4 Deflagration to detonation transition analysis using Bradley's diagram

Several authors in the litterature have discussed the possible relation between strong knock events and deflagration to detonation transition (DDT) in super-charged SI engines [14, 51, 83, 105, 122]. The strong increase of knock intensity at the earliest ST could be explained by such a transition, leading to local very high pressure levels in the combustion chamber.
However, this statement has never been demonstrated as it is a high frequency phenomenon difficult to visualize in a real engine test bench, and numerical tools like RANS were not able to represent it.
Based on the LES results of Robert & al. [119], we first propose an a priori analysis of DDT using Bradley's diagram [14].

6.4.4.1 Bradley's theory on DDT

According to Zel'dovich classification of combustion regimes [142], two conditions seem to be necessary to initiate a coupling between pressure waves and an AI front : a smooth gradient in the fresh gases surrounding the initial AI spot, and an AI propagation velocity close to the one of the pressure waves. Based on these observations, Bradley & al. [14] proposed two parameters representing the coupling conditions of a DDT. The first parameter ε is given by :

$$\varepsilon = \frac{l/a}{\tau_e} \tag{6.3}$$

with l the length over which the temperature gradient is considered as constant. In the present LES, l is fixed as a first approximation equal to 1 cm thanks to a priori visualizations of instantaneous LES temperature fields at ST. "a" is the sound speed and τ_e the excitation time which represents the time to go from 5 % to the maximal heat release. In LES, the excitation time is computed using the inverse of the maximum of the AI reaction rate extracted from the TKI table. This non-dimensional parameter ε compares the time for the pressure wave to travel for a distance l to the excitation time, and can be seen as an emission parameter which allows to determine if the AI can feed the pressure wave and lead to an increase of its amplitude.

A second non-dimensional parameter ξ is proposed to compare the AI and pressure wave propagation velocities. These two velocities have to be of the same order to expect that a coupling mechanism takes place. The AI velocity is defined as a delay gradient $\frac{\partial \tau}{\partial x}$, and the parameter ξ is expressed as :

$$\xi = \frac{a}{u} = \frac{a}{\frac{\partial \tau}{\partial x}} \tag{6.4}$$

In the present LES calculations, the ratio $\frac{\partial \tau}{\partial x}$ is estimated based on a more precise AI delay than the total AI delay estimated between values of the AI progress variable $c_{ai} = 0$ and $c_{ai} = 1$. The new one corresponds to the AI delay between c_{ai} at the local point considered and the value of $c_{ai} = 0.5$.

Based on these two parameters, Bradley & al. [14] proposed a diagram which plots ξ as a function of ε to locate the developing detonation peninsula (Fig. 6.18). Performing Direct Numerical Simulations (DNS) to determine the values of the parameters ξ and ε at various thermodynamic conditions (represented by crosses and triangles in Fig. 6.18), three regimes can be established :



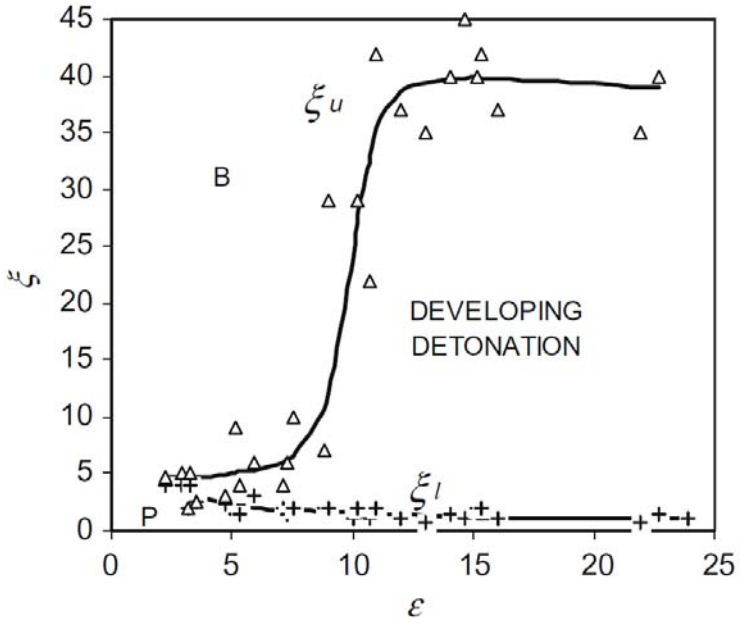


FIG. 6.18: Bradley & al. diagram [14].

✓ $\xi > \xi_u$
This regime corresponds to the region B of the diagram. A subsonic deflagration occurs in such conditions which is the classical flame propagation mode. No coupling is observed with the pressure wave ;

✓ $0 < \xi < \xi_l$
This second regime (region P) corresponds to a thermal explosion, all the fresh gases remaining in the chamber autoignite at the same time due to a too small temperature gradient ;

✓ $\xi_l < \xi < \xi_u$
This last region corresponds to conditions where a coupling is possible between acoustics and AI

Peters & al. [105] give the following expressions for the limit lines ξ_l and ξ_u of the Bradley diagram :

$$\xi_l = 21.0 + 17.0 \tanh\left((\varepsilon - 10)/2\right) \tag{6.5}$$

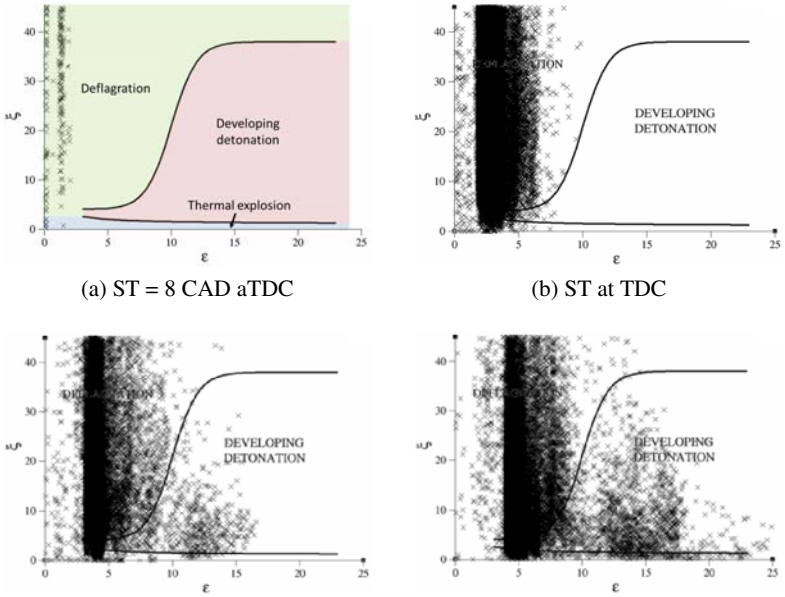
$$\xi_u = 1.0 + 4.8/\varepsilon \tag{6.6}$$

6.4.4.2 Application to the LES cycles

In this study, the two parameters ξ and ε are computed at each instant and location of the cylinder using LES which gives local and instantaneous gradients. The different grid points over the whole cycle can be plotted in the detonation diagram to observe if some of them are close to detonate. However, to improve the readability of the figure, only grid points of the 15 LES cycles which are close to the autoignition delay (i.e. points with an AI progress variable c_{ai} comprised between 0.1 and 0.9) are represented. This



selection criterion allows to suppress points which are not autoigniting ($c_{ai} < 0.1$) and points where AI is already over ($c_{ai} > 0.9$). Results are presented on the four graphs in Fig. 6.19, each one corresponding to a different ST.
At ST = 8 CAD aTDC (Fig. 6.19a), only a few points appear in the graph meaning that only a very small fraction of the fresh gases volume is close to auto-ignite in the cylinder. In addition, these nodes are clearly in the deflagration zone. Fig. 6.19b confirms that the ST at TDC is a transitional point. A higher number of points are close to autoignite, and some of them are in the transition zone between deflagration and detonation. The tendency of moving from deflagration to detonation zones when ST decreases is confirmed by Fig. 6.19c and 6.19d, which are respectively at ST = 2 and 4 CAD bTDC. When ST decreases more and more grid points are close to AI, and the large amount of points located in the detonation zone for ST = 4 CAD bTDC confirms that a DDT could be responsible for the high knock intensities recorded at this ST.



(a) ST = 8 CAD aTDC (b) ST at TDC

(c) ST = 2 CAD bTDC (d) ST = 4 CAD bTDC

FIG. 6.19: Scatterplot of grid nodes close to autoignite in the detonation diagram.

Based on Bradley's theory, the diagrams of Fig. 6.19 give an a priori overview of the possible existence of a DDT which seems in good agreement with the evolution of knock intensity with ST. This agreement is in our opinion largely due to the usage of LES fields to compute parameter ξ : in LES, the spatial gradient of the delay is computed from the composition and temperature field of a real cycle while in RANS, it becomes extremely difficult to decorrelate which part of the temperature gradient is due to cycle-to-cycle fluctuations (which should not enter in the calculation of the two parameters) and which part is due to spatial gradients. The situation is even worse in the experiment where it is extremely difficult to measure a three dimensional temperature field.



6.4.4.3 Detonation indicator for direct visualization

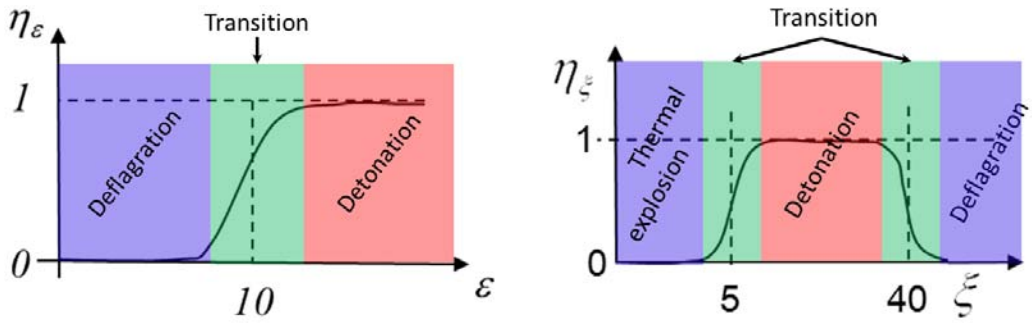
The above scatter plots allow to figure out whether a DDT could occur or not, but they do not bring information on its actual location in the chamber. The easiest way to localize the DDT would be to visualize simultaneously the two parameters ξ and ε on 2D planes, which is not an easy task. For this reason, a detonation indicator called $\mathbb{R}$ is proposed in this study using efficiency functions for each non-dimensional parameter ξ and ε. Based on the detonation peninsula of the Bradley diagram, the transition to detonation is in practice set around the values of $\varepsilon = 10$ and $5 < \xi < 40$. This allows to define efficiency functions for ξ and ε using hyperbolic functions as follows :

$$\eta_\varepsilon = \frac{1}{2}\left(\tanh\left(\xi - 10\right) + 1\right) \tag{6.7}$$

$$\eta_\xi = \frac{1}{2}\left(\tanh\left(\xi - 5\right) - \tanh\left(\xi - 40\right)\right) \tag{6.8}$$

These two expressions equal 0 in the deflagration zone or in the thermal explosion zone, 1 in the detonation peninsula and are between 0 and 1 in the transition zone (Fig. 6.20a and 6.20b). A detonation indicator is then here defined as the product of these two efficiency functions :

$$\mathbb{R} = \eta_\xi * \eta_\varepsilon \tag{6.9}$$



(a) η_ε profile (b) η_ξ profile

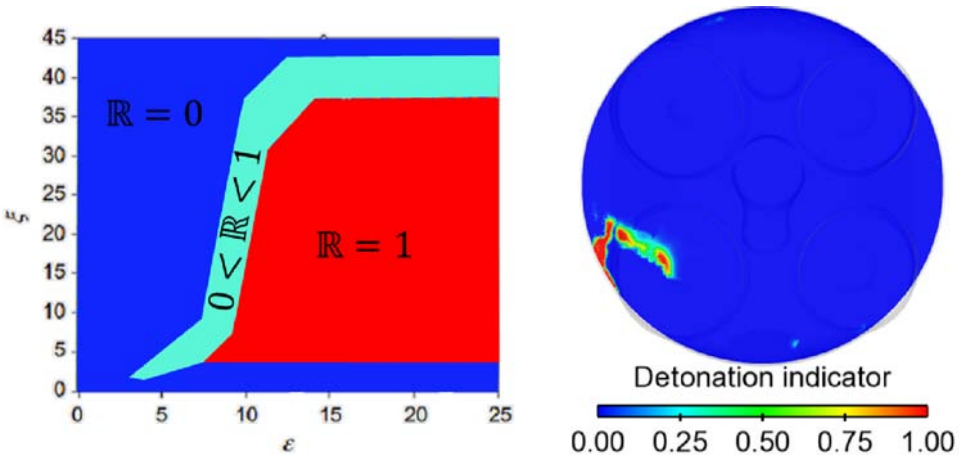
FIG. 6.20: Profile evolutions of efficiency functions η_ε (6.20a) and η_ξ (6.20b)

Plotting the values of $\mathbb{R}$ in the diagram of ξ against ε (Fig. 6.21a) allows understanding that the regions where the indicator reaches the value of 1 will be located in the detonation peninsula. An example of a cut plane obtained from instantaneous LES fields is given in Fig. 6.21b. The detonation indicator equals one in a small region where a DDT is establishing, and zero in the rest of the chamber. This detonation indicator will be used in Sec. 6.4.5 to evaluate its ability to predict the localization of DDTs.

6.4.4.4 Limitations of the a priori analysis

Although the above results are encouraging, such an analysis is limited in its predictivity due to major assumptions :





(a) $\mathbb{R}$ values in the detonation diagram

(b) Values of the detonation indicator $\mathbb{R}$ on a cylinder horizontal cut plane during a LES cycle

FIG. 6.21: Values of the detonation indicator $\mathbb{R}$ on the Bradley diagram (6.21a), and on a horizontal cut plane during a LES engine cycle (6.21b).

- ✓ the distance l of the parameter ε is difficult to estimate locally at each time-step because it requires a mathematical procedure which is able to figure out in three dimensions the charactistic size of temperature regions where the temperature gradient is uniform. Peters et al. [105] proposed such a method for their DNS, but this method would imply an important complexification of the LES. This is why the distance l is here assumed constant, keeping in mind that l only influences the position on the ε axis : looking at Fig. 6.19d, even if length l is divided by a factor two (going from 1 cm to 0.5 cm), many points would remain in the detonation peninsula, i.e., the interpretation of the diagram would remain essentially identical. Consequently, the essential information that should be considered is not the exact position on the ε axis, but the amplitude of the displacement towards the right of the diagram, from the deflagration to the detonation zone.
- ✓ the limits of the detonation peninsula are not universal and should only be considered as transition regions from one regime to the other. Profiles are based on equi-mole $CO - H_2$ calculations, and Rudloff et al. [122] showed that the chemical mechanism used to solve chemistry can have a non-negligible impact especially on the estimation of the ε parameter ;
- ✓ As will be seen in Sec. 6.4.5, the pressure wave/heat release interaction takes place in a complex 3D field, which is far from the hypothesis of a 1D DNS used to compute the diagram of Bradley.
- ✓ In the same way, visualizations of Sec. 6.4.5 will show that the first AI spot is not necessarily responsible for the DDT. It happens that a first AI spot can trigger, due to the pressure it generates, a secondary spot which will be responsible for the DDT. This means that extracting ξ and ε from a cold flow LES will not necessarily allow a correct prediction of DDTs. In other words, the present success of Bradley's diagram to predict DDT is also partly due to the fact that it is based on a reactive LES that already provides explicitly the pressure wave/heat release interactions.



6.4.5 Analysis of interactions between autoignition spots and pressure waves

The previous section has shown that DDT conditions could possibly be encountered at the earliest ST using a theoretical criterion. But this criterion remains "a priori" in the sens that it does not prove the existence of the DDT, and it is based on strong assumptions which validity might be questionnable under piston engine conditions. However, independently from this criterion, the simultaneous calculation of the premixed flame propagation with ECFM-LES and autoignition with TKI-LES allows a direct analysis of the interactions between pressure waves and AI heat release. Such an analysis can be used to confirm the occurence of DDT, and the applicability of Bradley's theory to knocking combustion in practical applications.
This section therefore proposes to directly visualize the pressure waves in the combustion chamber and their interactions with AI spots. Based on Tab. 6.5, three ST (4 CAD bTDC, 0 and 8 CAD aTDC) are presented, giving an overview of the possible interactions during moderate, strong and super-knock cycles. For each case, two cycles are analysed thanks to observations performed every 0.02 CAD (or 1.85 μs). Pressure waves are tracked on a horizontal plane at z = 0 (Fig. 6.22), thanks to the visualization of the local pressure difference relative to the mean chamber pressure (and called ΔP afterwards).

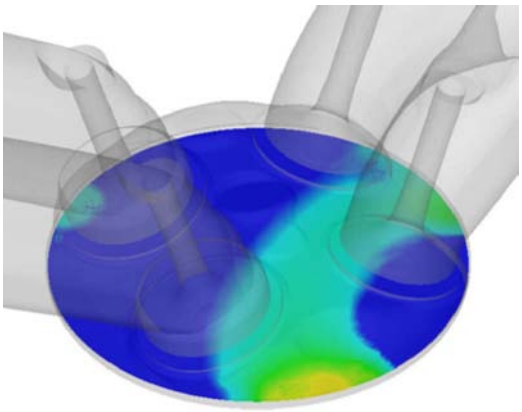


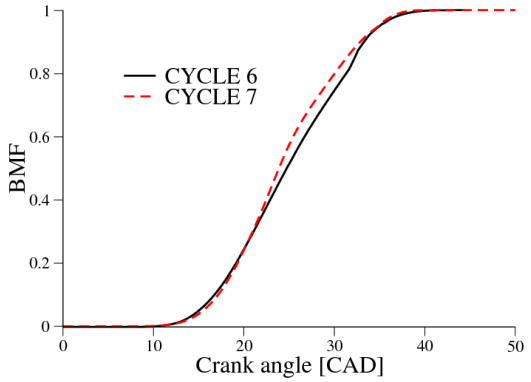
FIG. 6.22: Pressure fluctuations on the chosen visualization plane located at z = 0 in the combustion chamber.

6.4.5.1 Moderate knock

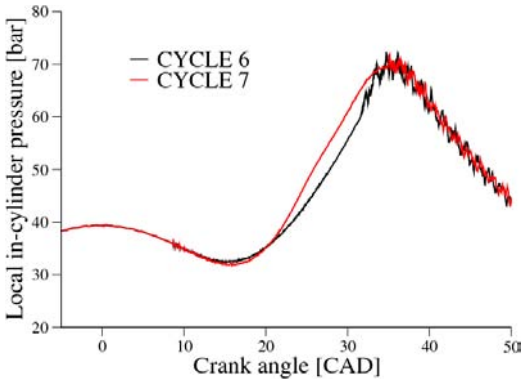
In this section, two different cycles (cycles 6 and 7) are detailed in terms of pressure/autoignition waves interactions. Fig. 6.23 presents the pressure trace at the location of the experimental pressure sensor, the Burned Mass Fraction (BMF) and the total fuel reaction rate from the premixed flame and from autoignition. The three quantities indicate that combustion starts in a purely propagative mode, with cycle 7 presenting a faster propagation.The fuel reaction rate by autoignition becomes non negligeable after 20 CAD aTDC for both cycles, but it still corresponds to very small values of the progress variable c_{ai} in this period. The formation of a burned gases spot by autoignition ($c_{ai} = 1$) corresponds to the



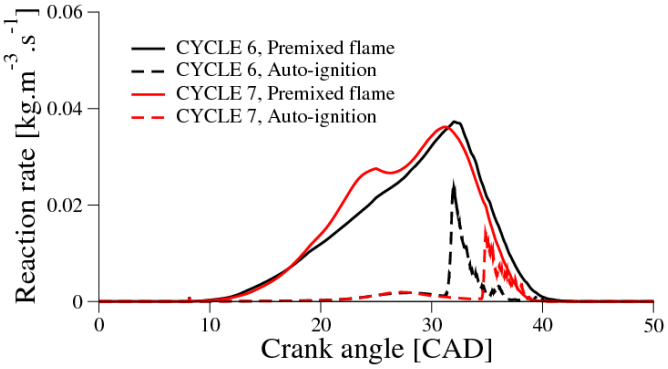
AI reaction rate peak observed at 31.3 CAD for cycle 6 and at 34.6 CAD for cycle 7. The reaction rate peak is also more intense for cycle 6, as confirmed by the larger pressure fluctuations observed for this cycle. Although cycle 6 presents a more intense knock compared to cycle 7, in both cases the pressure fluctuations are limited to a few bars which corresponds to a trace to moderate knock.



(a) Burned Mass Fraction over CAD



(b) Local in-cylinder pressure

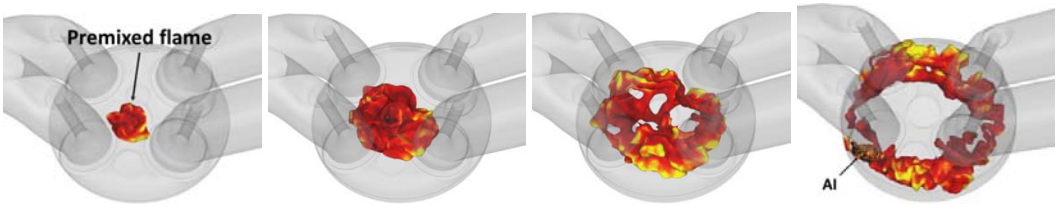


(c) Fuel reaction rates

FIG. 6.23: BMF, local in-cylinder pressure and reaction rate evolutions for the LES cycles 6 and 7 at the ST = 8 CAD aTDC.

Analysis of cycle 6 :
The formulation used to express independently the two progress variables c_Σ for ECFM-LES and c_{ai} for TKI-LES allows to follow the premixed flame propagation and the autoignition spot development using isosurfaces of the progress variables c_Σ (yellow/red) and c_{ai} (black). Fig. 6.24 shows the evolution of these two phenomena from spark ignition to the end of AI. After sparking, the premixed flame grows normally in the chamber (Fig. 6.24a to Fig. 6.24c). The first AI spot appears at 32 CAD aTDC (Fig. 6.24d), when a large part of the fuel has been consumed by the propagative flame confirming the value of about 80% of BMF at this instant (Fig. 6.23a). This AI spot consumes the pocket of fresh gases that surrounds it, and vanishes at 35 CAD aTDC (Fig. 6.24h) with a propagation zone limited to a few centimeters around the initial location. The remaining fresh gases are consumed by the premixed flame.





(a) 15 CAD aTDC (b) 20 CAD aTDC (c) 25 CAD aTDC (d) 32 CAD aTDC

(e) 32.5 CAD aTDC (f) 33 CAD aTDC (g) 34 CAD aTDC (h) 35 CAD aTDC

FIG. 6.24: Evolution of 3D isosurfaces of $\tilde{c}_\Sigma$ (yellow/red), and c_{ai} (black) for cycle 6 at ST = 8 CAD aTDC.

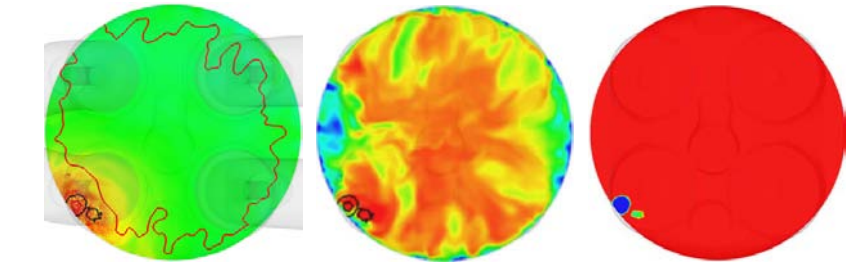
The previous analysis points out that no coupling between premixed flame propagation and AI takes place during this cycle, and that only local AI spots can be observed. To better analyse the underlying physics, Fig. 6.25 presents the local pressure fluctuation $\Delta P = P(x) - P_{chamber}$ (left column), the fresh gases temperature (middle) and the AI delay (right column) evolutions for instants where a premixed flame and AI spots coexist in the combustion chamber. The premixed flame position is followed thanks to an isoline of the progress variable (red), whereas the AI front is localized using an isoline of the AI progress variable (black). Looking at the pressure evolution over time (left column), pressure waves are generated by the AI spot at 32 CAD aTDC (Fig. 6.25a), and are reflected against the wall of the combustion chamber (Fig 6.25b to 6.25d). These pressure fluctuations are very limited in magnitude (of the order of 1 bar), and correspond to the pressure signal fluctuations recorded by the pressure sensor at the cylinder head (Fig. 6.23b). Looking at the fresh gases temperature and AI delay, Fig. 6.25a shows that AI starts in the region where the fresh gases temperature is the highest. However, Fig. 6.25a to 6.25d confirm that the pressure wave propagation leads to a very limited increase of the fresh gases temperature, which is not sufficient to lower significantly the autoignition delay which remains close to 5 CAD. This explains why AI remains located close to the initial spot.

The detonation indicator $\mathbb{R}$ remains equal to zero in the whole chamber and at any time (not presented here). This means that no coupling is detected, in coherence with the above direct visualization and with the scatter plots of Fig. 6.19a. In conclusion, both tools confirm that this cycle is located in the deflagration zone. The AI spot emits a pressure wave which travels in the cylinder quicker than the AI front, but its limited amplitude does not reduce the AI delay sufficiently to ensure a rapid propagation of an autoignition front, and the occurrence of a DDT.

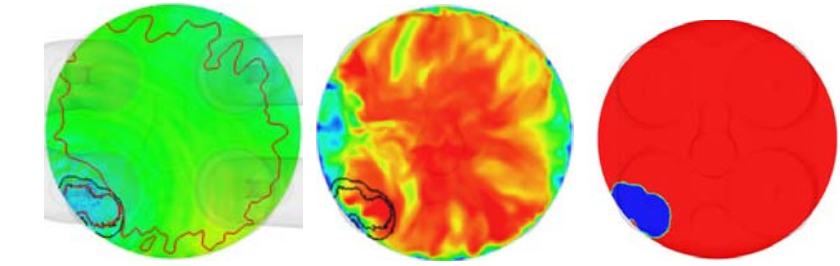
Analysis of cycle 7 :

In order to illustrate the cycle-to-cycle variability of knock, cycle 7 is now analysed. Fig. 6.26 shows 3D visualizations and the corresponding ΔP evolution over time for cycle 7 at ST = 8 CAD aTDC. The AI

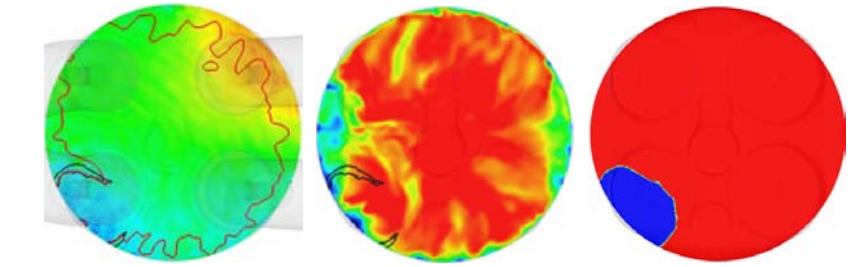




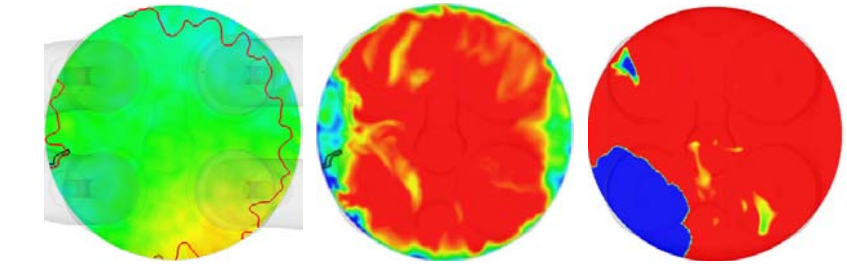
(a) Time = 32 CAD aTDC



(b) Time = 32.5 CAD aTDC



(c) Time = 33 CAD aTDC



(d) Time = 35 CAD aTDC

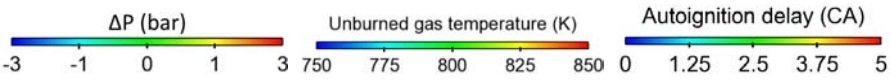


FIG. 6.25: ΔP evolution (left), fresh gases temperature (middle) and AI delay (right) at several instants for cycle 6 at ST = 8 CAD aTDC.

spot appears at 35 CAD aTDC (Fig. 6.26a), not in the observation plane at z = 0 but it is visible in black (bottom right part) on the 3D images of isosurfaces. It is important to notice that this AI spot appears 4.5

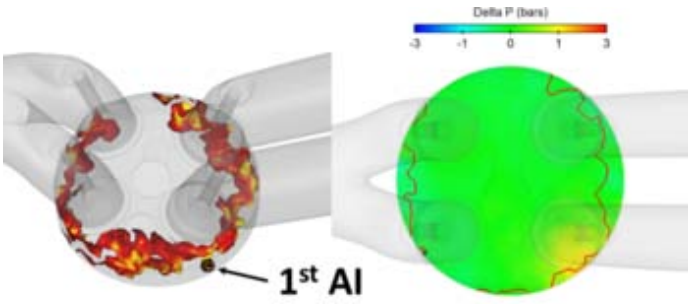


CAD after the one of cycle 6, so the premixed flame has consumed more fresh gases. This explains why the first AI spot appears in a very small pocket of fresh gases, consumes the fuel within this pocket and then almost vanishes at 36 CAD aTDC (Fig. 6.26c). The scenario is identical for the second AI spot that appears on the upper right part of the plane at 36 CAD aTDC. Despite these two AI spots, the generated pressure fluctuations are of low amplitude (right column in Fig. 6.26a to 6.26d) compared to cycle 6. The same mechanism as for cycle 6 is found for cycle 7, with a low fresh gases temperature increase leading to a very moderate decrease of the autoignition delay (not shown here).

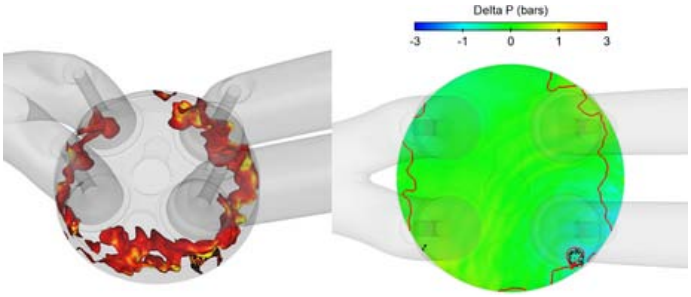
Conclusions for a spark timing at 8 CAD aTDC :

Other cycles at this ST were analysed and presented the same scenario with one or several AI as for cycles 6 and 7. It can be concluded that although cyclic variability leads to fluctuations in the premixed flame propagation speed, angle of knock onset and knock intensity, all cycles present a low level of pressure fluctuations and no coupling between the generated pressure waves and autoignition. These conclusions confirm the a priori observations drawn using the graph representing the maximal intensity versus BMF (Fig. 6.17) and the scatter plots in Bradley's diagram (Fig. 6.19). Finally, the proposed detonation indicator remains equal to zero for all cycles, in agreement with Bradley's diagram.

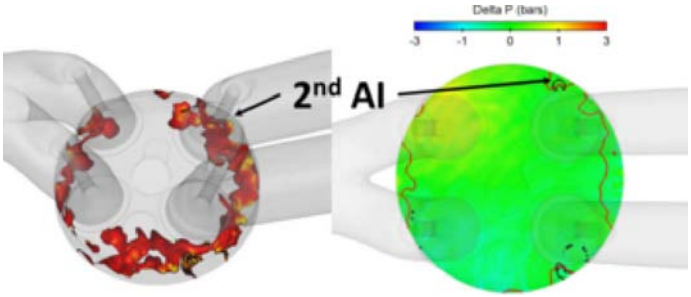




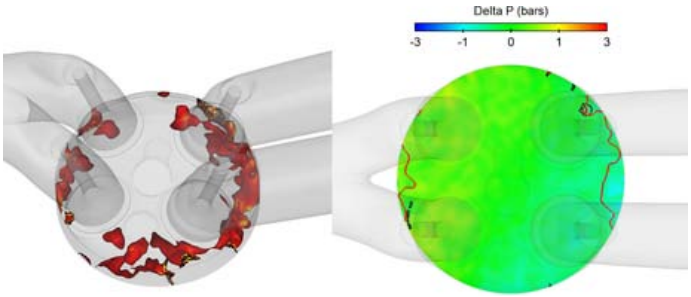
(a) Time = 35 CAD aTDC



(b) Time = 35.5 CAD aTDC



(c) Time = 36 CAD aTDC



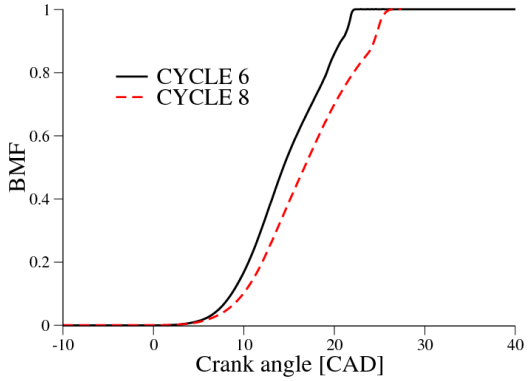
(d) Time = 37 CAD aTDC

FIG. 6.26: 3D visualizations of c_Σ (red) and c_{ai} (black) (left), and corresponding ΔP field (right) for cycle 7 at ST = 8 CAD aTDC.

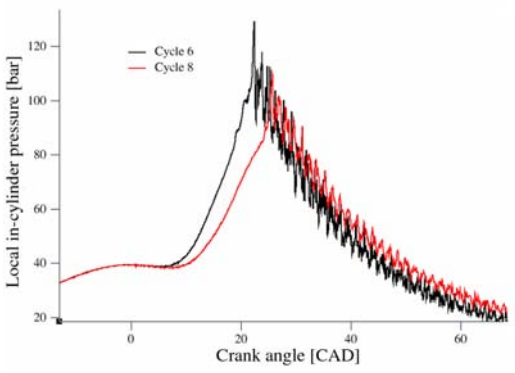


6.4.5.2 Transition from strong knock to super-knock

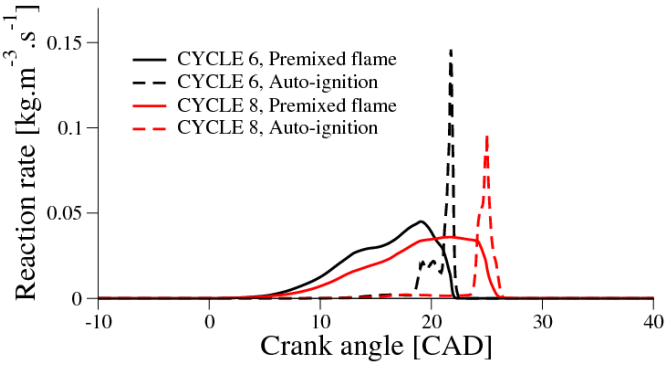
The operating point where spark timing takes place at TDC is now analysed.For this regime, knock is expected. Two LES cycles are selected among the fifteen available (cycles 6 and 8), and the combustion development is compared using the BMF (Fig. 6.27a), the local in-cylinder pressure sensor (Fig. 6.27b) and the fuel reaction rate (Fig. 6.27c). These figures show that cycle 6 presents a faster premixed flame combustion compared to cycle 8. The knock onset is also observed earlier for cycle 6 (at 18.6 CAD aTDC) compared to cycle 8 (at 23.7 CAD aTDC). As the autoignition peak reaction rate is approximately eight times larger than at ST = 8 CAD aTDC, a rapid increase in the slope of the BMF at knock onset is more clearly observed for this case. The local in-cylinder pressure (Fig. 6.27b) confirms the difference of combustion velocity between these two cycles, with faster pressure rise for cycle 6. The intensity of knock also seems larger for cycle 6, which pressure oscillations of the order of 20-30 bars. A visual analysis is now proposed to investigate the correlation between the local pressure and heat release rate.



(a) Burned Mass Fraction over CAD



(b) Local in-cylinder pressure over CAD



(c) Fuel reaction rates over CAD

FIG. 6.27: BMF, local in-cylinder pressure and reaction rate evolutions for the LES cycles 6 and 8 at the ST = 0 CAD.

Analysis of cycle 6 :



Fig. 6.28 presents the ΔP evolution on the observation plane (Fig. 6.22) during the AI sequence. The black line plotted on the ΔP fields represents an isoline of the AI progress variable which allows to locate the AI spots. An isoline of the premixed flame progress variable (red) allows to follow the flame position. At +19 CAD aTDC, the first AI spot starts in the upper right part of the combustion chamber (region A in Fig. 6.28a). A wave of a few bars amplitude is emitted and reflected on the chamber walls without coupling with to the AI front. One CAD later, a second AI spot occurs (region B in Fig. 6.28b), still without coupling. After consumption of this spot, the combustion chamber presents no AI spots at 20.5 CAD aTDC (Fig. 6.28c). However 1 CAD later, at 21.5 CAD, a new AI spot appears in the bottom left part of the cut plane (region C in Fig. 6.28d). A particular attention should be paid to the image timing, because after Fig. 6.28d, the timing between two images is reduced to 0.1 CAD as AI propagates quickly in the chamber. An increase of the pressure wave amplitude is visible (Fig. 6.28d to 6.28h), and it reaches a value close to one hundred bars (whereas at ST = 8 CAD aTDC, amplitudes are about 1 bars). A correlation between the location of the pressure wave and the AI reaction rate is also visible for the first time. However, this AI spot is triggered late in the cycle, and the pressure wave begins to vanish after 21.9 CAD aTDC due to the lack of fuel to burn. The amplification of the wave seems to be a first sign of a deflagration to detonation transition, and corresponds to points located in the transition zone as suggested by Bradley's diagram in Fig. 6.19.

To make the analysis more quantitative, a circular 1D profile is plotted at three millimeters of the periphery of the combustion chamber as shown in Fig. 6.29 (black line). As the premixed flame already consumed the fresh gases in the center of the combustion chamber, this profile is assumed to be mainly in the fresh gases and perpendicular to the autoignition front propagation.

The pressure and the AI reaction rate are plotted every angular degree (Fig. 6.30) on this profile looking for a correlation between AI reaction rate and wave propagation. In addition, this figure also presents on the left the ΔP cut plane at the same instant and the detonation indicator $\mathbb{R}$ (Eq. 6.9) on the right. At 21.5 and 21.6 CAD aTDC (Fig. 6.30a and 6.30b), an AI spot appears without clear coupling between the AI reaction rate and pressure peak. However, the AI reaction rate increases from 24.7 CAD aTDC (Fig. 6.30c) to 24.9 CAD aTDC (Fig. 6.30e), and its peak location and speed coincide now with the pressure wave which amplitude reaches 180 bars in less than 0.5 CAD. A coupling is being established and this conclusion is coherent with the detonation indicator which reaches 1 in the region of coupling.

The previous observations are the first signs of a DDT. To ascertain these observations, the LES overpressure and AI front velocity are now compared to those of an established detonation, given by Chapman-Jouguet (CJ) relations. The Chapman-Jouguet detonation velocity is given by :

$$D_{CJ} = \sqrt{2(\gamma^2 - 1) * Q} \tag{6.10}$$

where Q is the heat quantity generated by unit of mixture mass, and γ the heat capacity ratio fixed at 1.4. The Chapman-Jouguet pressure variation is given by :

$$P_{CJ} \cong \rho_0 \frac{D_{CJ}^2}{\gamma + 1} \tag{6.11}$$

where ρ_0 is the local density in the fresh gases.

Using the present LES fresh gases conditions, we found that D_{CJ} is close to 2.3 km/s and P_{CJ} to 900 bars. On the other hand, the LES AI front velocity is estimated at about 1.1 km/s using the displacement speed of the maximum pressure peak between two images, and the maximum pressure variation reached

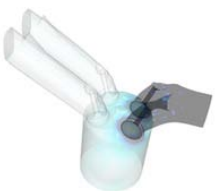


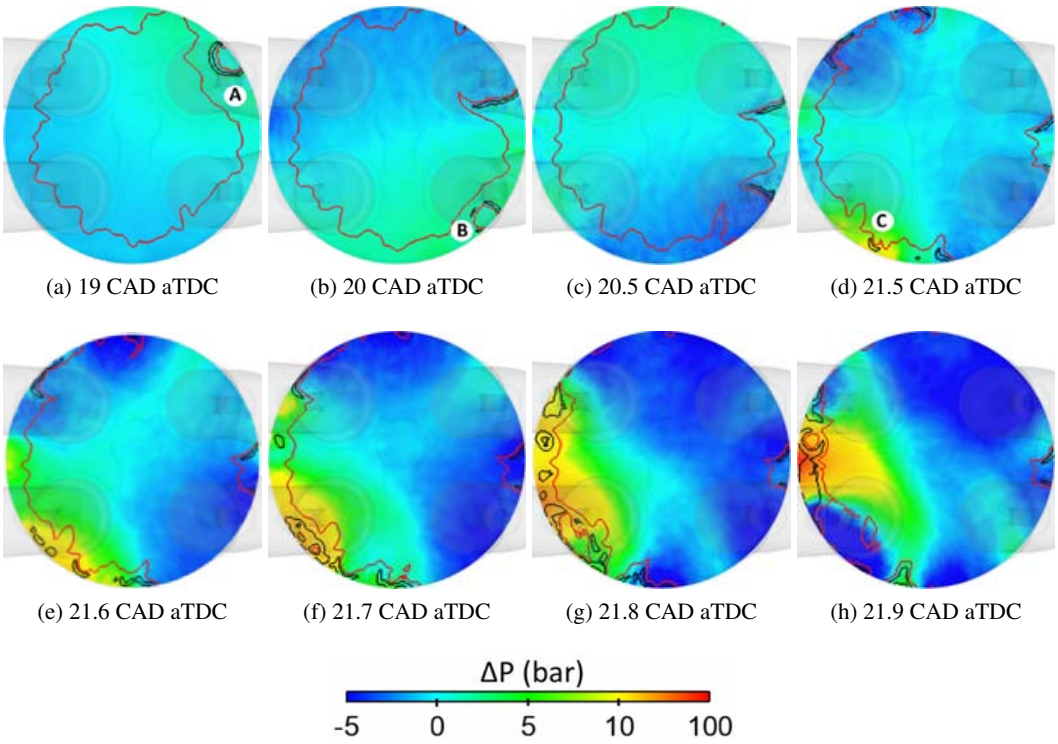
at the same instant is close to 200 bars. These values are below the CJ values but have the same order of magnitude, which indicates that a transition to detonation is observed and not a fully developped detonation. This transition is rapidly stopped in the LES due to a lack of fresh gases to feed the developing detonation. A second explanation for this difference is that Chapman-Jouguet theory assumes a one-dimensional detonation while the LES wave is not strictly one-dimensional. Finally, we note that both LES and CJ values of the pressure variation are computed using the ideal gas law which is no more valid at such pressures. The discussed values must therefore be seen as approximations of the real pressure variations observed in the engine.

AI visualization of cycle 8 :
The same analysis is addressed for this new cycle. The first AI spot occurs at 23.75 CAD aTDC (2.75 CAD later than in cycle 6 at the same ST), and is visible in figure 6.31a (region A). A second AI spot starts nearly simultaneously (region B of Fig. 6.31b), but independently from the first one, at the opposite side of the chamber. It generates another pressure wave which travels in the opposite direction (Fig. 6.31c). When these two waves collapse at 24.5 CAD aTDC (Fig. 6.31d), the overpressure generated initiates a third AI spot close to the wall (region C). This latter AI spot generates a stronger pressure wave which is reflected on walls (Fig. 6.31e to Fig. 6.31h), but without coupling to the AI reaction rate at any instants as the amplitude is low.

As for cycle 6, the pressure and AI reaction rate are displayed on a 1D profile in Fig. 6.32 to validate previous observations. In this case, no coupling is observed, and whatever the instant, the AI reaction rate peak is not correlated to the pressure peak. It is also important to notice that ΔP only reaches 10 bars, against 100 bars for the previous cycle. In the same way, the intensity of the AI reaction rate does not exceed $10^5 kg.m^{-3}.s^{-1}$ whereas for cycle 7 (Fig. 6.30) the value of the AI reaction rate doubles when it is reinforced by the pressure wave. Finally, the detonation indicator stays equal to 0 at any time, confirming that no coupling is present during this cycle.

Conclusions for spark timing cases at TDC :
From the analysis of cycles 6 and 8, and from others not presented here, two scenarii were found at this ST. For cycles like cycle 8, no DDT was observed like for the ST of 8 CAD aTDC, leading to small amplitude pressure waves. On the contrary for cycles like cycle 6, the beginning of a DDT was clearly observed but it happened too late during the engine cycle to develop substantially. This DDT was evidenced by the coupling between the pressure wave and the fuel reaction rate and by the characteristic pressure and velocity of this wave which are of the order of magnitude of CJ values. In this case, the pressure wave reached a value of 100 bars, a value much larger than when no coupling is observed. Like for the previous ST, it was found that the detonation indicator is always in good agreement with the direct visualization analysis, that is, it has the ability to detect the presence of a DDT at the correct location and instant. These results confirm that this ST constitutes a transition point between the two extreme regimes pointed out in Fig. 6.17.





(a) 19 CAD aTDC (b) 20 CAD aTDC (c) 20.5 CAD aTDC (d) 21.5 CAD aTDC

(e) 21.6 CAD aTDC (f) 21.7 CAD aTDC (g) 21.8 CAD aTDC (h) 21.9 CAD aTDC

FIG. 6.28: ΔP evolution for cycle 6 at ST = 0 CAD.

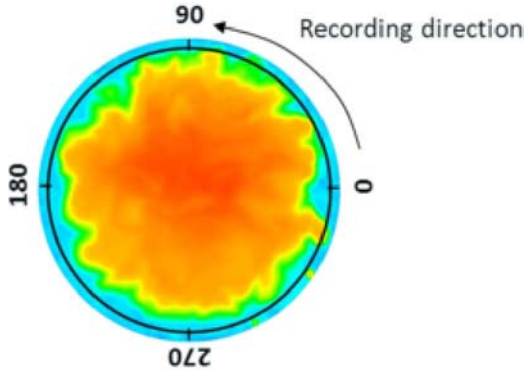
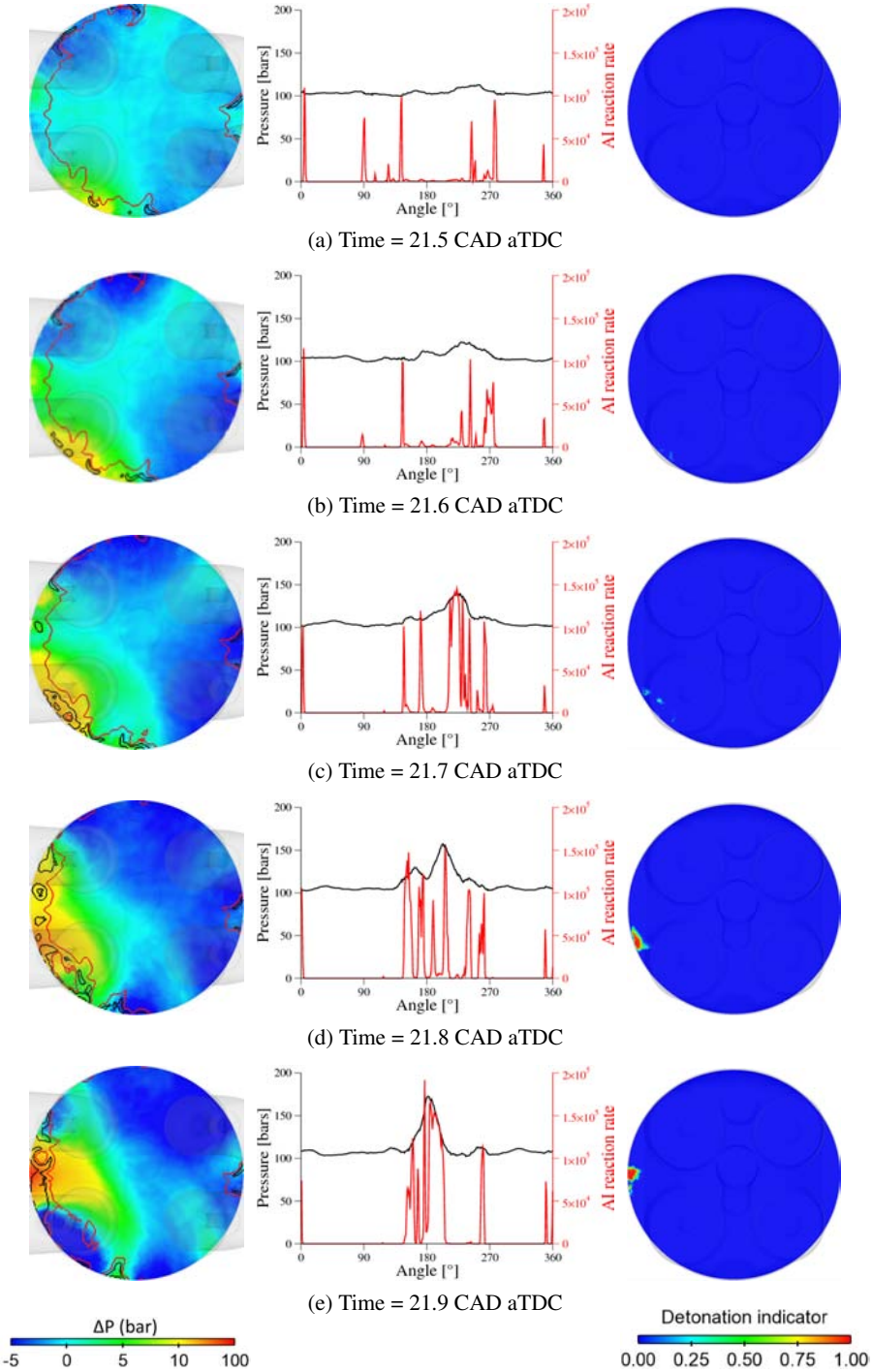


FIG. 6.29: 1D profile location (black line) on the observation plane.



(a) Time = 21.5 CAD aTDC

(b) Time = 21.6 CAD aTDC

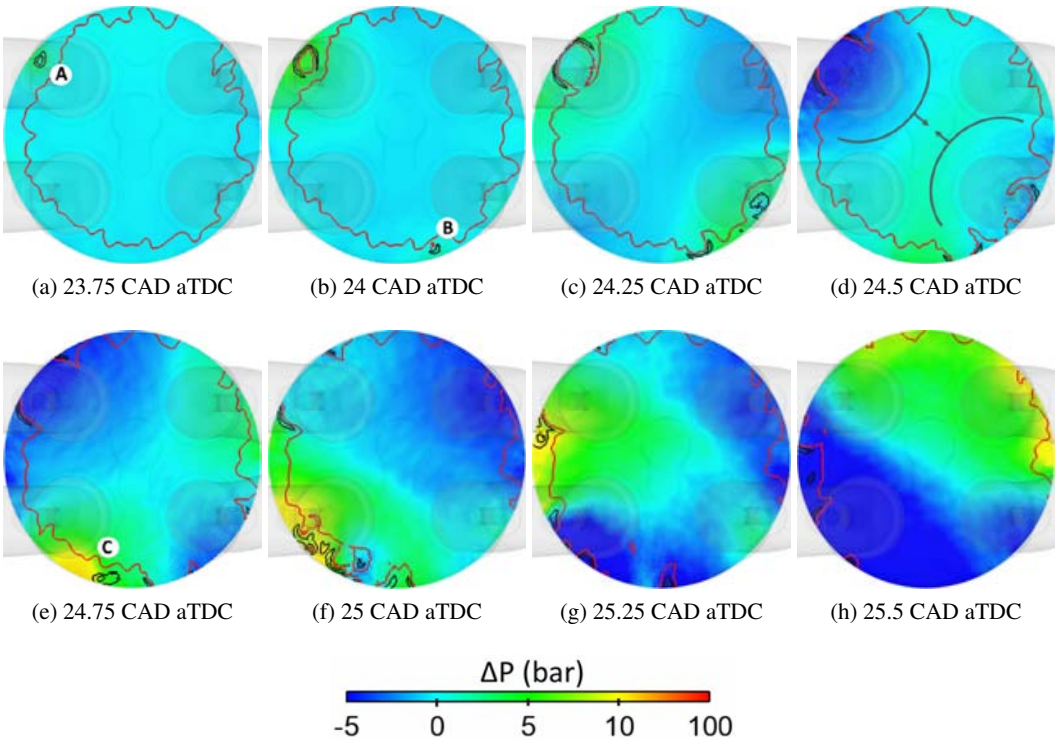
(c) Time = 21.7 CAD aTDC

(d) Time = 21.8 CAD aTDC

(e) Time = 21.9 CAD aTDC

FIG. 6.30: ΔP evolution (left), pressure and AI reaction rate on the 1D profile (middle) and detonation indicator (right) at several instants where a DDT is supposed for cycle 6 at ST = 0 CAD.

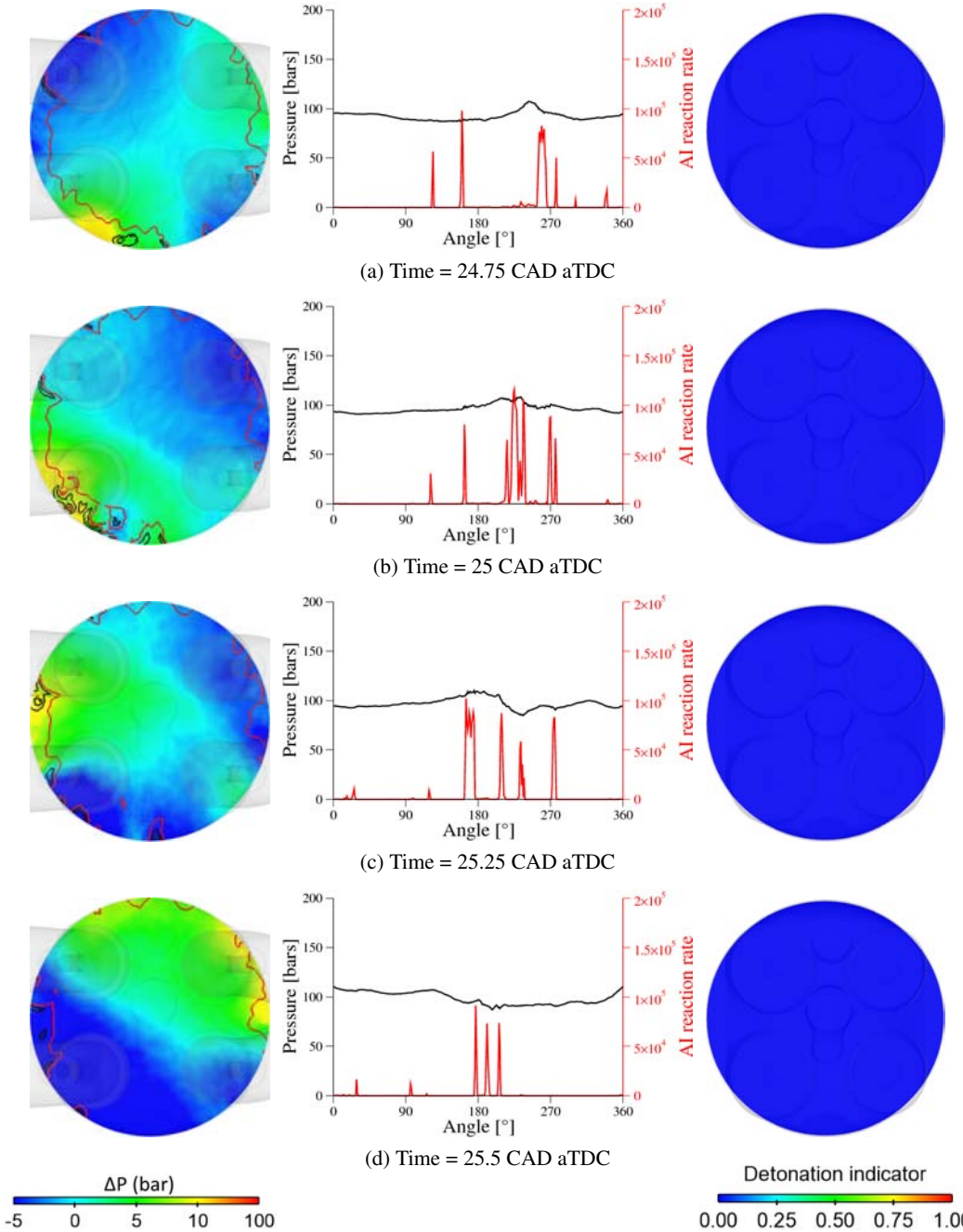




(a) 23.75 CAD aTDC (b) 24 CAD aTDC (c) 24.25 CAD aTDC (d) 24.5 CAD aTDC

(e) 24.75 CAD aTDC (f) 25 CAD aTDC (g) 25.25 CAD aTDC (h) 25.5 CAD aTDC

FIG. 6.31: ΔP visualizations for cycle 8 at ST = 0 CAD.



(a) Time = 24.75 CAD aTDC

(b) Time = 25 CAD aTDC

(c) Time = 25.25 CAD aTDC

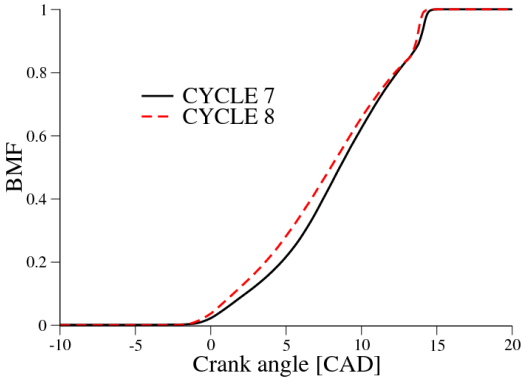
(d) Time = 25.5 CAD aTDC

FIG. 6.32: ΔP evolution (left), pressure and AI reaction rate on the 1D profile (middle) and detonation indicator $\mathbb{R}$ (right) for cycle 8 at ST = 0 CAD.

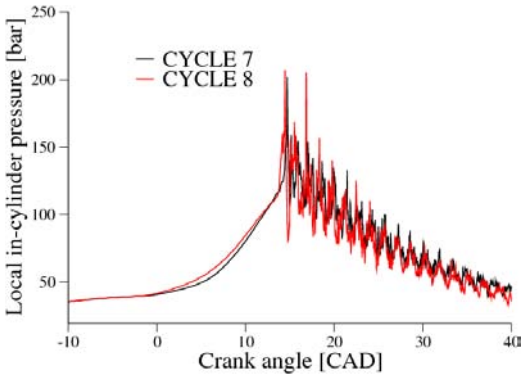


6.4.5.3 Super-knock

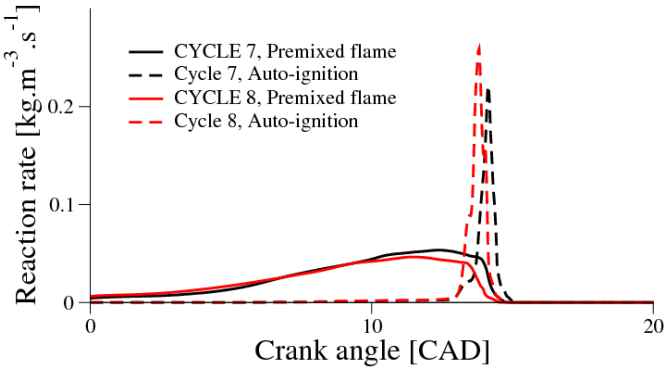
To study super-knock, two cycles with early spark timing (ST = 4 CAD bTDC) are chosen. Such an early ST compared to the knock limit crank angle (fixed around 6 CAD aTDC for this engine) is not realistic, as it would lead to massive knock and engine destruction. It is solely used here, like in the experiment of Amann [4], to mimic the creation of a premixed flame by a pre-ignition spot. Therefore, the autoignition events observed at this ST correspond to the ones observed in a cycle showing pre-ignition and not to a standard cycle. For cycles 7 and 8, the BMF (Fig. 6.33a) evolves in a nearly linear way when the propagation flame grows into the chamber after ignition. Around 10 CAD aTDC, the fuel consumption by the premixed flame tends to slow down, but at 13 CAD aTDC, a peak of AI reaction rate is observed for both cycles. This leads to a sudden increase of the BMF, and to the consumption of the 20% remaining fresh gases in only one CAD approximately. This increase of the consumption speed is more visible than for cycles with a ST at TDC, indicating a probably more intense coupling between the AI reaction rate and pressure waves compared to the previous cases.



(a) Burned Mass Fraction over CAD



(b) Local in-cylinder pressure

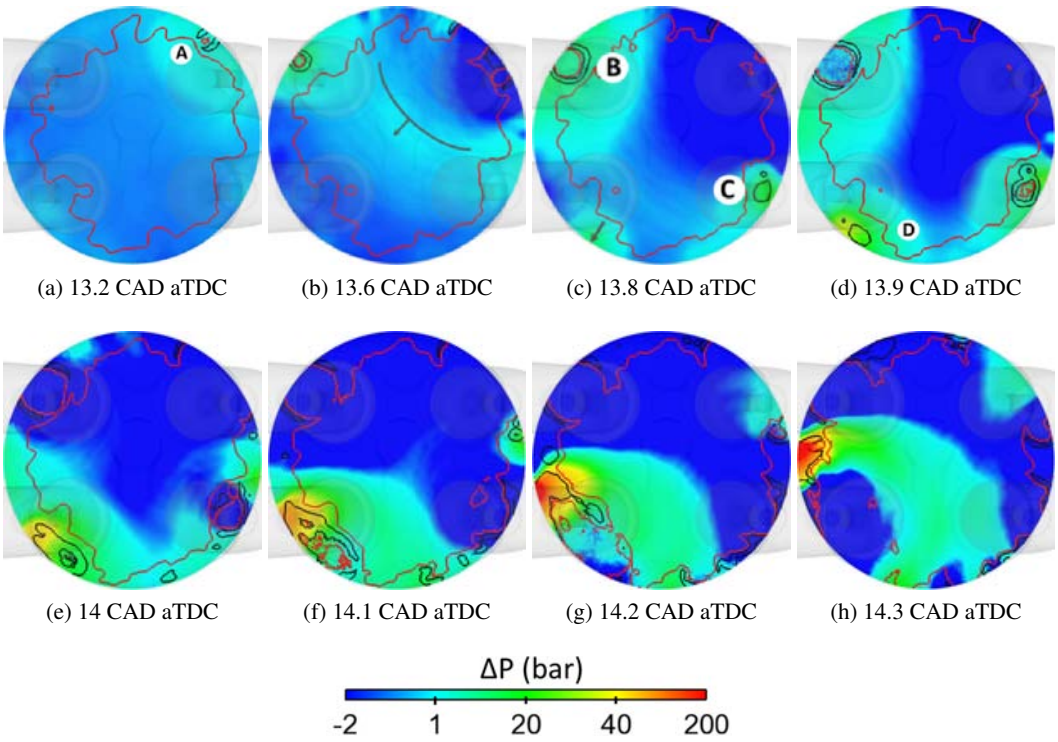


(c) Fuel reaction rates

FIG. 6.33: BMF, local in-cylinder pressure and reaction rate evolutions for the LES cycles 7 and 8 at the ST = 4 CAD bTDC.



Analysis of cycle 7 :
Fig. 6.34 shows the evolution of ΔP on the horizontal plane at z = 0. AI starts at 13 CAD aTDC, and is visible at 13.2 CAD aTDC (Fig. 6.34a, region A). This AI spot initiates a pressure wave which propagates into the chamber without reinforcing despite the two other AI spots visible at 13.8 CAD aTDC in Fig. 6.34c (region B and C). At this instant, the wave generated by the first AI spot impacts the opposite wall as illustrated by the arrow added to Fig. 6.34c. The overpressure generated at the wall increases the fresh gases temperature by 30 K, and makes the AI delay fall down. A new AI spot occurs at this location (Fig. 6.34d, region D), and a DDT is then visible in Fig. 6.34e to 6.34h, with an amplification of the wave that exceeds 200 bars (the legend is rescaled compared to the previous cycles analysed). About 20 % of the fresh gases remaining are finally consumed in about 0.6 CAD.



(a) 13.2 CAD aTDC (b) 13.6 CAD aTDC (c) 13.8 CAD aTDC (d) 13.9 CAD aTDC

(e) 14 CAD aTDC (f) 14.1 CAD aTDC (g) 14.2 CAD aTDC (h) 14.3 CAD aTDC

FIG. 6.34: ΔP visualizations for cycle 7 at ST = 4 CAD bTDC.

To analyze the physical mechanisms involved in this cycle, Fig. 6.35 presents the ΔP (left), fresh gases temperature (middle) and AI delay (right) evolutions during the presumed DDT occurence. The pressure wave impacts the wall at 13.9 CAD aTDC in region A (Fig 6.35a) and generates an increase of the fresh gases temperature by more than 30 K which reduces locally the AI delay from a value of the order of 1 CAD down to 0.1 CAD approximately. This allows the creation of a new autoignition spot at this location which then grows and propagates towards the left as seen in Fig. 6.35b to 6.35e. During this growth, it can be noticed that the pressure front coincides with the autoignition reaction rate front (black isolignes on the left column), fresh gases temperature increase and autoignition decrease. Inside the front, the AI delay typically takes values of the order of 0.1 CAD. Assuming a sound speed of 617 m/s corresponding to a fresh gases temperature of 950 K, the pressure wave only travels 5.7 mm before the AI delay is



reached. This length scale is much smaller than the size of the AI spot estimated around 1 mm, thus indicating that a reinforcement of the pressure wave by AI can be expected, as effectively observed.

As presented for the previous ST, Fig. 6.36 shows at the same instants the 1D profiles of pressure (black) and AI reaction rate (red), along with 2D plots of ΔP (on the left) and of the detonation indicator (on the right). The correlation and propagation at the same velocity of ΔP and AI reaction rate peaks becomes more visible as time passes, confirming that a DDT is established. It can be noticed that the AI reaction rate peak is four times larger than for cycle 6 at ST = 0 CAD, where a DDT was already detected, and the maximum pressure peak is also more important with values close to 300 bars. In addition, looking at the detonation indicator, the regions where the indicator value equals 1 agree well with regions where a DDT is established ($i.e.$ regions where ΔP is amplified).

The analysis of this cycle shows a scenario where the strong pressure wave is not generated by the first AI spot but by a secondary spot trigged by the initial spot. This scenario was inferred both experimentally and by a combustion analysis based on Bradley's theory [122]. It is here confirmed by LES which allows a detailed understanding of the physics at hand.

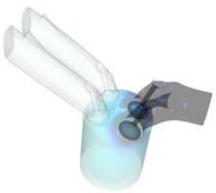
Analysis of cycle 8 :
Using the same analysis based on ΔP fields, a different scenario is pointed out for cycle 8 (Fig. 6.37). A large AI spot is first observed in region A of Fig. 6.37a, which generates a strong pressure wave. A coupling between ΔP and the AI reaction rate (black iso-line) is observed on the left wing of the pressure wave that travels clockwise, between 13.5 and 14. CAD. It is similar to the coupling observed at cycle 7, whereas the right wing of the wave shows no reinforcement of the pressure wave, probably due to a lack of fresh gases to consume. A new AI spot appears independently on the opposite side of the chamber (region C) at 13.6 CAD, and it also generates a pressure wave that travels counterclockwise and reinforces between 13.6 and 14 CAD. Finally, these two pressure waves merge at 14.1 CAD further increasing the pressure peak. As this AI sequence is very fast, the premixed flame displacement is small (red iso-lines in Fig. 6.37) during this period of time, which also means that the fresh gases are essentially oxidized by autoignition as confirmed by Fig. 6.33c.

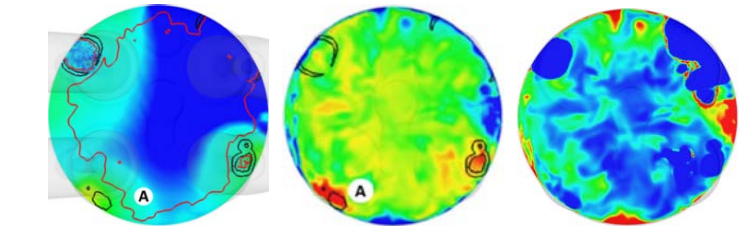
As for cycle 7, Fig. 6.38 compares the ΔP field (left), the pressure and reaction rate on 1D profiles (middle) and the detonation indicator (right) at five instants where coupling is visible in Fig. 6.37.
First of all, the 1D profiles between 13.3 CAD aTDC (Fig. 6.38a) and 14.1 CAD aTDC (Fig. 6.38e) confirm that a coupling is taking place in the region A, as the maximum pressure (black line) propagates at the same velocity as the AI reaction rate (red line). It is also observed that the peak pressure increases in this region from a couple of bars above the mean value at 13.3 CAD to approximately 400 bars at 13.9 CAD aTDC and even more at 14.1 CAD aTDC. At these two last crank angle degrees, the maximum pressure reached is higher than the constant volume pressure increase observed in a homogeneous autoignition in the same thermodynamic conditions, which is estimated at 319 bars. The velocity of the pressure wave can also be computed for this cycle looking at the displacement of the pressure peaks. It is estimated at about 1.5 km/s whereas, as a reminder, the Chapman-Jouguet velocity is estimated in such conditions at 2.29 km/s. The magnitude of the two velocities is quite close, which confirms the establishment of a DDT in such conditions.
A coupling is also observed in region C, although it is much less intense. When the two opposite travelling DDT waves from regions A and C collapse at 14.1 CAD, they induce a peak pressure close to 800 bars. This phenomenon was not observed in cycle 7 due to the existence of a sole DDT. Fig. 6.38



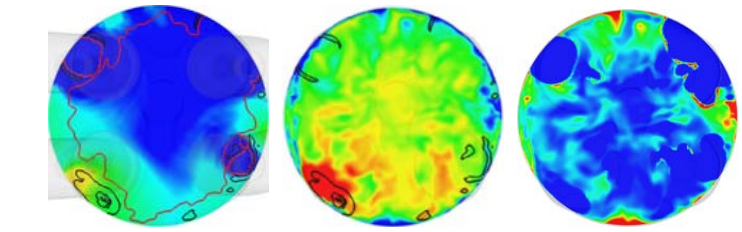
confirms that region B does not lead to a DDT : except at 13.7 CAD where a small pressure increase can be observed, the pressure in this region remains very close to the mean pressure at all other times.
All these observations confirm that a DDT occurs during this cycle, and the detonation indicator $\mathbb{R}$ (right column of Fig. 6.38) succeeds in predicting the location and the time of appearance of DDTs in regions A and C, whereas it does not predict a DDT in region B (excepted at 13.7 and 14.1 in very small regions) in agreement with the direct visualization. Fresh gases temperature and AI delay fields are not presented here but the same physical mechanisms as for cycle 7 are observed during this cycle. The propagation of the pressure wave implies an increase of fresh gases temperature and a decrease of the AI delay, allowing AI to start before the pressure wave had time to propagate away from the reaction zone.

Finally, this LES also shows that the piston is submitted locally to drastic thermodynamic conditions which can explain some real engine damages after pre-ignition events. The limit of an abnormal combustion analysis relying only on local in-cylinder pressure sensors is thus pointed out : during this cycle, the local pressure sensor shows (Fig. 6.33b) strong fluctuations, but the maximum pressure recorded does not exceed 210 bars, which is far from the 800 bars recorded locally at other locations. It can be concluded that performing a knock analysis based only on a local sensor (or a couple of sensors) makes the result very dependent on the relative distance between the AI spot and the sensor location.

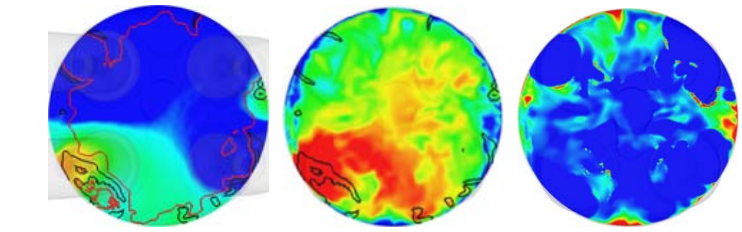




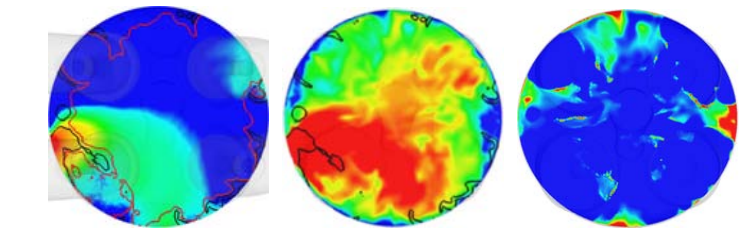
(a) Time = 13.9 CAD aTDC



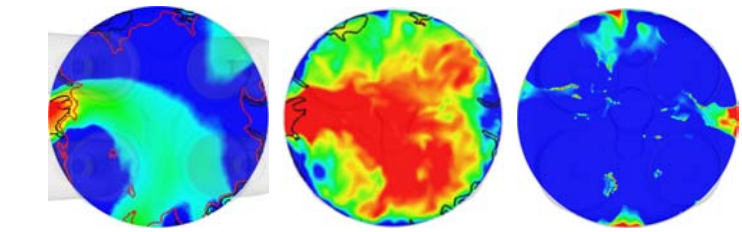
(b) Time = 14 CAD aTDC



(c) Time = 14.1 CAD aTDC



(d) Time = 14.2 CAD aTDC



(e) Time = 14.3 CAD aTDC

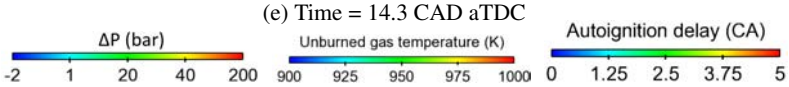
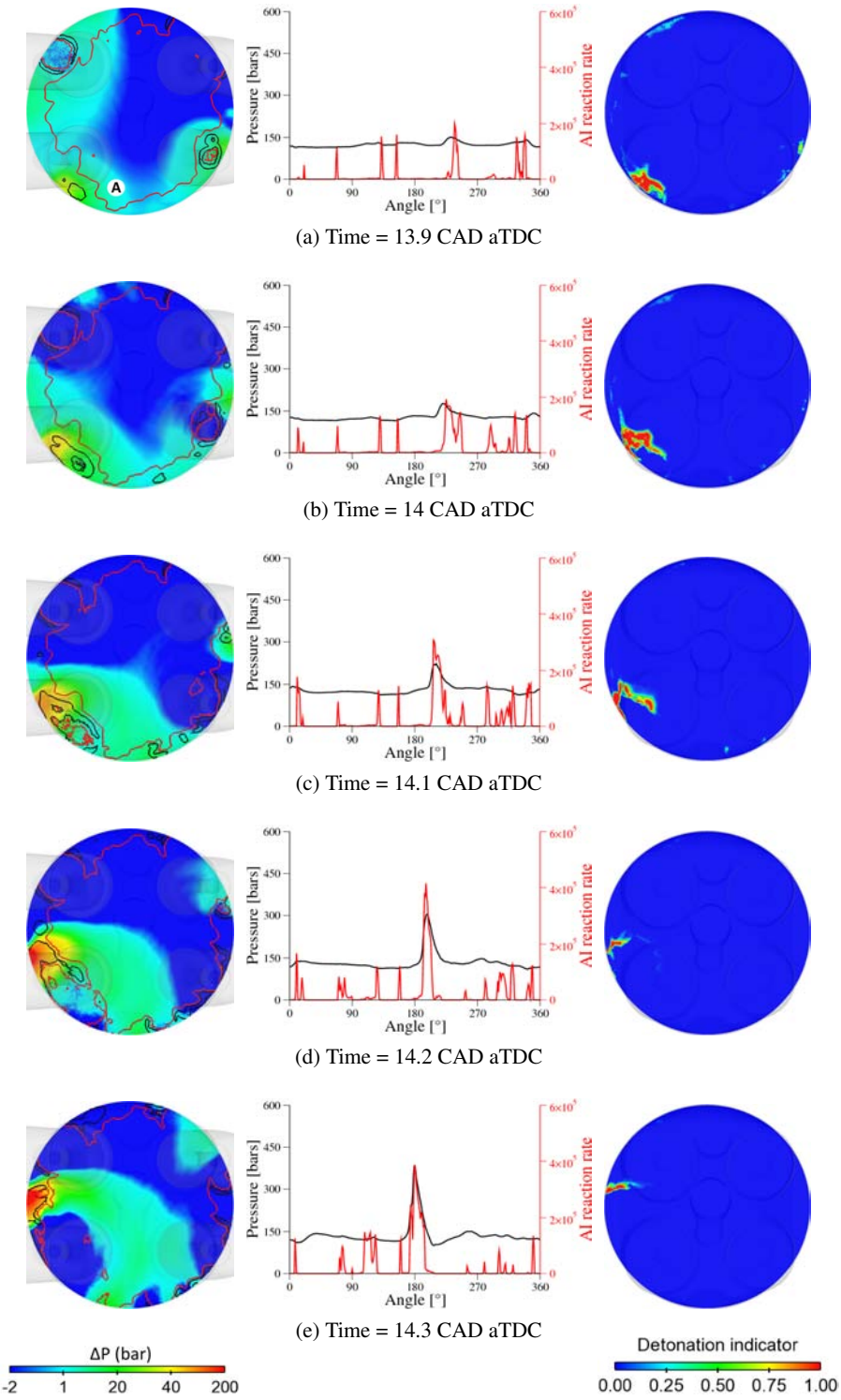


FIG. 6.35: ΔP evolution (left), fresh gases temperature (middle) and AI delay (right) at several instants where a DDT is supposed for cycle 7 at ST = 4 CAD bTDC.





(a) Time = 13.9 CAD aTDC

(b) Time = 14 CAD aTDC

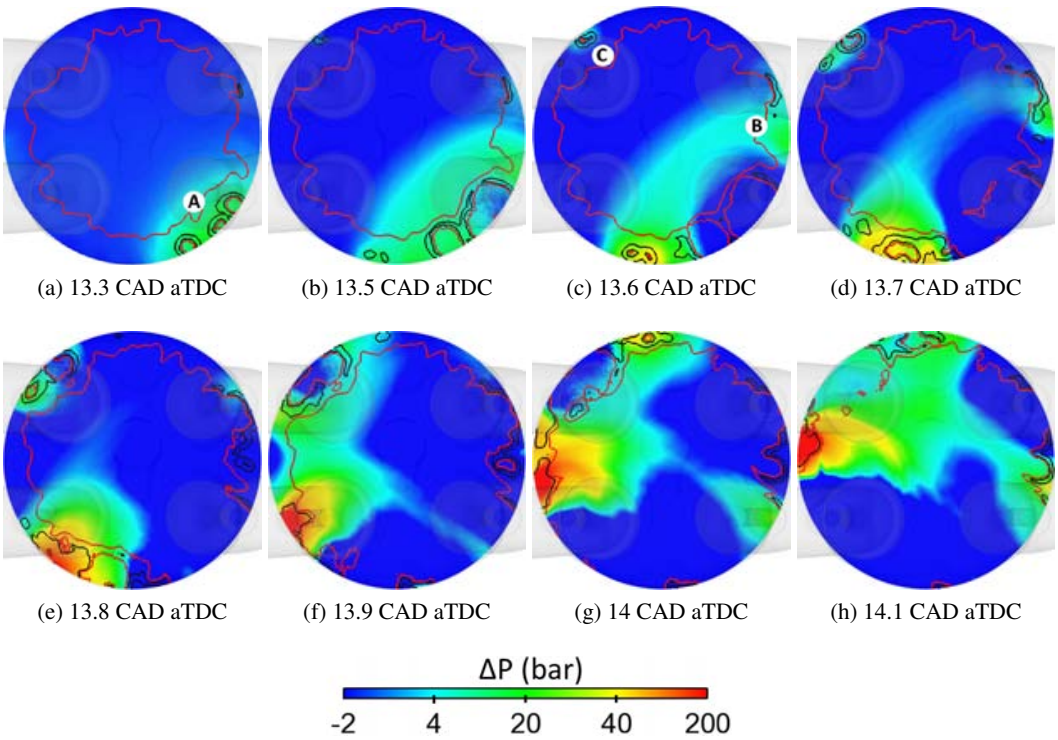
(c) Time = 14.1 CAD aTDC

(d) Time = 14.2 CAD aTDC

(e) Time = 14.3 CAD aTDC

FIG. 6.36: ΔP evolution (left), pressure and AI reaction rate on the 1D profile (middle) and detonation indicator (right) at several instants where a DDT is supposed for cycle 7 at ST = 4 CAD bTDC.



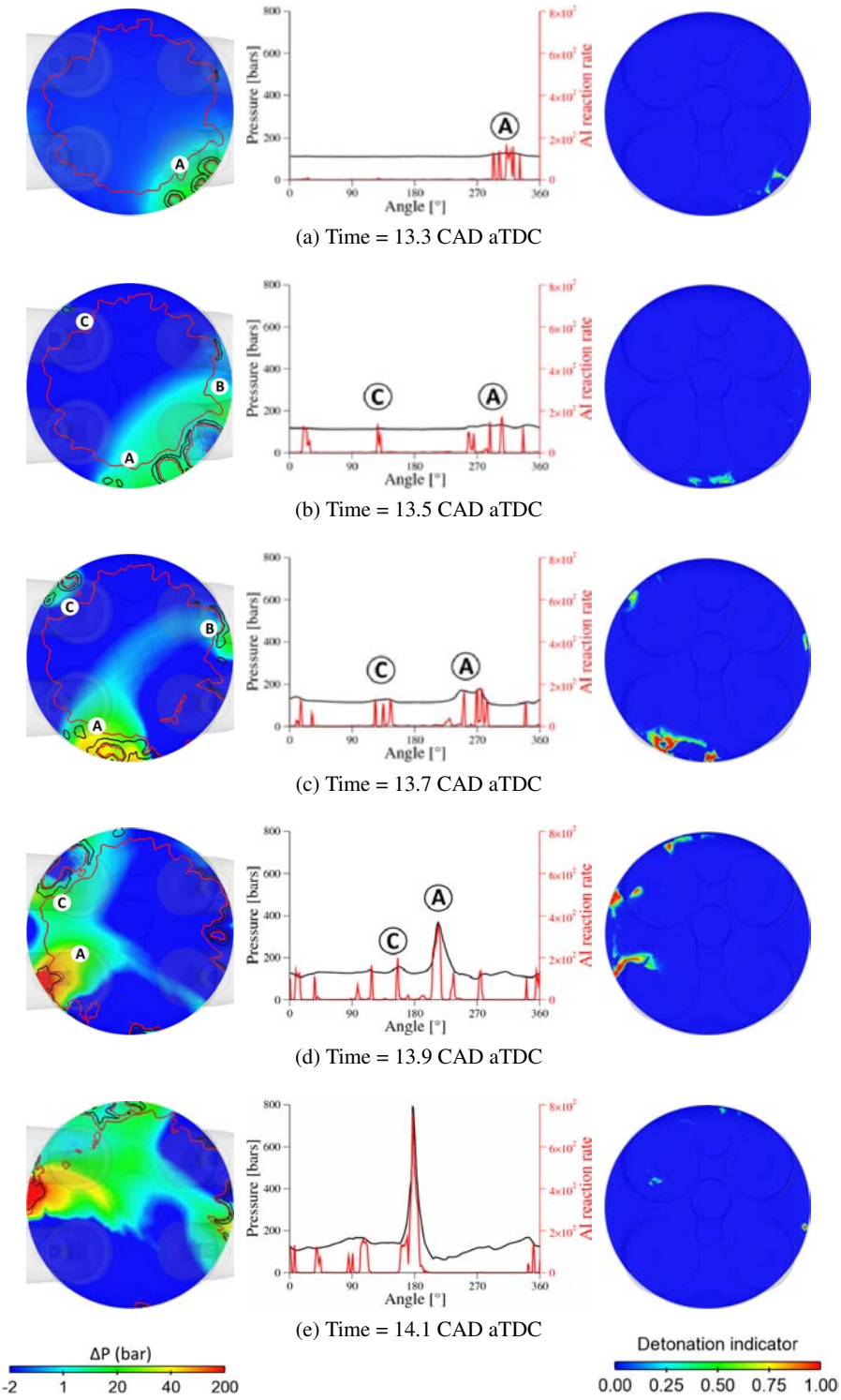


(a) 13.3 CAD aTDC (b) 13.5 CAD aTDC (c) 13.6 CAD aTDC (d) 13.7 CAD aTDC

(e) 13.8 CAD aTDC (f) 13.9 CAD aTDC (g) 14 CAD aTDC (h) 14.1 CAD aTDC

FIG. 6.37: ΔP evolution for cycle 8 at ST = 4 CAD bTDC.





(a) Time = 13.3 CAD aTDC

(b) Time = 13.5 CAD aTDC

(c) Time = 13.7 CAD aTDC

(d) Time = 13.9 CAD aTDC

(e) Time = 14.1 CAD aTDC

FIG. 6.38: ΔP evolution (left), pressure and AI reaction rate on the 1D profile(middle) and detonation indicator (right) at several instants where a DDT is established for cycle 8 at ST = 4 CAD bTDC.



Conclusions for ST = 4 CAD bTDC :
LES analysis shows that the exponential increase of the knock intensity observed at this ST (Fig. 6.17) is due to a coupling between the pressure wave and the local autoignition. This interaction produces a pressure which is much larger than the final constant volume pressure that would be observed during a thermal explosion.

It also explains why the quantity of fresh gases mass burned by AI is not sufficient to explain alone such high intensities. LES allows identifying this coupling explicitly because local and instantaneous conditions of pressure and temperature are directly resolved on the CFD mesh, unlike in RANS or in experiments.

6.4.6 Conclusions

A first LES study addressing different scenarii for knock and super-knock observed in a SI engine is presented in this article. Based on the evolution of knock intensity against the mass burned by AI, two regimes are observed : at low knock intensities, corresponding to standard spark timing, knock intensity is found proportional to the mass burned by AI. For the earliest ST on the contrary, knock intensity is found to increase sharply with the mass burned by AI, suggesting a different AI regime. To confirm this observation and to gain a better understanding of the underlying physics in super-charged engine, two analysis are conducted here :

- ✓ Bradley's diagram for DDT is applied for the first time to multi-dimensional fields using resolved temperature gradients and AI delays given by LES computations. Even if this diagram is obtained using strong simplying hypothesis, its application to LES indicates that reducing the ST allows to change the AI combustion regime from a pure subsonic deflagration for low knock intensities to a progressive DDT regime responsible for the highest knock intensities at the earliest ST. However, this analysis is only "a priori", that is, it can not prove the existence of a DDT.
- ✓ LES has the advantage over RANS and experiments to give a direct access to the instantaneous operation of the engine. This allows a direct visual analysis of the autoignition events. Based on six LES cycles at three different ST, the complex behavior of premixed and autoignition combustion occurring in SI engines is visualized using very temporally refined LES.

Different scenarii of AI are highlighted with one or more AI spots at each cycle. Fig. 6.39 sums up these scenarii, starting on the top from the necessary condition : having a first AI spot. Consequences can be different in terms of AI intensity (and level pressure), because each AI spot can couple or not with the generated pressure wave.

- ✓ LES points out that the lowest intensities (Fig. 6.39, green) are linked to one or several local AI spots which consume the surrounding fresh gases on a few centimeters around the initial spot. There is no coupling with the initial pressure wave, which is only reflected on the chamber walls. These pressure fluctuations are well captured by the local in-cylinder pressure sensor, and their amplitude depends on the time of AI occurrence during the cycle, $i.e.$, on the quantity of fresh gases available, and the local thermodynamic conditions. This case corresponds to a low to moderate knock intensity as encountered for knocking cycles after a normal flame ignition by the spark plug.
- ✓ The highest intensities (Fig. 6.39, red) correspond to what is usually called super-knock, a very intense knock observed under pre-ignition conditions (when a premixed flame is triggered by an initial AI spot before ST) or for very early ST, as done in this study. LES shows that the pressure



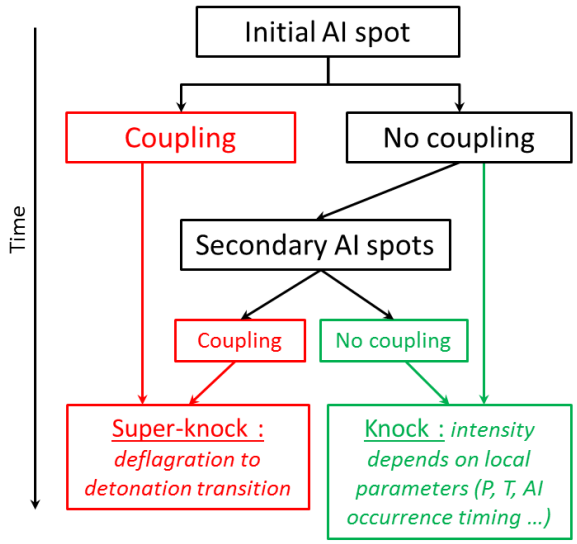


FIG. 6.39: Schematization of AI scenarii visualized in LES calculations.

waves generated by one or a couple of AI spots are strong enough to induce an increase of the fresh gases temperature which is itself strong enough to substantially decrease the AI delay. This allows to generate a coupling between the pressure wave and the AI reaction rate which reinforce each other. The maximum pressure reached by the reactive wave can be much larger than the one reached in a constant volume vessel at the same thermodynamic conditions. These results allow to identify these cases as deflagrations to detonations transitions (DDT). It therefore strongly supports the hypothesis proposed in the litterature [105, 122] that super-knock is caused by DDT. The piston or liner are in this case submitted to very drastic local thermodynamic conditions with pressure variations reaching 800 bars at most. Thanks to the definition of a new local detonation indicator $\mathbb{R}$ based on Bradley's diagram, it is shown that this diagram not only predicts the change of combustion regime as a function of the ST, but it also roughly succeeds in predicting the location and time of appearance of the DDT in the chamber. Note that as suggested by Fig. 6.39, the first AI spot is not always responsible for the DDT. This means that using cold flow LES to calculate the detonation indicator instead of reacting LES as proposed here, would lead to a failure of the indicator in many cases.



CHAPITRE

7

Etude LES du rumble

Dans ce chapitre, le deuxième point de fonctionnement appelé rumble, et dont l'aérodynamique a été validée au chapitre §5, est étudié avec prise en compte de la combustion. Après avoir validé la représentativité de la LES pour l'étude du cliquetis au chapitre précédent, l'objectif est ici de valider la faisabilité d'une étude numérique du phénomène de rumble. Ce chapitre présente dans un premier temps la configuration numérique utilisée pour simuler ce phénomène. Les résultats préliminaires obtenus sur ce point de fonctionnement sont alors détaillés dans une deuxième partie avec une analyse d'un cycle contenant du rumble.

7.1 Configuration numérique

Lors de la réalisation de la BDD ICAMDAC, le même moteur monocylindre a été utilisé pour étudier le point cliquetis (§ 6) et le point rumble simulé ici. Les mêmes maillages sont donc utilisés, et la configuration numérique est aussi volontairement conservée pour valider la robustesse des simulations LES lors d'un changement de point de fonctionnement.
Le tableau 7.1 rappelle les principales caractéristiques de ce point de fonctionnement, ainsi que la configuration numérique présentée plus en détails au chapitre 6.

En plus de la variation de régime et de charge, plusieurs différences sont à noter par rapport au point de fonctionnement cliquetis :

- ✓ un changement de **carburant**. En effet lors de la réalisation des essais à l'isooctane, une AI systématique est apparue proche du PMH. Cette AI d'une faible fraction de la masse de gaz frais admise n'était pas assimilable à du préallumage, cependant pour éviter toute erreur sur les résultats, un point de fonctionnement utilisant du $SP95$ a été choisi pour les comparaisons. En LES, la table TKI est générée à partir du schéma cinétique "IDETHANOL" contenant 560 espèces et 3000 réactions [5], en utilisant comme carburant modèle de l'essence un TRF composé en volume de



Régime	1200 tr/min
Charge	18 bars
AVA de référence	-13°V
Carburant expérimental	SP95
Carburant simulation	Toluene Reference Fuel
Schéma numérique	Stratégie ESO_2 (§ 6.1)
Modèle de sous-maille	Smagorinsky
Condition limite entrée	INOUT RELAX P T Y
Condition limite sortie	INOUT RELAX P T Y

TAB. 7.1: Principales caractéristiques du point de fonctionnement rumble, et rappel de la configuration numérique.

42.8% d'isooctane, 13.7% de n-heptane et 43.5% de toluène [102].

✓ une modification des **températures parois** due au changement de conditions de fonctionnement. Ces nouvelles températures sont estimées comme pour le cas cliquetis à l'aide de l'outil 0D développé durant le projet ICAMDAC (Tab. 7.2). On remarque à nouveau la plus forte température des soupapes d'échappement, et l'écart de température de 50 K [121, 89, 38] (§ 6.1) a été conservé comme ordre de grandeur entre le centre et le bord des soupapes échappement.

Collecteur admission	374 K
Chemise	500 K
Piston	500 K
Soupapes admission	639 K
Queues de soupapes admission	383 K
Soupapes échappement	715 K
Queues de soupapes échappement	396 K
Culasse	500 K
Collecteur échappement	375 K

TAB. 7.2: Récapitulatif des températures parois imposées dans les calculs LES pour le point rumble et pour une température d'eau de 90°C.

✓ un changement **d'AVA de référence**, qui est à présent plus tardive avec un allumage à 13°V après le PMH.

Le type de conditions aux limites en entrée et en sortie du domaine LES est inchangé, mais les valeurs imposées ont été modifiées. Elles restent cependant issues de mesures réalisées dans la BDD expérimentale, et sont présentées sur la figure 7.1.

7.2 Résultats numériques à l'AVA de référence

Une seule AVA est simulée sur ce point de fonctionnement, et la figure 7.2 présente l'enveloppe expérimentale de pression cylindre instantanée (courbes marron) mesurée au niveau de la culasse (Fig. 4.8b),



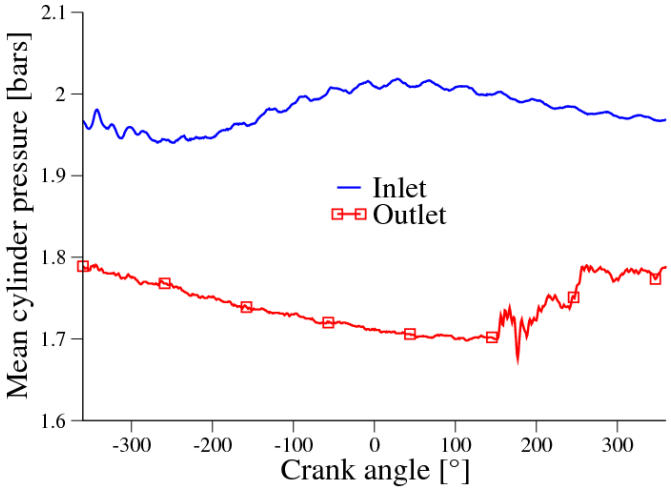


FIG. 7.1: Pressions expérimentales imposées en condition aux limites d'entrée et sortie des calculs LES.

ainsi que la pression cylindre des 16 cycles LES (courbes noires).

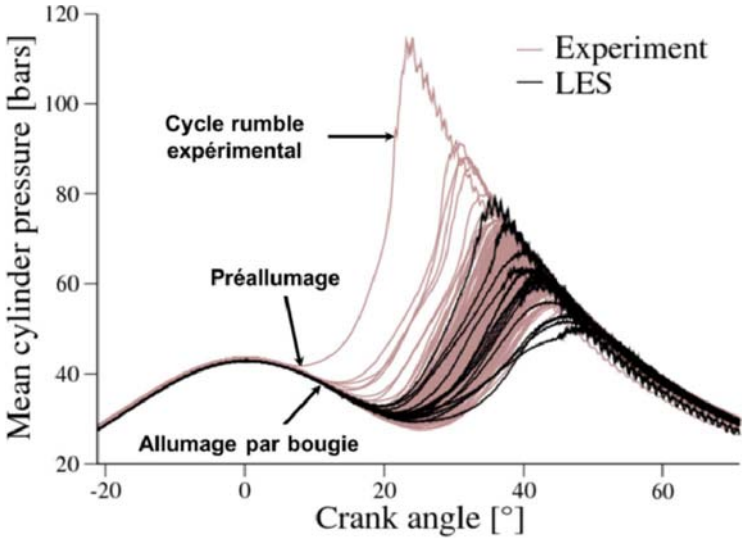


FIG. 7.2: Pression cylindre instantanée au cours du cycle pour l'expérience (marron) et la LES (noir).

Les résultats numériques confirment le potentiel et la robustesse de la LES. En effet, en conservant une configuration numérique similaire, les cycles LES décrivent bien l'enveloppe et la variabilité cycle-à-cycle expérimentale.
Pour confirmer ces observations qualitatives, la PMI moyenne et le COV de la PMI (Eq. 6.1 et Eq. 6.2 du § 6.2) sont présentés dans le tableau 7.3, et on remarque une bonne adéquation entre les résultats numériques et les résultats expérimentaux.

Pour finir, on peut également remarquer sur les résultats expérimentaux de la figure 7.2, qu'un seul



	PMI moyenne (bars)	COV de la PMI
Expérience (Moy des 500 cycles)	20.6	2.2 %
LES	18.7	3.7 %

TAB. 7.3: Comparaison de la PMI moyenne et du COV de la PMI pour le point rumble.

cycle est soumis à du rumble parmi l'échantillon de 800 cycles présenté ici. En effet, le point choisi dans la BDD est volontairement à la limite du rumble pour analyser ce phénomène sans risque d'endommager le moteur. En LES, l'échantillon de cycles disponible est trop restreint pour espérer retrouver un cycle avec du préallumage suivi d'un cliquetis très intense, mais il est possible de provoquer numériquement un départ en auto-inflammation pour analyser le déroulement de la combustion. Cette étude fait l'objet de la partie suivante.

7.3 Analyse des interactions onde de pression/AI

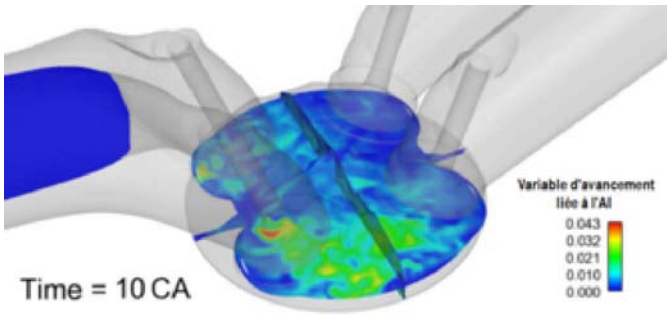
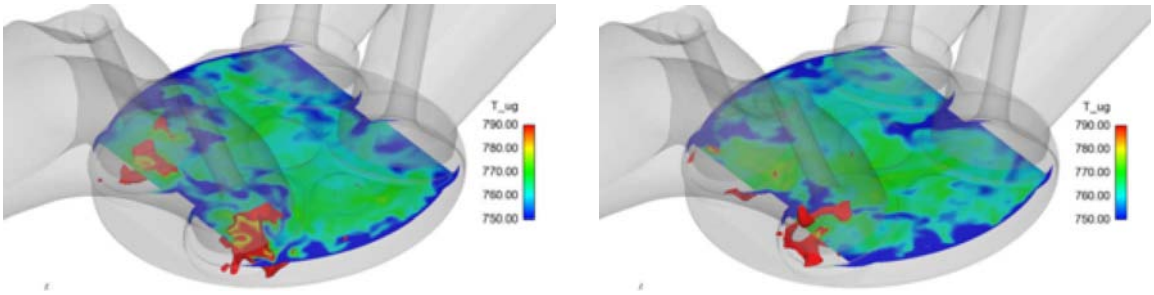


FIG. 7.3: Champs de variable d'avancement de l'AI à 10°V après le PMH.

Comme mentionné précédemment, aucun cycle LES n'est soumis à du préallumage dans l'échantillon disponible. Cependant, si on analyse en détail les champs de variable d'avancement proches du PMH pour un cycle (Fig. 7.3), on remarque que les valeurs de l'avancement en AI ne sont pas négligeables proche des soupapes d'échappement (de l'ordre de 0.045), alors que l'on considère que l'AI se déclenche pour des valeurs proches de 0.1. Les conditions thermodynamiques à forte charge et faible régime semblent donc bien prises en compte dans les calculs LES par la table TKI.
De plus, la figure 7.4 représente les champs de température gaz frais au PMH pour deux cycles différents. On peut tout d'abord noter la forte disparité d'un cycle à l'autre, avec une zone de gaz chauds bien plus prononcée pour le cycle 4 (Fig. 7.4a). L'influence des soupapes échappement (plus chaudes) est ainsi bien visible sur ce cycle, avec un écart d'environ 30 K entre la zone la plus chaude (plus de 790 K), et la majorité de la chambre de combustion qui est à une température entre 760 et 770 K. Ceci correspond aux constatations de la figure 7.3 dont la zone avec l'avancement en AI le plus fort se situe sous les soupapes échappement.
A la vue des valeurs non négligeables de l'avancement en AI et de la forte disparité des champs de température gaz frais, on peut raisonnablement penser que l'apparition du rumble lors d'un cycle ayant des



conditions thermodynamiques un peu plus favorables est tout à fait envisageable. Cependant par manque de temps, nous n'avons pas pu réaliser plus de cycles LES, et une stratégie numérique est mise en place.



(a) Cycle 4 (b) Cycle 7

FIG. 7.4: Température des gaz frais au PMH pour deux cycles LES différents.

D'après les constatations précédentes, une augmentation de la température parois simulant un point chaud dans la chambre semble suffisante pour déclencher un préallumage à certains cycles. Cependant, changer les températures parois implique de relancer les simulations depuis l'admission pour que les gaz environnants aient le temps de chauffer au contact de la paroi, et de se mélanger dans la chambre sous l'effet du mouvement de tumble. Une stratégie numérique plus simple est donc choisie. Elle consiste à multiplier par deux le taux de réaction de l'auto-inflammation directement dans la table TKI, et possède l'avantage d'éviter la simulation d'un grand nombre de phases de calcul. Même si ce forçage représente une approximation forte, l'objectif est ici de valider la possibilité d'étude LES de ce phénomène grâce à la première visualisation d'un cycle rumble et des interactions onde de pression/AI qui se déroulent dans la chambre durant ce phénomène.

A la manière du chapitre précédent pour le cliquetis, une analyse est ainsi réalisée sur un plan horizontal en z=0 (Fig. 6.22 du § 6.4.5). Les résultats sont présentés de manière chronologique entre 4.5°V et 6.66°V après le PMH sur les figures 7.5 et 7.6. Sur chaque ligne, on retrouve l'écart de pression à la moyenne ou ΔP, le délai d'AI exprimé en degré vilebrequin et l'indice de détonation $\mathbb{R}$ mis en place dans cette thèse (Eq. 6.9)
Le préallumage se déclenche vers 4°V après le PMH, et apparaît sur la figure 7.5a à 4.5°V. Cette première AI débute coté échappement, et initie une FP qui se propage dans la chambre. On remarque qu'à cet instant, les délais d'AI dans la chambre sont très grands et l'indice de détonation reste nul.
A 5.7°V (Fig. 7.5b), une deuxième AI se déclenche, mais sa proximité avec le front de flamme initié par le préallumage permet à la FP déjà établie d'englober la FP liée à cette deuxième AI, comme on peut le voir à 6°V (Fig. 7.5d) et à 6.2°V (Fig. 7.5e). Pour ces 3 instants (entre 5.7°V et 6.2°V), on remarque que la propagation de la FP et des ondes acoustiques (de l'ordre de quelques bars) font chuter le délai dans la région notée (A) sur la figure 7.5e.

C'est précisément dans cette région qu'une nouvelle AI se déclenche 0.1°V plus tard, comme illustré par la figure 7.5f (gauche) grâce aux isolignes de taux de réaction de l'AI (lignes noires). Comparé aux cas cliquetis étudiés au chapitre précédent, la quantité de gaz frais restante dans la chambre au moment



de l'AI est beaucoup plus importante, car la FP n'a consommé que 5% du carburant. On assiste alors à une AI en masse (Fig. 7.6a à 7.6f), et l'amplitude des ondes acoustiques visibles grâce au ΔP atteint rapidement plus de 200 bars. De plus, on remarque que l'AI (toujours repérée grâce aux isolignes noires de taux de réaction) suit la progression de l'onde de pression. Un couplage entre AI et pression se met donc en place, et on retrouve le scénario d'une transition vers la détonation comme mis en évidence à la partie § 6.4. En effet, en plus du couplage visuel, les pressions atteintes sont très élevées, et la vitesse de propagation de l'onde a été estimée à 2-3 km/s. Enfin, une dernière validation de la mise en place d'une détonation est effectuée à partir de l'évolution des délais d'AI et de l'indice de détonation. Après le déclenchement en masse de l'AI (Fig. 7.6a à 7.6f), les délais d'AI chutent en même temps que la propagation de l'onde, et l'indice de détonation atteint la valeur maximale de 1 sur une zone relativement étendue (comparé aux cas cliquetis du chapitre 6.4).
La mise en place d'une transition vers la détonation semble donc être l'explication des très fortes pressions enregistrées expérimentalement (plusieurs centaines de bars ont été mesurés dans la BDD ICAMDAC) mais également des casses moteur subies lors des essais.

Un autre point important concerne la représentativité des cas cliquetis avec une très forte AVA simulés au § 6. En effet, ils ont été mis en place numériquement pour représenter le phénomène de rumble malgré la présence d'un allumage par bougie. D'après l'analyse effectuée sur les figures 7.5 et 7.6, le scénario est effectivement le même. Une flamme de prémélange se propage dans la chambre, et engendre une augmentation de la pression et de la température dans les gaz frais. Ces gaz s'auto-inflamment, et selon les conditions thermodynamiques locales, une transition vers la détonation peut se mettre en place. La principale différence réside dans le fait que pour un cycle cliquetis avec une très forte AVA, c'est la bougie qui initie la première FP, alors que dans le cas du rumble, cette FP est issue du préallumage qui peut être localisé à différents endroits de la chambre selon les cycles.

7.4 Conclusions

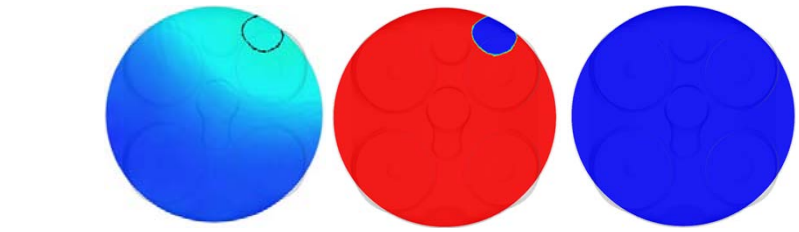
Cette analyse est une première ébauche qui valide la capacité de la LES à reproduire les phénomènes de préallumage et de super-cliquetis. Le point de fonctionnement choisi est néanmoins positionné à la limite d'apparition du rumble pour éviter tout dommage sur le moteur. Le rumble est dans ce cas très sporadique, et il n'est pas possible de le retrouver avec un échantillon de 15 cycles LES. Cependant, dans des conditions plus réalistes d'un moteur fortement downsizé, une augmentation de la fréquence d'apparition est observée comme c'est le cas dans la BDD ICAMDAC qui regroupe différentes variations monoparamétriques sur ce point de fonctionnement. Une variation du débit d'air est par exemple effectuée, et permet de mettre en évidence une augmentation considérable de la fréquence d'apparition du rumble. L'étude de ce point de fonctionnement n'a pas pu être effectuée au cours de cette étude, mais l'outil LES mis en place est à présent capable de reproduire les phénomènes de préallumage et de rumble, donc simuler une telle augmentation de débit d'air en LES devrait permettre de capturer leur apparition.

Le rumble reste néanmoins un phénomène sporadique qui n'apparaît sur certains points de fonctionnement que quelques fois sur plusieurs centaines de cycles (Fig. 7.2). Dans une approche industrielle de l'utilisation de la LES, simuler un grand nombre de cycles est inenvisageable, et il est donc peu pro-

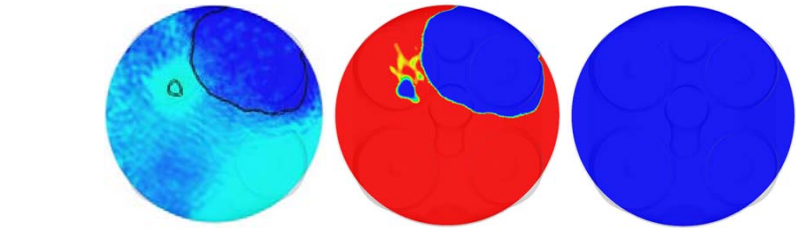


bable de capturer du rumble sur de tels points à la limite d'apparition du phénomène sans le provoquer par l'ajout d'un point chaud par exemple. Ainsi, basé sur les travaux de Linse & al. [83], une nouvelle méthode d'analyse statistique à partir de la variable d'avancement en AI est disponible en annexe de ce manuscrit (Annexe B). L'utilisation de la LES permet d'éviter les hypothèses fortes concernant la répartition de la fraction de mélange ou de la température grâce à la résolution des gradients locaux. Cette approche n'a pas été validée sur les cycles LES disponibles dans cette étude par manque de temps, mais elle représente néanmoins une des perspectives majeures à ses travaux.

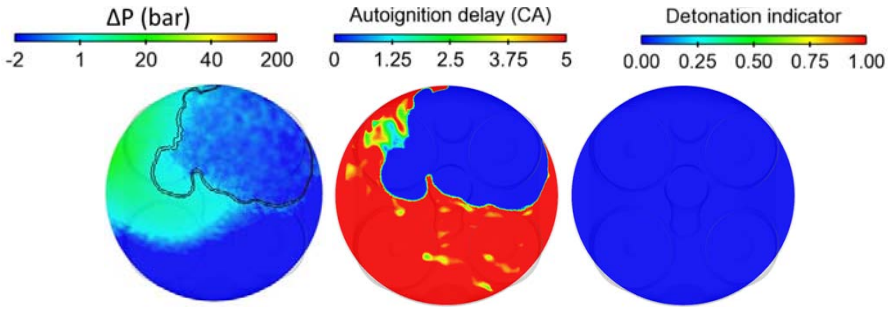




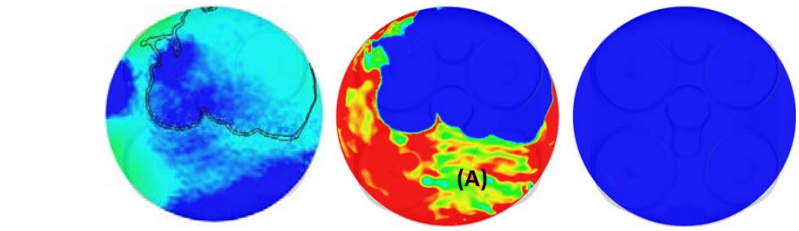
(a) Time = 4.5˚V



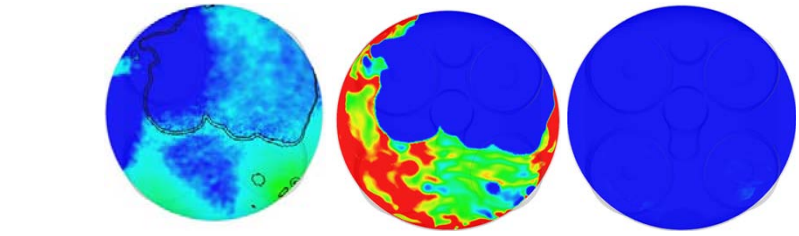
(b) Temps = 5.7˚V



(d) Temps = 6˚V



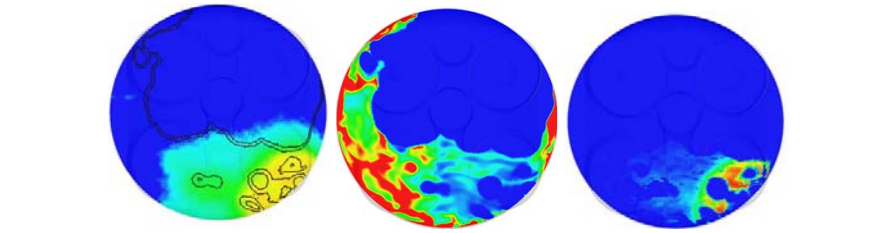
(e) Temps = 6.2˚V



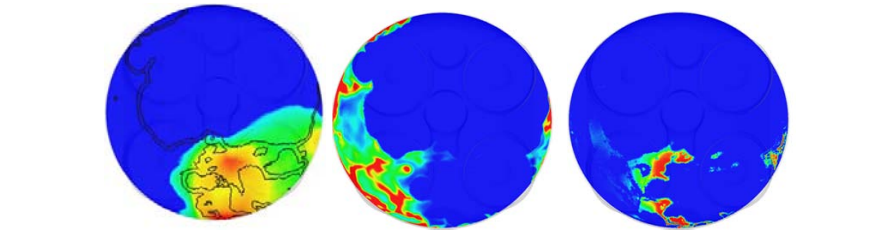
(f) Temps = 6.3˚V

FIG. 7.5: Analyse détaillée sur un plan horizontal (z=0) du ΔP (gauche), du délai d'AI (milieu) et de l'indice de détonation (droite) à différents instants après l'apparition du préallumage. Les iso-lignes représentées en noires sur les champs de ΔP correspondent au taux de réaction en AI.

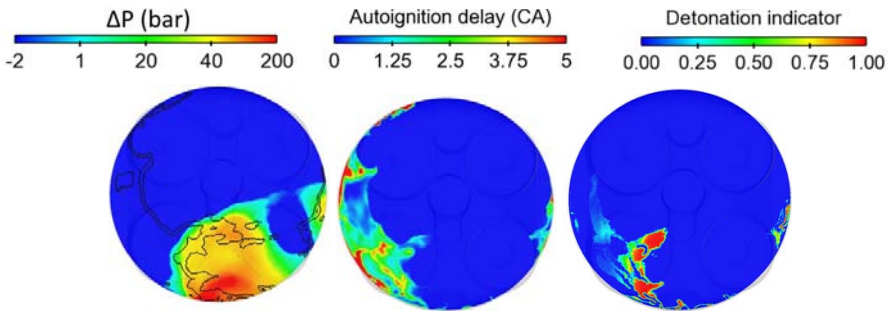




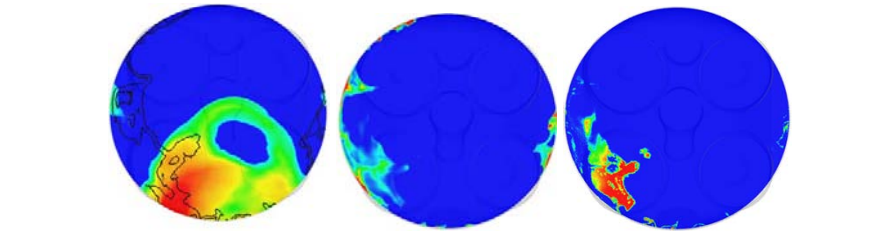
(a) Temps = 6.4°V



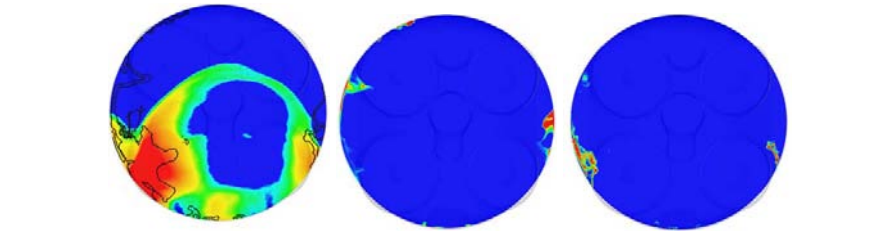
(b) Temps = 6.5°V



(d) Temps = 6.54°V



(e) Temps = 6.6°V



(f) Temps = 6.66°V

FIG. 7.6: Analyse détaillée sur un plan horizontal (z=0) du ΔP (gauche), du délai d'AI (milieu) et de l'indice de détonation (droite) à différents instants après l'apparition du préallumage. Les iso-lignes représentées en noires sur les champs de ΔP correspondent au taux de réaction en AI.





CHAPITRE

8

Conclusions et Perspectives

8.1 Conclusions

Les combustions anormales (cliquetis et rumble) sont un des verrous technologiques majeurs à l'utilisation d'un fort downsizing dans les moteurs à pistons pour réduire la consommation et les émissions de polluants des moteurs essence. Expérimentalement, leur caractérisation est complexe, et même si de nombreuses causes semblent avoir été identifiées, il est très difficile de pouvoir dissocier leurs influences respectives lors du fonctionnement d'un moteur.
La simulation numérique semble donc être complémentaire des recherches expérimentales. Cependant, la simulation 0D ou RANS ne permettent pas d'obtenir des informations locales et instantanées nécessaires à l'étude de phénomènes sporadiques comme les combustions anormales. La LES est donc le candidat idéal car elle donne accès au fonctionnement cycle-à-cycle du moteur, et les études antérieures ont de plus mis en évidence ses capacités à reproduire les VCC ou les phénomènes d'auto-allumage. Cependant, aucune étude quantitative des combustions anormales n'a été effectuée à ce jour du fait de plusieurs points bloquants restant à solutionner. Ces derniers ont fait l'objet des travaux de cette thèse.

Les modèles numériques utilisés pour prendre en compte les phénomènes de turbulence en sous-maille, d'allumage, de propagation d'une flamme ou d'auto-inflammation sont présentés dans le chapitre 2. Cependant, Lecocq & al. avaient déjà mis en évidence une dépendance entre les modèles ECFM-LES et TKI-LES qui favorisait artificiellement les départs en auto-inflammation proche du front de flamme, et empêchait la représentation précise de l'auto-inflammation comme il est nécessaire d'avoir pour l'étude des combustions anormales. Le chapitre 3 présente ainsi les développements effectués dans cette thèse, durant laquelle une nouvelle méthode basée sur des variables d'avancement pour la FP et l'auto-inflammation totalement découplées entre les différents modèles a été proposée et validée.
De plus, la simulation des combustions anormales nécessite une résolution fine de la turbulence et des



stratifications en température. L'influence des modèles de sous-maille et des schémas d'ordre élevé a donc été analysée en collaboration avec le CERFACS sur deux configurations moteur différentes (F7P et ICAMDAC). Nous avons ainsi pu démontrer la faible influence des modèles de sous-maille sur les résultats, qui s'explique notamment par la bonne qualité des maillages utilisés. Une influence non négligeable des schémas d'ordre élevé (troisième ordre en temps et en espace) sur les phases de combustion a quant à elle été observée. En effet, ces schéma permettent de reproduire plus précisément le plissement résolu de la flamme, alors que les schémas d'ordre 2 (Lax-Wendroff) ont tendance à dissiper d'avantage ce plissement. Cependant,pour pallier au surcoût en temps CPU engendré par l'utilisation de ces schémas, une nouvelle stratégie numérique appelée ESO_2 a été développée. Elle consiste à alterner au cours du cycle les schémas numériques, avec l'utilisation d'un schéma de Lax-Wendroff pour les phases d'admission, de compression et d'échappement. Le schéma d'ordre élevé TTGC est quant à lui utilisé pendant les phases de combustion durant lesquelles une bonne résolution des interactions flamme/turbulence est nécessaire. Cette méthodologie, validée sur les deux configurations, est utilisée pour l'ensemble des cycles simulés dans cette étude.
Pour finir, la dernière partie du chapitre 3 regroupe les post-traitements spécifiques à l'étude des combustions anormales et notamment la mise en place d'un indice de détonation noté $\mathbb{R}$ permettant de détecter les zones dans lesquelles un couplage entre l'auto-inflammation et l'acoustique interne du moteur se met en place.
.

Aucune comparaison quantitative n'est possible entre les résultats numériques et expérimentaux sans une BDD spécialement dédiée. C'est précisément l'objectif du projet ANR ICAMDAC dans lequel se sont inscrits ces travaux de thèse, et dont un volet était dédié à la réalisation d'essais sur un moteur monocylindre suralimenté disponible à IFP Énergies nouvelles. Une première partie a été effectuée sur moteur transparent pour caractériser l'aérodynamique interne, alors qu'une deuxième partie de cette campagne a été dédiée à l'étude des combustions anormales sur moteur opaque. L'ensemble des résultats disponibles sont présentés au chapitre 4, avec de nombreux diagnostics optiques et données quantitatives du cliquetis pour un grand nombre de points de fonctionnement. Un choix a cependant dû être effectué pour simplifier la comparaison avec les calculs LES. Deux points ont été choisis, un premier dans des conditions cliquetis et le second dans des conditions rumble, permettant l'analyse numérique de ces deux phénomènes.

La validation des résultats LES s'est également effectuée en deux étapes, avec tout d'abord la comparaison de l'aérodynamique interne dont les résultats sont présentés au chapitre 5. La bonne représentativité de la LES est mise en évidence sur une large gamme de données (pression cylindre, masse enfermée, champs PIV, profils de vitesses dans la chambre), et pour deux conditions moteur différentes en régime et en charge. Quel que soit le point de fonctionnement, les résultats numériques sont parfaitement cohérents avec les résultats expérimentaux, nous permettant de valider l'aérodynamique interne prédite par la LES.

Les calculs LES avec prise en compte de la combustion débutent au chapitre 6 avec l'étude du phénomène de cliquetis. Après une validation sur le point de référence, un balayage complet d'AVA est reproduit en LES. La pression cylindre prédite numériquement est en bon accord avec l'expérience, quelle que soit l'AVA, les 15 cycles simulés décrivent bien l'ensemble de l'enveloppe expérimentale. De plus, basée sur les fluctuations du signal de pression caractéristiques du cliquetis, une première validation visuelle est possible. On remarque que les cycles ayant une combustion rapide sont ceux qui sont soumis à du cliquetis, et la sensibilité au cliquetis augmente avec une augmentation de l'AVA. Outre ces



conclusions qualitatives, l'objectif de ces travaux est de mettre en place pour la première fois une comparaison quantitative. Ainsi, le calcul de la PMI et du COV de la PMI met en évidence un très bon accord des résultats numériques avec l'intervalle expérimental. Ceci confirme la bonne prédiction des variations cycle-à-cycle sur un point fortement chargé (18 bars de PMI), les études précédentes (LESSCO2, SGEmac) s'étant limitées à des points très faible charge (3 bars de PMI typiquement).
La comparaison quantitative est étendue grâce à des post-traitements similaires basés sur les signaux de pression cylindre enregistrés au niveau de la culasse pour la LES et l'expérience. Sur l'ensemble du balayage d'AVA, la LES arrive à reproduire avec un très bon accord les niveaux et les tendances expérimentales. La comparaison de l'angle moyen d'apparition du cliquetis permet par exemple de mettre en évidence que le cliquetis apparaît de plus en plus précocement lorsque l'AVA augmente. De même, le nombre de cycles qui partent en cliquetis et l'intensité maximale de celui-ci sont bien reproduits. Enfin pour les plus fortes AVA, l'intensité du cliquetis augmente fortement ce qui confirme que ces AVA auraient conduit expérimentalement à une destruction certaine du moteur si elles avaient été réalisées expérimentalement (à cause de surpressions de plusieurs centaines de bars).

La LES offre également la possibilité de suivre l'évolution de l'intensité maximale du cliquetis en fonction de la masse brûlée en auto-inflammation, et deux régimes apparaissent. Pour les plus faibles AVA, une évolution linéaire est observée. Cependant à partir d'une AVA égale à 0 °V, une rupture de pente est visible, et la croissance de l'intensité maximale est beaucoup plus rapide. Cette évolution suggère la mise en place de phénomènes complexes durant la combustion, et notamment un couplage entre l'auto-inflammation et les ondes de pression comme déjà évoqué par certains auteurs dans la littérature. Contrairement aux autres méthodes de simulation (0D ou RANS) ou à l'expérience, la LES présente l'avantage de pouvoir analyser en détails ces interactions.

Trois AVA différentes ont ainsi été analysées, une dans chaque régime d'auto-inflammation identifié :

- ✓ Cliquetis modéré (AVA = -8°V) : ces cycles se caractérisent au niveau du signal de pression locale par des fluctuations de faible amplitude. La LES permet de mettre en évidence que la flamme de prémélange initiée par la bougie assure la consommation de la majorité du carburant. Des auto-inflammations locales apparaissent dans les gaz frais, mais leur intensité reste faible car elles ne consomment que la poche de gaz frais environnants. Malgré cela, chaque cycle possède un scénario différent avec une ou plusieurs auto-inflammations dont la localisation varie à chaque cycle, mettant déjà en évidence la complexité et les nombreux paramètres qui influencent le déroulement de l'auto-inflammation en moteur automobile.

- ✓ Cliquetis fort (AVA = 0°V) : cette AVA correspond à la transition entre un cliquetis modéré et le super-cliquetis, et l'étude LES révèle des scenarii d'auto-inflammation différents de l'AVA précédente. L'instant auquel survient l'auto-inflammation semble jouer un rôle primordial, tout comme les conditions locales de température et de pression. La LES montre une évolution conjointe de l'onde de pression et de l'auto-inflammation, mettant en évidence la présence d'un couplage pour certains cycles uniquement. Les niveaux de pression atteints dans de telles conditions sont alors plus élevés que dans un cas où aucun couplage n'est détecté. Les vitesses de propagation sont quant à elle de l'ordre du kilomètre par seconde, ce qui confirme la présence d'une transition de la déflagration vers la détonation.



- ✓ Super-cliquetis (AVA = 4°V) : L'étude de ces cycles permet de lier directement les très fortes intensités à la mise en place d'une transition vers la détonation qui est observée pour l'ensemble des cycles analysés. Des vitesses de propagation encore plus élevées qu'à l'AVA = 0°V sont observées (de l'ordre de 1500 m/s) validant à nouveau la présence d'une transition vers la détonation. De plus, la LES révèle les contraintes thermodynamiques drastiques auxquelles peuvent être soumis les éléments mécaniques du moteur. Les pressions locales enregistrées sont de plus de 800 bars, et semblent être la cause des dommages observés sur les moteurs lors de l'apparition du rumble. Une telle étude permet également de mieux comprendre le biais induit par les analyses uniquement basées sur le signal local de pression. En effet, ce signal dépend fortement de la position relative entre le capteur et le lieu d'apparition de l'auto-inflammation. Ainsi, même si localement la pression peut atteindre 800 bars, le capteur de pression situé au niveau de la culasse enregistre des valeurs maximales de l'ordre de 200 bars pour ce même cycle.

Cette analyse permet donc de mieux comprendre les mécanismes physiques qui se déroulent en moteur automobile durant l'apparition de combustions anormales, et valide la présence d'une transition vers la détonation dans certaines conditions. Pour la première fois, il est mis en évidence que les faibles intensités de cliquetis sont issues d'une ou plusieurs auto-inflammations locales, alors que les niveaux de pression et température résultant de l'apparition du super-cliquetis sont directement liées à un couplage entre le taux de réaction de l'auto-inflammation et l'onde de pression émise. Un indicateur unique de détonation est proposé et validé permettant de localiser globalement les zones de couplage.
Cette analyse démontre enfin qu'une analyse sans combustion basée sur l'indice de détonation ne permettrait pas systématiquement d'indiquer la présence d'un couplage auto-inflammation/onde de pression. En effet, les scénarii d'auto-inflammation mis en évidence par la LES sont relativement complexes. Ce n'est souvent pas le premier spot d'auto-inflammation qui se couple avec l'onde de pression, mais un départ en auto-inflammation secondaire voire tertiaire. Une analyse fine de la transition vers la détonation nécessite donc la prise en compte de tout l'historique du dégagement de chaleur en auto-inflammation, vu les interactions complexes qui se déroulent dans le moteur.

Le dernier chapitre est consacré à l'étude du point de fonctionnement dans des conditions rumble. La simulation de 16 cycles consécutifs met en évidence la représentativité de la LES au niveau de la pression cylindre malgré le changement de régime et de charge. Cependant, le point de fonctionnement choisi se situe à la limite d'apparition de ce phénomène, et l'échantillon LES ne permet pas de capturer un cycle contenant du rumble.
L'apparition du préallumage a donc été provoqué numériquement, validant la capacité de la LES à reproduire ce genre de phénomène. Le préallumage apparaît avant même que la bougie n'allume le mélange, et initie une flamme de prémélange dans la chambre. En effet, la quantité de gaz frais restante est plus élevée que dans les cas cliquetis, et une transition vers la détonation est clairement visible, permettant à nouveau d'expliquer les très forts niveaux de pression enregistrés.

En résumé, les résultats obtenus lors de ces travaux sont très encourageants. Grâce à un nouveau couplage entre les modèles ECFM-LES, ISSIM-LES et TKI-LES, une première étude quantitative des combustions anormales est réalisée, et la LES reste prédictive même lors de variations paramétriques. Cette étude met donc en évidence la capacité de la LES à reproduire en détails les phénomènes de combustions anormales. De plus, elle permet de fournir des premières explications sur les mécanismes



physiques complexes intervenant dans le déroulement des combustions anormales en dissociant leurs influences.

8.2 Perspectives

Cette étude a montré que la LES permettait de représenter les combustions anormales sur une variation monoparamétrique de la BDD ICAMDAC, en l'occurrence un changement d'avance à l'allumage. Cependant, d'autres variations ont été réalisées expérimentalement avec notamment une augmentation de la dilution ou de l'intensité du tumble (grâce à l'ajout de lames dans les tubulures d'admission). Ces nouvelles variations monoparamétriques font actuellement l'objet des travaux de la thèse CIFRE d'A. Misdariis (Renault/CERFACS). Les calculs LES sont en cours de réalisation en utilisant les mêmes paramètres et modèles que dans cette étude, et les premiers résultats confirment la bonne représentativité de la LES, ainsi que la robustesse des modèles utilisés.
Un couplage entre AVBP et le logiciel de thermique AVTP est également l'un des objectifs de cette thèse, et devrait permettre d'améliorer l'estimation des températures parois qui jouent un rôle clef dans l'apparition des combustions anormales.

De plus, l'ensemble des résultats en combustion de cette étude ont été obtenus grâce à un échantillon de 15 cycles LES, dont la représentativité par rapport aux 500 cycles expérimentaux peut être remise en question. Le projet PRACE SolitonCycLES N°2013091887 a ainsi débuté en avril 2014, avec pour but d'augmenter l'échantillon de cycles LES disponible. L'objectif est ainsi de valider les conclusions obtenues dans cette thèse, mais également de compléter les variations monoparamétriques qui n'ont pas pu être réalisées numériquement durant le projet ICAMDAC, notamment sur l'étude du préallumage thermodynamique dont une ébauche a été présentée dans le dernier chapitre. En effet, ce projet a obtenu une allocation de 15 Millions d'heures de calcul sur la machine CURIE du CEA, permettant d'envisager des calculs intensifs. Une des conclusions espérée est la mise en évidence qu'un échantillon de 15 cycles est suffisamment représentatif des tendances des combustions anormales, ce qui limiterait les coûts en calcul.

Une autre limitation de ces travaux est la non prise en compte de l'injection directe du carburant dans la chambre de combustion. En effet, grâce à la précocité de l'injection durant l'admission, il a été admis en première approximation que le mélange expérimental est homogène au moment de l'allumage. Les modèles numériques n'étaient pas disponibles au début de cette étude, mais la thèse de N. Iafrate actuellement en cours à IFPEN a pour but de développer et valider les modèles d'injection directe et d'interactions parois dans AVBP en utilisant le formalisme lagrangien. En effet, les stratifications en richesse peuvent raccourcir localement les délais et favoriser ainsi l'apparition du cliquetis ou du rumble. L'évaporation du spray liquide est quant à elle un puits important d'énergie qui diminue la température des gaz frais et limite l'apparition des combustions anormales. Les gradients de température peuvent également être impactés, or les résultats de cette thèse ont mis en évidence l'importance majeure de ce paramètre. L'objectif final est donc d'étudier l'impact réel de l'injection directe sur le mélange, mais également sur les combustions anormales en comparaison avec les calculs réalisés dans cette thèse dans un cas homogène.

De même, certaines hypothèses effectuées lors de l'étude de la transition vers la détonation devront



être affinées, notamment au niveau du calcul des paramètres de Bradley. Le paramètre ε nécessite l'estimation d'une longueur l correspondante à la longueur de gaz frais favorable au développement de l'auto-inflammation initiale. Or, les conditions de fonctionnement moteur sont relativement variables, et l'étude des interactions auto-inflammation/pression a bien mise en évidence les fortes variations des délais d'auto-inflammation ou des stratifications de la température des gaz frais au cours d'un même cycle. Dans cette étude, ce paramètre est estimé à partir de champs LES à un 1 cm, mais il est surtout fixe ce qui ne permet pas une représentation précise des différentes interactions. Un travail d'approfondissement est donc nécessaire à ce niveau pour mettre en place un calcul en chaque point du maillage et pour chaque itération permettant une estimation plus précise des paramètres de Bradley, mais également de l'indice de détonation $\mathbb{R}$ proposé.
De plus, une homogénéité de l'auto-inflammation en sous-maille est supposée dans cette étude, et les LES ne reproduisent donc qu'un couplage au niveau résolu. Une influence de la prise en compte d'une stratification en sous-maille de l'auto-inflammation n'est donc pas à exclure, et une étude basée sur des DNS et des expériences académiques est nécessaire pour étudier cet aspect-là.
Plusieurs hypothèses fortes restent donc à lever pour arriver à une prédiction fine des zones de couplage. Cependant, imposer la longueur l semble satisfaisant en première approximation à la vue des validations réalisées sur l'indice de détonation. Une idée peut alors être d'intégrer cet indicateur sur le volume de la chambre, mais ceci nécessite de calculer cet indicateur de manière précise. Une valeur non nulle signifierait alors qu'une transition vers la détonation s'établit localement dans la chambre, et les conséquences sur le moteur pourront alors être estimées par une analyse du volume sur lequel $\mathbb{R}$ est non nul par exemple.

Une autre manière d'étudier les risques encourus par le moteur est proposée en fin de manuscrit (Annexe B) avec la mise en place des probabilités d'auto-inflammation permettant de détecter si un point de fonctionnement ou une géométrie moteur présentent des risques d'apparition de combustions anormales. A la différence de l'indice de détonation, cet indicateur s'utilise sans avoir de déclenchement de combustions anormales comme c'est le cas pour le rumble qui n'apparaît que quelques fois sur plusieurs centaines de cycle. Ces probabilités n'ont cependant pas pu être testées sur un ensemble de cycles et pour différentes variations monoparamétriques. Après validation, cet indicateur pourra être un élément de plus vers l'industrialisation de la LES, fournissant des informations sur la probabilité faible ou forte de rencontrer du rumble thermodynamique lors de la conception d'une nouvelle géométrie. En effet, il ne prend en compte que ce type de rumble, qui n'est lié qu'à l'historique de la pression et de la température dans les gaz frais. Le rumble dus aux gouttes liquides de carburant, à l'encrassement, au film d'huile, etc ... restent quant à lui totalement à investiguer.

Pour finir, des travaux sur les modèles 0D ont été initiés à IFP Énergies nouvelles par S. Richard durant le projet ICAMDAC. Un modèle de combustions anormales a été développé et les calculs LES de cette thèse ont servi de données d'entrée. Le modèle CFM1D et le modèle d'auto-inflammation TKI réduit sont utilisés, couplés au modèle de CCV développé durant le projet LESCCV. La prise en compte de l'auto-inflammation s'effectue en deux étapes, avec tout d'abord le calcul d'une intégrale de Livengood pour déterminer le moment de l'auto-inflammation. Ensuite une prise en compte des oscillations de pression liées au cliquetis ou au super-cliquetis est mise en place en fonction du mode d'auto-inflammation déterminé d'après le diagramme de Bradley.



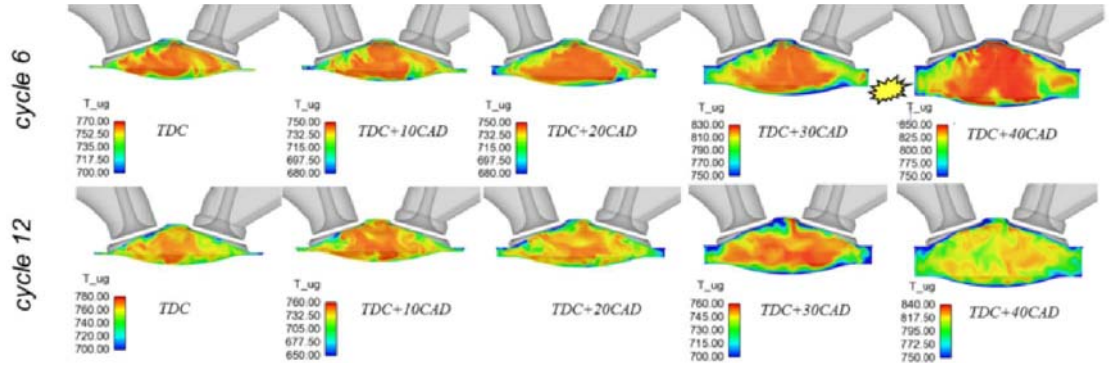


FIG. 8.1: Stratifications en température prédite par la LES pour deux cycles à différents instants après le PMH.

Pour initier un départ en auto-inflammation, un point chaud à proximité des soupapes échappement est utilisé, et cette auto-inflammation est considérée comme la source d'une flamme de prémélange. La stratification moyenne en température des gaz frais est alors estimée à partir des simulations LES comme le montre la figure 8.1 qui présente des champs de température gaz frais pour deux cycles et à plusieurs instants après le PMH. A la vue des résultats LES, une stratification de +/- 15 K a été retenue pour les calculs 0D. De même une fluctuation du niveau de tumble de 10% est estimée à partir des niveaux de tumble enregistrés pour les 30 cycles simulés en LES.
Le modèle ainsi mis en place arrive à reproduire l'enveloppe de pression cylindre sur un balayage d'AVA pour le cliquetis (Fig. 8.2), mais également à capter du préallumage (Fig. 8.3). Pour finir, un déplacement similaire à celui observé en LES dans le diagramme de Bradley est retrouvé en 0D, où les cycles sans cliquetis sont dans la zone de déflagration, alors que les cycles avec du rumble sont situés dans la péninsule de détonation. Tout comme en LES, l'étude 0D des combustions anormales se poursuit à IFPEN pour valider les nouveaux modèles mis en place sur plusieurs points de fonctionnement moteur, et pour différentes variations monoparamétriques.

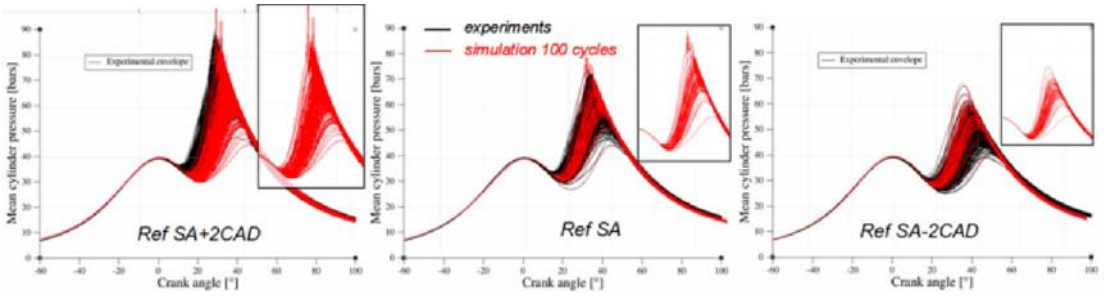


FIG. 8.2: Pression cylindre prédite par le modèle 0D comparée à l'enveloppe de pression expérimentale pour le point cliquetis.

Les perspectives et pistes d'améliorations des travaux présentés dans ce manuscrit sont donc nom-



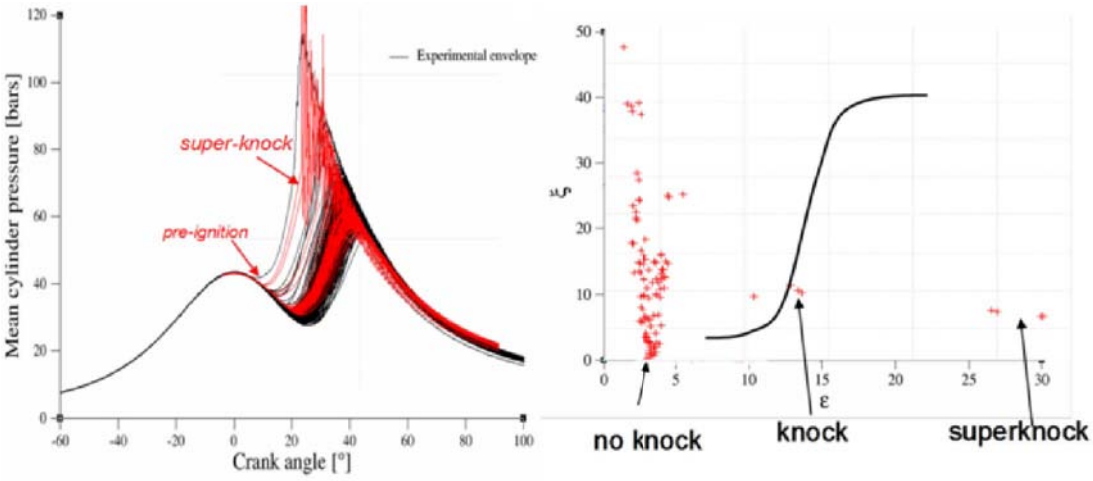


FIG. 8.3: Pression cylindre prédite par le modèle 0D comparée à l'enveloppe de pression expérimentale pour le point rumble, et localisation des différents cycles dans le diagramme de Bradley.

breuses, mais l'application réalisée ici est un pas de plus vers l'industrialisation et l'intégration de la LES dans la chaîne de développement des moteurs automobiles.



BIBLIOGRAPHIE

[1] International Agency for Research on Cancer, Diesel engine exhaust, 12 june 2012. http ://press.iarc.fr/pr213_E.pdf.

[2] A. Abinov, V. Plotnikov, and Y. Shebeko. Shock wave formation in flame propagation in a gas-air mixture within a tube. *Combust. Explos. Shock Waves*, 23 :37–40, 1987.

[3] Agence Nationale de la Recherche. Projet ICAMDAC, Instabilités et Combustions Anormales dans les Moteurs Downsizés à Allumage Commandé, ANR-10-VPTT-0002.

[4] M. Amann, D. Mehta, and T. Alger. Engine Operating Condition and Gasoline Fuel Composition Effects on Low-Speed Pre-Ignition in High-Performance Spark Ignited Gasoline Engines. *SAE Int. J. Engines*, 4 :274–285, 04 2011.

[5] J. Anderlohr, R. Bounaceur, A. Pires Da Cruz, and F. Battinleclerc. Modeling of autoignition and NO sensitization for the oxidation of IC engine surrogate fuels. *Combustion and Flame*, 156(2) :505–521, 2009.

[6] C. Angelberger, D. Veynante, F. Egolfopoulos, and T. Poinsot. Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. *Proceedings of the Summer Program* , 159 :61–82, 1998.

[7] C. Bailly and G. Comte-Bellot. *Turbulence*. CNRS Editions, 2003.

[8] B. Baüerle, F. Hoffmann, F. Behrendt, and J. Warnatz. Detection of hot spots in the end gas of an internal combustion engine using two-dimensional lif of formaldehyde. *Proc. Combust. Inst.*, 25 :135–141, 1994.

[9] Benbrahim-Tallaa and coll. Carcinogenicity of Diesel-engine and gasoline-engine exhausts and some nitroarenes. The Lancet oncology 2012.

[10] M. Boger. *Modélisation de sous-maille pour la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, Chatenay-Malabry, France, 2000.

[11] S. Bougrine. *Modélisation 0D de la Combustion des Carburants Alternatifs dans les Moteurs à Allumage Commandé*. PhD thesis, 2012.



[12] S. Bougrine, S. Richard, J.-B. Michel, and D. Veynante. Simulation of CO and NO emissions in a SI engine using a 0D coherent flame model coupled with a tabulated chemistry approach. *Applied Energy* , 113(0) :1199 – 1215, 2014.

[13] D. Bradley and G. Kalghatgi. Influence of autoignition delay time characteristics of different fuels on pressure waves and knock in reciprocating engines. *Combustion and Flame*, 156(12) :2307 – 2318, 2009.

[14] D. Bradley and C. Morley. Amplified Pressure Waves During Autoignition : Relevance to CAI Engines. *SAE Technical Paper, 2002-01-2868*, 10 2002.

[15] P. N. Brown, G. D. Byrne, and A. C. Hindmarsh. VODE, a Variable-Coefficient ODE Solver. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 10 :1038–1051, 1989.

[16] A. Burluka, K. Liu, C. Sheppard, A. Smallbone, and R. Woolley. The Influence of Simulated Residual and NO Concentrations on Knock Onset for PRFs and Gasolines. SAE Technical Paper, 2004-01-2998, 2004.

[17] T. Butler and P. O'Rourke. A numerical method for two dimensionel unsteady reacting flows. In *16th Symposium (International) on Combustion*, pages 1503–1516, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1977.

[18] I. Celik, I. Yavuz, and A. Smirnov. Large eddy simulations of in-cylinder turbulence for internal combustion engines : a review. *International Journal of Engine Research* , 2(2) :119–148, 2001.

[19] I. Celik, I. Yavuz, A. Smirnov, J. Smith, E. Amin, and A. Gel. Prediction of in-cylinder turbulence for IC engines. *Combust. Sci. Technol.*, 153 :339–368, 2000.

[20] F. Charlette. *Simulation numérique de la combustion turbulente prémélange par méthode aux grandes échelles*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2002.

[21] F. Charlette, C. Meneveau, and D. Veynante. A power-law flame wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion Part I : non-dynamic formulation and initial tests. *Combustion and Flame*, 131(1-2) :159 – 180, 2002.

[22] O. Colin. *Simulations aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée dans les statoréacteurs*. PhD thesis, INP Toulouse, 2000.

[23] O. Colin and A. Benkenida. A new scalar fluctuation model to predict mixing in evaporating two-phase flows. *Combustion and Flame*, 134(3) :207–227, 2003.

[24] O. Colin, A. Benkenida, and C. Angelberger. 3D Modelling of Mixing, Ignition and Combustion Phenomena in Highly Stratified Gasoline Engines. *Oil & Gas Sci. Technol. - Rev. IFP Energies nouvelles* , 58(1) :47–62, 2003.

[25] O. Colin, A. P. da Cruz, and S. Jay. Detailed chemistry-based auto-ignition model including low temperature phenomena applied to 3-D engine calculations. *Proc. Combust. Inst.*, 30 :2649–2656, 2005.

[26] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinsot. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids* , 12(7) :1843–1863, 2000.

[27] O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for LES. *Journal of Computational Physics* , 162(2) :338–371, 2000.

[28] O. Colin and K. Truffin. A spark ignition model for large eddy simulation based on an FSD transport equation (ISSIM-LES). *Proc. Combust. Inst.*, 33(2) :3097 – 3104, 2011.



[29] E. Corti and C. Forte. Combination of In-Cylinder Pressure Signal Analysis and CFD Simulation for Knock Detection Purposes. volume 2, pages 368–380. SAE Int. J. Engines, 2009-24-0019, 09 2009.

[30] L. De Francqueville. *Projet ICAMDAC, Phase 4.2 : Essais sur monocylindre opaque, Base de données moteur allumage commandé*. Technical report.

[31] J. Deardorff. A numerical study of the three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics*, 41 (2) :453–480, 1970.

[32] J. M. Duclos and O. Colin. Arc and kernel tracking ignition model for 3D spark ignition engine calculations. pages 343–350, Nagoya, Japon, 2001.

[33] V. Dugué, D. Veynante, and N. Gauchet. Applicability of Large Eddy Simulation to the Fluid Mechanics in a Real Engine Configuration by Means of an Industrial Code. volume SAE 2006-01-1194, 2006.

[34] B. Enaux. *Simulation aux Grandes Echelles d'un moteur À allumage commangé - Evaluation des variabilités cycliques*. PhD thesis, 2010.

[35] B. Enaux, V. Granet, O. Vermorel, C. Lacour, C. Pera, C. Angelberger, and T. Poinsot. LES and experimental study of cycle-to-cycle variations in a spark ignition engine. *Proc. Combust. Inst.*, 33 :3115–3122, 2011.

[36] B. Enaux, V. Granet, O. Vermorel, C. Lacour, L. Thobois, V. Dugué, and T. Poinsot. Large Eddy Simulation of a Motored Single-Cylinder Piston Engine : Numerical Strategies and Validation. *Flow, Turbulence and Combustion*, 86(2) :153–177, 2010.

[37] R. Ernst, S. Münzinger, B. Hanula, T. Schnitzler, and F. Geiser. The Pre-ignition Phenomenon Causes, Emergence and Avoidance. *MTZ worldwide*, 63(11) :5–8, 2002.

[38] J. Ewald, M. Budde, B. Morcinkowski, R. Beykirch, and P. Adomeit. CAE tool chain for the prediction of pre-ignition risk in gasoline engines. Number Comodia, pages 567–572, 2012.

[39] A. Felt, J. Warren, and C. Hall. Rumble - a Deposit Effect at High Compression Ratios. *SAE Technical Paper 590018*, 1959.

[40] B. Fiorina, R. Vicquelin, P. Auzillon, N. Darabiha, O. Gicquel, and D. Veynante. A filtered tabulated chemistry model for LES of premixed combustion. *Combustion and Flame*, 157(3) :465–475, 3 2010.

[41] S. Fontanesi, A. D'Adamo, S. Paltrinieri, G. Cantore, and C. Rutland. Assessment of the potential of proper orthogonal decomposition for the analysis of combustion CCV and knock tendency in a high performance engine. SAE Paper 2013-24-0031, 09 2013.

[42] S. Fontanesi, S. Paltrinieri, A. D'Adamo, G. Cantore, and C. Rutland. Knock tendency prediction in a high performance engine using LES and tabulated chemistry. *SAE Paper 2013-01-1082*, 6 :98–118, 04 2013.

[43] S. Fontanesi, S. Paltrinieri, A. Tiberi, and A. D'Adamo. LES Multi-cycle Analysis of a High Performance GDI Engine. 04 2013.

[44] M. Germano, A. Maffio, S. Sello, and G. Mariotti. On the extension of the dynamic modelling procedure to turbulent reacting flows. pages 291 – 300. Kluwer Academic Publishers, 1997.

[45] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids* , 3(7) :1760–1765, 1991.



[46] D. Goryntsev, A. Sadiki, M. Klein, and J. Janicka. Large eddy simulation based analysis of the effects of cycle-to-cycle variations on air-fuel mixing in realistic DISI IC-engines. *Proc. Combust. Inst.*, 32 :2759–2766, 2009.

[47] N. Gourdain, L. Gicquel, M. Montagnac, O. Vermorel, M. Gazaix, G. Staffelbach, M. Garcia, J. Boussuge, and T. Poinsot. High performance parallel computing of flows in complex geometries - part 1 : Methods. *Computational Science & Discovery*, 2, 2009.

[48] N. Gourdain, L. Gicquel, G. Staffelbach, O. Vermorel, F. Duchaine, J.-F. Boussuge, and T. Poinsot. High performance parallel computing of flows in complex geometries - part 2 : applications. *Computational Science & Discovery*, 2(1), 2009.

[49] V. Granet. *La simulation aux grandes échelles : outil pour la prediction des variabilités cycliques dans les moteurs à allumage commandé*. PhD thesis, 2011.

[50] V. Granet, O. Vermorel, C. Lacour, B. Enaux, V. Dugué, and T. Poinsot. Large-Eddy Simulation and experimental study of cycle-to-cycle variations of stable and unstable operating points in a spark ignition engine. *Combustion and Flame*, 159(4) :1562–1575, 2012.

[51] X. Gu, D. Emerson, and D. Bradley. Modes of reaction front propagation from hot spots. *Combustion and Flame*, 133(1-2) :63–74, 2003.

[52] F. Guillemin. *Mesure du niveau de cliquetis sur un moteur essence/éthanol avec un capteur de pression cylindre et un capteur accélérométrique*. Technical report, IFP Energies nouvelles, 2010.

[53] P. Haenel., P. Seyfried., H. Kleeberg., and D. Tomazic. Systematic Approach to Analyze and Characterize Pre-ignition Events in Turbocharged Direct-injected Gasoline Engines. *SAE Technical Paper, 2011-01-0343*, 2011.

[54] S. Hajireza, F. Mauss, and B. Sundén. Hot-spot Autoignition in Spark Ignition Engines. *Proc. Combust. Inst.*, 28(1) :1169 – 1175, 2000.

[55] M. Halstead, J. Kirsch, A. Prothero, and C. Quinn. A mathematical model for hydrocarbon autoignition at high pressures. volume 346, pages 515–538, 1975.

[56] M. Halstead, J. Kirsch, A. Prothero, and C. Quinn. The auto-ignition of hydrocarbon fuels at high temperatures and pressures - Fitting of a mathematical model. *Combustion and Flame*, 30 :45–60, 1977.

[57] C. Hasse, V. Sohm, and B. Durst. Detached eddy simulation of cyclic large scale fluctuations in a simplified engine setup. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 30(1) :32 – 43, 2009.

[58] E. R. Hawkes and R. S. Cant. A flame surface density approach to large-eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Proc. Combust. Inst.*, 28 :51–58, 2000.

[59] D. Haworth. Large-eddy simulation of in-cylinder flows. *Oil & Gas Sci. Technol. - Rev. IFP Energies nouvelles* , 54(2) :175–185, 1999.

[60] A. Hettinger, A. Kulzer, and U. Spicher. Higher specific load-increasing knock risk evaluation of measures for knock reduction using multiple pressure indication. Int. Symp. Combust. Diag. (9), Baden-baden, 2010.

[61] J. B. Heywood. *Internal Combustion Engine Fundamentals*. McGraw-Hill series in mechanical engineering, 1988.

[62] S. Jerzembeck, N. Peters, P. Pepiot-Desjardins, and H. Pitsch. Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline : Experimental and numerical investigation. *Combustion and Flame*, 156(2) :292–301, 2009.



[63] R. Jhavar and C. J. Rutland. Using large-eddy simulations to study mixing effects in early injection diesel engine combustion. *SAE paper, 2006-01-0871*, 2006.

[64] G. T. Kalghatgi and D. Bradley. Pre-ignition and super-knock in turbo-charged spark-ignition engines. *International Journal of Engine Research* , 13(4) :399–414, 2012.

[65] G. A. Karim. A Dimensionless Criterion for Predicting the Onset of Knock in Spark Ignition Engines. *SAE Technical Paper, 2004-01-1992*, 2004.

[66] M. Katsumata, K. Morikawa, and M. Tanabe. Behavior of Shock Wave and Pressure Wave of SI Knocking with Super Rapid Compression Machine. *SAE Technical Paper, 2011-01-1875*, 08 2011.

[67] N. Kawahara and E. Tomita. Visulization of Auto-ignition and Pressure Wave During Knocking in a Hydrogen Spark-Ignition Engine. *Int. J. Hydrogen Energy* , 34 :3156 – 3163, 2009.

[68] N. Kawahara, E. Tomita, and Y. Sakata. Auto-ignited Kernels During Knocking Combustion in a Spark-Ignition Engine. *Proc. Combust. Inst.*, 31(2) :2999 – 3006, 2007.

[69] R. Kee, F. Rupley, and J. Miller. Chemkin-II : A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics. (SAND89-9009B), 1989.

[70] V. Knop, J.-B. Michel, and O. Colin. On the use of a tabulation approach to model auto-ignition during flame propagation in SI engines. *Applied Energy* , 88 :4968–4979, 2011.

[71] K. Kuo. *Principles of Combustion (2nd ed.)*. John Wiley, New York, 1986.

[72] G. König, R. Maly, D. Bradley, A. Lau, and C. Sheppard. Role of Exothermic Centres on Knock Initiation and Knock Damage. *SAE Technical Paper, 902136*, 99 :840–861, 1990.

[73] G. König and C. Sheppard. End Gas Autoignition and Knock in a Spark Ignition Engine. *SAE Technical paper, 902135*, 1990.

[74] G. Lacaze, E. Richardson, and T. J. Poinsot. Large Eddy Simulation of Spark Ignition in a Turbulent Methane Jet. *Combustion and Flame*, 156(6) :1993–2009, 2009.

[75] C. Lacour and C. Pera. An experimental database dedicated to the study and modelling of cyclic variability in spark-ignition engines with LES. *SAE paper*, (2011-01-1282), 2011.

[76] C. Lacour, C. Pera, B. Enaux, O. Vermorel, C. Angelberger, and T. Poinsot. Exploring cyclic variability in a spark-ignition engine using experimental techniques, system simulation and large-eddy simulation. *Proc. of the 4th European Combustion Meeting*, 2009.

[77] F.-A. Lafossas, M. Castagne, J. P. Dumas, and S. Henriot. Development and validation of a knock model in spark ignition engines using a CFD code. *SAE Paper 2002-01-2701*, 2002.

[78] P. D. Lax and B. Wendroff. Difference schemes for hyperbolic equations with high order of accuracy. *Communications on Pure and Applied Mathematics* , 17 :381–398, 1964.

[79] G. Lecocq. *Approches hybrides combinant chimie complexe, description statistique et densité de surface de flamme pour la simulation aux grandes échelles de l'auto-inflammation, l'allumage par bougie et la flamme de prémélange dans les moteurs à allumage commandé*. PhD thesis, INSA Rouen, 2010.

[80] G. Lecocq, S. Richard, O. Colin, and L. Vervisch. Hybrid presumed pdf and flame surface density approaches for Large-Eddy Simulation of premixed turbulent combustion : Part 1 : Formalism and simulation of a quasi-steady burner. *Combustion and Flame*, 158(6) :1201 – 1214, 2011.



[81] G. Lecocq, S. Richard, J.-B. Michel, and L. Vervisch. A new LES model coupling flame surface density and tabulated kinetics approaches to investigate knock and pre-ignition in piston engines. *Proc. Combust. Inst.*, 33(2) :3105 – 3114, 2011.

[82] D. Lilly. A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. *Phys. Fluids* , A 4(3) :633–635, 1992.

[83] D. Linse, A. Kleemann, and C. Hasse. Probability density function approach coupled with detailed chemical kinetics for the prediction of knock in turbocharged direct injection spark ignition engines. *Combustion and Flame*, 161(4) :997 – 1014, 2014.

[84] J. Livengood and P. Wu. Correlation of autoignition phenomena in internal combustion engines and rapid compression machines. *Symposium (International) on Combustion*, 5(1) :347 – 356, 1955.

[85] A. Lutz, R. Kee, J. Miller, H. Dwyer, and A. Oppenheim. Effects of auto-ignition centers for hydrogen and c1,2-hydrocarbon fuels. *Proc. Combust. Inst.*, 22 :1683–1693, 1988.

[86] J.-P. Légier, T. Poinsot, and D. Veynante. Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed combustion. In *Proceedings of the Summer Program* , pages 157–168, 2000.

[87] C. Meneveau and T. Lund. The dynamic smagorinsky model and scale-dependent coefficients in the viscous range of turbulence. *Phys. Fluids* , 9(12) :3932–3934, 1997.

[88] C. Meneveau and T. Poinsot. Stretching and quenching of flamelets in turbulent premixed combustion. *Combustion and Flame*, 86 :311–332, 1991.

[89] S. S. Merola, P. Sementa, C. Tornatore, and B. M. Vaglieco. Optical investigations of the abnormal combustion in a boosted spark-ignition PFI engine. *SAE Int. J. Engines*, 2 :632–644, 04 2009.

[90] M. Metghalki and J. Keck. Burning velocities of mixtures of air with methanol, isooctane and indolene at high pressure and temperature. *Combustion and Flame*, 48 :191–210, 1982.

[91] J.-B. Michel, S. Richard, and O. Colin. Différentiation des avancements AI/PF. Méthode FPI généralisée : Couplage du modéle ECFM à l'approche FPI-détente. Rapport de recherche GSM E.2.3 2008. Technical Report 60944, IFPEN, 2009.

[92] A. Misdariis, A. Robert, O. Vermorel, S. Richard, and T. Poinsot. Numerical Methods and Turbulence Modeling for LES of Piston Engines : Impact on Flow Motion and Combustion. *Oil & Gas Sci. Technol. - Rev. IFP Energies nouvelles* , 2013.

[93] R. Mittal and P. Moin. Suitability of upwind-biased finite difference schemes for large-eddy simulation of turbulent flows. *AIAA Journal* , 35 :1415–1417, 1997.

[94] P. Moin, K. Squires, W. Cabot, and S. Lee. A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Phys. Fluids* , A 3(11) :2746–2757, 1991.

[95] Y. Morinishi, S. Tamano, and K. Nakabayashi. Direct numerical simulation of compressible turbulent channel flow between adiabatic and isothermal walls. *Journal of Fluid Mechanics*, 502 :273–308, 2004.

[96] V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, and T. Poinsot. Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *Journal of Computational Physics* , 202(2) :710 – 736, 2005.

[97] Y. Nakagawa, Y. Takagi, T. Itoh, and T. Iijima. Laser Shadowgraphic Analysis of Knocking in S.I. Engine. *SAE paper 845001*, 1984.



[98] J. Nygren, J. Hult, M. Richter, M. Aldén, M. Christensen, A. Hultqvist, and B. Johansson.

[99] P. O'Rourke and F. Bracco. Two scaling transformations for the numerical computation of multidimesional unsteady laminar flames. *Combust. Sci. Technol.*, 70 :1–15, 1979.

[100] J. Pan and C. Sheppard. A Theoretical and Experimental Study of the Modes of End Gas Autoignition Leading to Knock in SI Engines. SAE Paper 942060.

[101] J. Pan, C. Sheppard, A. Tindall, M. Berzins, S. Pennington, and J. Ware. End Gas Inhomogeneity, Autoignition and Knock. SAE Paper 982616.

[102] C. Pera and V. Knop. Methodology to define gasoline surrogates dedicated to auto-ignition in engines. *Fuel*, 96 :59–69, 2012.

[103] C. Pera, S. Richard, and C. Angelberger. Exploitation of multi-cycle engine LES to introduce physical perturbations in 1D engine models for reproducing CCV. *SAE paper*, (2012-01-0127), 2012.

[104] R. Perry and H. Lowther. Knock : Spark Knock, Wild Ping, or Rumble ? *SAE Technical Paper 590019*, 1959.

[105] N. Peters, B. Kerschgens, and G. Paczko. Super-knock Prediction Using a Refined Theory of Turbulence. volume 6, pages 953–967. SAE Int. J. Engines, 2013-01-1109, 04 2013.

[106] L. G. Pless. Surface Ignition and Rumble in Engines. *SAE Technical Paper 650391*, 1965.

[107] T. Poinsot and L. Selle. Large eddy simulation and acoustic analysis of combustion instabilities in gas turbines. In *Proceedings of the ECCOMAS thematic Conference on Computational Combustion*, Lisbon, Portugal, 2005.

[108] T. J. Poinsot and S. K. Lelef. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics* , 101(1) :104 – 129, 1992.

[109] S. B. Pope. Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows. *New Journal of Physics*, 6 :35, 2004.

[110] M. Pöschl and T. Sattelmayer. Influence of temperature inhomogeneities on knocking combustion. *Combustion and Flame*, 153(4) :562 – 573, 2008.

[111] V. Renouard and C. Pera. *Caractérisation d'une Base de Données Expérimentales Dédiées à la Simulation aux Grandes Echelles des Instabilités en Moteur Downsizé à Allumage Commandé*. Technical report, IFPEN, 2011.

[112] B. Reveille and A. Duparchy. 3D CFD Analysis of an Abnormally Rapid Combustion Phenomenon in Downsized Gasoline Engines. *Oil & Gas Sci. Technol. - Rev. IFP Energies nouvelles* , 64(3) :431–444, 2009.

[113] E. Riber, V. Moureau, M. García, T. Poinsot, and O. Simonin. Evaluation of numerical strategies for large eddy simulation of particulate two-phase recirculating flows. *Journal of Computational Physics* , 228(2) :539–564, 2009.

[114] S. Richard. *Simulations systèmes d'un moteur et modèle système pour les combustions anormales (Projet ICAMDAC)*. Technical report.

[115] S. Richard. *Simulation aux grandes échelles de la combustion dans les moteurs à allumage commandé*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2005.



[116] S. Richard. Processus de combustion dans les moteurs à piston : Evolution des technologies et modes de combustion approches pour l'intégration de chimie complexe dans les codes de calcul. 2012.

[117] S. Richard, S. Bougrine, G. Font, F.-a. Lafossas, and F. Le Berr. On the Reduction of a 3D CFD Combustion Model to Build a Physical 0D Model for Simulating Heat Release, Knock and Pollutants in SI Engines. *Oil & Gas Sci. Technol. - Rev. IFP Energies nouvelles* , 64(3) :223–242, 2009.

[118] S. Richard, O. Colin, O. Vermorel, A. Benkenida, C. Angelberger, and D. Veynante. Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. *Proc. Combust. Inst.*, 31 :3059 – 3066, 2007.

[119] A. Robert, S. Richard, O. Colin, L. Martinez, and L. D. Francqueville. LES Prediction and Analysis of Knocking Combustion in a Spark Ignition Engine. *Proc. Combust. Inst.*, 35(3) :2941–2948, 2014.

[120] J. Robison, M. Behrens, and R. Mosher. Investigating Rumble in Single-Cylinder Engines. *SAE Technical Paper 590022*, 1959.

[121] M. Rothe, T. Heidenreich, U. Spicher, and A. Schubert. Knock behavior of SI engines : Thermodynamic analysis of knock onset locations and knock intensities. *SAE International 2006-01-0225*, 2006.

[122] J. Rudloff, J.-M. Zaccardi, S. Richard, and J. Anderlohr. Analysis of pre-ignition in highly charged SI engines : Emphasis on the auto-ignition mode. *Proc. Combust. Inst.*, 34 :2959 – 2967, 2013.

[123] C. J. Rutland. Large-eddy simulations for internal combustion engines - a review. *International Journal of Engine Research* , 2011.

[124] M. Sanjosé, J. M. Senoner, F. Jaegle, B. Cuenot, S. Moreau, and T. Poinsot. Fuel injection model for euler–euler and euler–lagrange large-eddy simulations of an evaporating spray inside an aeronautical combustor. *Int. J. of Multiphase Flow* , 37(5) :514–529, 6 2011.

[125] J. Shao and C. Rutland. Modeling investigation of auto-ignition and engine knock by ho2. *SAE Technical Paper, 2014-01-1221*, 04 2014.

[126] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations. I : The basic experiment. *Mon. Weather Rev.* , 91(3) :99–164, 1963.

[127] K. Steurs, C. Blomberg, and K. Boulouchos. Formulation of a knock model for ethanol and isooctane under specific consideration of the thermal boundary layer within the end-gas. *SAE Int. J. Engines*, 7 :1752–1772, 10 2014.

[128] A. Teraji, T. Tsuda, T. Noda, M. Kubo, and T. Itoh. Development of a novel flame propagation model (UCFM : Universal coherent flamelet model) for SI engines and its application to knocking prediction. SAE Paper 2005-01-0199, 04 2005.

[129] L. Thobois. *Intérêt et faisabilité de la simulation aux grandes échelles dans les moteurs automobiles*. PhD thesis, 2006.

[130] L. Thobois, R. Lauvergne, and T. Poinsot. Using LES to Investigate Reacting Flow Physics in Engine Design Process. 2007.

[131] L. Thobois, G. Rymer, T. Souleres, T. Poinsot, and B. V. den Heuvel. Large-eddy simulation for the prediction of aerodynamics in IC engines. *International Journal of Vehicle Design* , 39 :368–382, 2005.



[132] H. B. Toda, O. Cabrit, G. Balarac, S. Bose, J. Lee, H. Choi, and F. Nicoud. A subgrid-scale model based on sigular values for les in complex geometries. page 193. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2010.

[133] R. Van Basshuysen. *Gasoline Engine with Direct Injection*, volume 39. 2009.

[134] F. Vangraefschepe and J. Zaccardi. Analysis of Destructive Abnormal Combustions Appearing at High Load and Low Engine Speed on High Performance Gasoline Engines. In *SIA Conference Strasbourg*, 2007.

[135] A. Velghe, J. Bohbot, and S. Jays. A High Efficiency Parallel Architecture Dedicated to Internal Combustion Engine Simulation Coupled with Chemical Kinetic Solver. 2014.

[136] O. Vermorel, S. Richard, O. Colin, C. Angelberger, A. Benkenida, and D. Veynante. Towards the understanding of cyclic variability in a spark ignited engine using multi-cycle LES. *Combustion and Flame*, 156(8) :1525 – 1541, 2009.

[137] J. Willand, M. Daniel, E. Montefrancesco, B. Geringer, P. Hofmann, and M. Kieberger. Limits on downsizing in spark ignition engines due to pre-ignition. *MTZ worldwide*, 70(5) :56–61, 2009.

[138] F. Williams. *Combustion theory (2nd ed.)*. Addison-Wesley, 1985.

[139] P. Wolf, G. Staffelbach, A. Roux, L. Gicquel, T. Poinsot, and V. Moureau. Massively parallel LES of azimuthal thermo-acoustic instabilities in annular gas turbines. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(6-7) :385–394, 2009.

[140] P. K. Yeung, S. S. Girimaji, and S. B. Pope. Straining and scalar dissipation on material surfaces in turbulence : implications for flamelets. *Combustion and Flame*, 79 :340–365, 1990.

[141] J.-M. Zaccardi, L. Duval, and A. Pagot. Development of Specific Tools for Analysis and Quantification of Pre-ignition in a Boosted SI Engine. volume 2, pages 1587–1600. SAE Int. J. Engines, 2009-01-1795, 2009.

[142] Y. Zel'dovich. Regime Classification of an Exothermic Reaction With Nonuniform Initial Conditions. *Combustion and Flame*, 39(2) :211 – 214, 1980.





ANNEXE

A

LES prediction and analysis of knocking combustion in a spark ignition engine

L'article présenté dans cette partie reprend les principaux résultats de l'analyse quantitative du cliquetis effectuée dans cette thèse aux paragraphes §6.1 à §6.3. Il a été accepté pour présentation lors du 35^{th} Symposium International de Combustion, qui se déroulera à San Francisco, du 3 au 8 août 2014.



LES prediction and analysis of knocking combustion in a spark ignition engine

A. Robert[a,b], S. Richard[a], O. Colin[a,*], L. Martinez[a], L. De Francqueville[a]

[a] *IFP Energies nouvelles, 1-4 avenue de Bois-Préau, 92852 Rueil-Malmaison, France*
[b] *PSA Peugeot Citroën, route de Gizy, 78943 Velizy-villacoublay, France*

Abstract

Highly boosted spark ignition (SI) engines are more and more attractive for car manufacturers in terms of efficiency and CO_2 emissions. However, thermodynamic conditions encountered in these engines promote the occurrence of abnormal combustions like knock or super-knock, which are experimentally difficult to analyse due to the risks of engine damages. The Reynolds averaged Navier-Stokes (RANS) method mainly used in industry for piston engines is not the most appropriate as knock does not always affect the mean cycle captured by RANS. Using an accurate LES compressible code and improved versions of ECFM-LES (Extended Coherent Flame Model) and TKI (Tabulated Kinetics of Ignition) models allowing a full uncoupling of flame propagation and auto-ignition reaction rates, this work demonstrates for the first time that LES is able to describe quantitatively knocking combustion in a realistic SI engine configuration. Contrary to previous studies [S. Fontanesi and S. Paltrinieri and A. D'Adamo and G. Cantore and C. Rutland, SAE Int. J. Fuels Lubr., 2013-01-1082, pp. 98-118][G. Lecocq, S. Richard, J.-B. Michel, L. Vervisch, Proc. Combust. Inst. 33 (2011) 3105-3114], a quantified knock analysis is conducted based on a specific post-processing of both numerical and experimental data. LES is able to predict the in-cylinder pressure variability, the knock occurrence frequency and the mean knock onset crank angle for several spark timings. A 3D analysis also demonstrates that knock occurs at random locations, mainly at the exhaust valves side. Knock intensity is found proportional to the fresh gases mass burned by auto-ignition at low knock intensities, while an exponential increase at the highest intensities suggests the influence of additional factors like the knock location in the cylinder or complex behaviour of knocking combustion.

Keywords: LES, Spark ignition, Engine, Combustion, Knock

1. Introduction

In the last decade downsized spark ignition (SI) engines running under high loads have become more and more attractive for car manufacturers because of their increased thermal efficiency and lower CO_2 emissions. However, high loads also induce more severe thermodynamic conditions in the cylinder, promoting the occurrence of abnormal combustion phenomena like knock or super-knock. Knock is related to the sudden auto-ignition (AI) of the fresh gases before their consumption by the premixed flame initiated by the spark ignition device. It highly depends on the current combustion velocity as well as species composition and temperature fluctuations in the cylinder, making knock a recurrent but non-cyclic phenomenon.

The detailed study of abnormal combustions is experimentally complex because of their possible destructive characteristic. Such limitations previously motivated the use of CFD for better understanding these specific combustions. Notably, RANS simulations were used to predict and understand the occurrence of knock [1, 2]. However the RANS approach is limited to the description of the mean cycle, which is not necessarily subjected to knock or super-knock because of their sporadic nature. Although the use of probability functions were recently proposed to extract knock statistics from RANS simulations [3], Large Eddy Simulations (LES) appear as an attractive alternative because it allows the simulations of individual cycles, thus reproducing the sporadicity of abnormal combustions. In the last few years, first attempts were made to model these phenomena [4, 5], demonstrating the potential of LES to address this topic. However, even if knock was observed and known trends were recovered, LES results

*Corresponding author. Fax: +33147526685. E-mail address: olivier.colin@ifpen.fr

were not fully quantitatively compared to experimental data. In addition, the ECFM-LES [4, 6] premixed flame description was not totally decoupled from the TKI [7] auto-ignition description, thus promoting the knock occurrence in the vicinity of the flame front.

The present paper thus proposes to address for the first time quantitative LES of knocking combustion in a SI engine using a dedicated experimental database. Such simulations are conducted with a new version of the ECFM-LES, TKI and ISSIM models allowing to fully uncouple flame propagation from auto-ignition. Spark timing variations are performed around optimal settings and results are compared with experiments in terms of in-cylinder pressure envelope, indicated mean effective pressure (IMEP) or knock occurrence frequency and intensity. An analysis of the end gas auto-ignition location is also performed to better characterize and understand the knocking conditions of the studied combustion chamber.

2. Adaptation of the ECFM-LES approach to auto-ignition

The complete equations of ECFM-LES and ISSIM are detailed in [8] and [9]. Only the modifications brought to the models are presented here.

2.1. State representation

ECFM-LES [6] is derived using a bimodal decomposition of any filtered quantity $\tilde{\phi}$: $\tilde{\phi} = (1-\tilde{c})\phi|^u + \tilde{c}\phi|^b$, where $\phi|^u$ and $\phi|^b$ denote the conditional fresh and burned gases states and $\tilde{c}$ the mean progress of reaction, equal to zero in fresh gases and unity in burned gases. When introducing auto-ignition, the mean progress of reaction $\tilde{c}$ needs to be decomposed into a progress of the premixed flame propagation, $\tilde{c}_\Sigma$, and a progress of the auto-ignition $\tilde{c}_{ai}$. The decomposition becomes:

$$\tilde{\phi} = (1-\tilde{c}_\Sigma)\phi|^{ai} + \tilde{c}_\Sigma\phi|^b \quad (1)$$

This first decomposition corresponds to the line "ai/b states" in Fig. 1. The new conditional state $\phi|^{ai}$ in Eq. (1) corresponds to fresh gases that are undergoing auto-ignition. Although this state is homogeneous in composition, it is also decomposed into fresh and burned gases states to avoid a complexification of the state representation:

$$\phi|^{ai} = (1-\tilde{c}_{ai})\phi|^u + \tilde{c}_{ai}\phi|^b \quad (2)$$

This second decomposition corresponds to the line "u/b states" in Fig. 1.

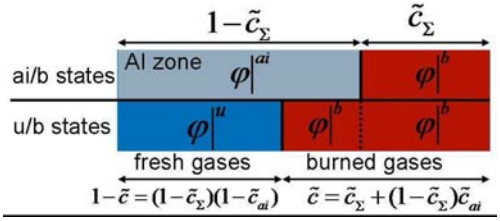


Figure 1: Schematic representation of the model

2.2. Progress variables calculation

Setting $\phi = c$ in Eq. (1) and (2), a relation between the three progress variables is obtained:

$$1-\tilde{c} = (1-\tilde{c}_{ai})(1-\tilde{c}_\Sigma) \quad (3)$$

Here we choose to define $\tilde{c}$ and $\tilde{c}_{ai}$ by their transport equations and to deduce $\tilde{c}_\Sigma$ using Eq. (3).

$\tilde{c}$ is given as in [8] by $\tilde{c} = 1 - \tilde{Y}_F^u/\tilde{Y}_{TF}$ where $\tilde{Y}_F^u$ and $\tilde{Y}_{TF}$ are the fresh gases and tracer fuel mass fractions given by their transport equations [10], which is of the type:

$$\frac{\partial\bar{\rho}\widetilde{\phi}}{\partial t} = -\nabla.\left(\bar{\rho}\widetilde{\mathbf{u}}\widetilde{\phi}\right) + \nabla.\left(\bar{\rho}\left(\nu+\widehat{\nu_t}\right)\nabla\widetilde{\phi}\right) + \bar{\rho}\tilde{\omega}_\phi \quad (4)$$

In the above equation, $\bar{\rho}$, $\widetilde{\mathbf{u}}$ and $\bar{\rho}\tilde{\omega}_\phi$ are the filtered density, velocity and reaction rate. ν is the kinematic viscosity and $\widehat{\nu_t}$ the turbulent viscosity at the combustion filter size $\widehat{\Delta}$. While $\tilde{\omega}_{\tilde{Y}_{TF}} = 0$ because $\tilde{Y}_{TF}$ is a passive scalar, $\tilde{\omega}_{\tilde{Y}_F^u}$ is obtained by deriving Eq. (3):

$$\tilde{\omega}_{\tilde{Y}_F^u} = -\tilde{Y}_{TF}((1-\tilde{c}_{ai})(\dot{\omega}_c^\Sigma + \dot{\omega}_c^{ign}) + (1-\tilde{c}_\Sigma)\dot{\omega}_c^{ai}) \quad (5)$$

$\dot{\omega}_c^\Sigma = \rho_u S_l \bar{\Sigma}$ is the standard ECFM-LES source term. $\dot{\omega}_c^{ign} = \rho_b max(0, \bar{c}_{ign} - \bar{c}_\Sigma)dt^{-1}$ is the ISSIM spark ignition source term [9] where ρ_b is the burned gases density and $\bar{c}_{ign}$ is the initial target gaussian profile of $\bar{c}_\Sigma$. $\dot{\omega}_c^{ai}$ is given like in [4] by the Tabulated Kinetics Ignition (TKI) model [11]: $\dot{\omega}_c^{ai} = \dot{\omega}_c^{TKI}(\bar{p}, \tilde{T}_u, \tilde{\Phi}, \tilde{Y}_D, \tilde{c}_{ai})$, where $\bar{p}$, $\tilde{T}_u$, $\tilde{\Phi}$, $\tilde{Y}_D$ represent respectively the filtered pressure, fresh gases temperature, fuel/air equivalence ratio and diluent mass fraction.

In [4], $\tilde{c}_{ai}$ was calculated like in RANS [12] using a transport equation for the fuel burned by auto-ignition $\tilde{Y}_F^{b,ai} = \tilde{c}_{ai}(1-\tilde{c}_\Sigma)\tilde{Y}_{TF}$. Although this definition is coherent with the state representation of Fig. 1, it is numerically difficult to handle because of its dependancy to $\tilde{c}_\Sigma$.

$\tilde{c}_{ai}$ is here defined using the conditional fuel mass fraction in the auto-ignition state:

$$\tilde{c}_{ai} = 1 - \tilde{Y}_F^u|^{ai}/\tilde{Y}_{TF} \quad (6)$$

$\tilde{Y}_F^{u|ai}$ follows Eq. (4) and its source term is given by derivation of Eq. (6): $\tilde{\omega}_{\tilde{Y}_F^{u|ai}} = -\tilde{Y}_{TF}\dot{\omega}_c^{ai}$. Unlike in previous applications of TKI, the precursor variable $\tilde{Y}_{IR}$ is not needed because $\tilde{c}_{ai}$ correctly represents the complete auto-ignition event including the inception period.

2.3. Modification of flame surface density (FSD) related quantities

The FSD equation of ECFM-LES combined with the spark ignition model ISSIM is detailled in [9]. By introducing auto-ignition, $\tilde{c}$, which now represents both auto-ignition and flame propagation, must be replaced by $\tilde{c}_\Sigma$ and $\bar{c}$ by $\bar{c}_\Sigma = \bar{\rho}/\rho_b\tilde{c}_\Sigma$ in all expressions related to the FSD. The FSD equation thus reads:

$$\begin{aligned}\partial\bar{\Sigma}/\partial t &= T_{res} + T_{sgs} + S_{sgs} + \alpha C_{sgs} + P + \\ \alpha &\quad (C_{res} + S_{res}) + (1-\alpha)S_{ign}\bar{\Sigma} + \bar{\dot{\omega}}_\Sigma^{ign} \quad (7)\end{aligned}$$

where $T_{res} = -\nabla.\left(\widetilde{\mathbf{u}}\bar{\Sigma}\right)$, $S_{res} = (\nabla.\widetilde{\mathbf{u}} - \mathbf{NN} : \nabla\widetilde{\mathbf{u}})\,\bar{\Sigma}$, $C_{res} = S_d\,(\nabla.\mathbf{N})\,\bar{\Sigma}$ and $P = -\nabla.\left(\alpha S_d\,\mathbf{N}\,\bar{\Sigma}\right)$ are respectively the transport, strain, curvature and propagation terms due to resolved flow motions. In these terms, S_d is the FSD displacement speed deduced from the laminar flame speed S_l: $S_d = \rho_u/\bar{\rho}S_l$. $T_{sgs} = \nabla.\left((\nu + \widehat{\nu_t})\,\nabla\bar{\Sigma}\right)$, $S_{sgs} = \Gamma\left(\frac{\widehat{u'}}{S_l}, \frac{\widehat{\Delta}}{\delta_l}\right)\frac{\widehat{u'}}{\widehat{\Delta}}\bar{\Sigma}$ and $C_{sgs} = \beta S_l\frac{c^*-\bar{c}_{Sigma}}{\bar{c}_\Sigma(1-\bar{c}_\Sigma)}\left(\bar{\Sigma} - \bar{\Sigma}_{lam}\right)\bar{\Sigma}$ are respectively the unresolved transport, strain and curvature terms. In S_{sgs}, $\widehat{u'}$ is the velocity fluctuation at scale $\widehat{\Delta}$ and Γ the efficiency function [13].

In Eq. (7), coefficient $\alpha = 1$ during ignition and zero afterwards [9]. It is defined as $\alpha = 0.5(1 + \tanh((r_b/\hat{\Delta} - 0.75)/0.15)$ where r_b is the ignition burned gases radius. r_b is itself given by the transport equation of $\Psi = 2/r_b\tilde{c}_\Sigma\tilde{Y}_{TF}$ which follows Eq. (4) with the source term:

$$\begin{aligned}\tilde{\dot{\omega}}_\Psi &= -0.5S_{ign}\Psi + 2r_b^{-1}(\dot{\omega}_c^\Sigma + \dot{\omega}_c^{ign}) + \\ &\quad max((2\rho_b/(\bar{\rho}r_b)\bar{c}_{ign} - \Psi)dt^{-1}, 0) \quad (8)\end{aligned}$$

In [9] the ignition stretch S_{ign} in Eq. (7) and Eq. (8) is modeled as $S_{ign} = 2r_b^{-1}(1+\tau)\Xi S_l$. In this expression, the SGS wrinkling factor Ξ appears explicitly and needs to be modeled. Assuming the initial kernel is moderately wrinkled, $\Xi = 1$ was assumed in [9]. As this hypothesis tends to underpredict the effect of turbulence on the initial kernel growth, it is now relaxed. Assuming a spherical kernel, $\bar{\Sigma}$ can be approximated as $\bar{\Sigma} = \frac{S_b}{V_b}\frac{V_b}{V} = \frac{3}{r_b}\Xi\bar{c}_\Sigma$. This expression allows to deduce Ξ from $\bar{\Sigma}$ and can be inserted in that of S_{ign} leading to:

$$S_{ign} = \frac{2}{3}\frac{1+\tau}{\bar{c}_\Sigma}S_l\bar{\Sigma} \quad (9)$$

It can be noticed that S_{ign} is proportional to $(1+\tau)/\bar{c}_\Sigma \propto 1/\tilde{c}_\Sigma$ while the positive contribution of C_{sgs} (when $\bar{c}_\Sigma < c^*$) is proportional to $1/\bar{c}_\Sigma$. At the same time, S_{ign} and C_{sgs} describe the same SGS curvature term, one during ignition, the other after ignition. In order to make them coherent, C_{sgs} is modified following the corresponding expression used in RANS [10]:

$$C_{sgs} = \left(\frac{2}{3}\frac{1+\tau}{\bar{c}_\Sigma} - \frac{\beta}{(1-\bar{c}_\Sigma)}\right)S_l\left(\bar{\Sigma} - \bar{\Sigma}_{lam}\right)\bar{\Sigma} \quad (10)$$

3. Results and discussion

3.1. Experimental configuration and numerical set-up

The experimental configuration consists of a four-valve downsized single cylinder engine of 400cc as specified in table 1. The engine is fueled with iso-octane and works under homogeneous conditions.

Table 1: Main engine specifications

Bore	Stroke	Speed	IMEP	Fuel
77 mm	85.8 mm	1800 RPM	19 bars	C_8H_{18}

LES calculations are performed with the AVBP code [14] using unstructured tetrahedral meshes ranging from 3.0 to 12.4 Millions cells depending on the crank angle (CA). During combustion, the cell size is of the order of 0.2 mm around the spark plug and 0.5 mm in the rest of the chamber. The rest of the time, it is close to 0.8 mm. The SGS stress tensor is modeled using the Smagorinsky model [15] while the $ES\,O_2$ hybrid numerical strategy is used for space and time discretization [16]. At ST, an average ratio of the turbulent to molecular viscosity of the order of 10 is observed around the spark plug and close to 25 in the rest of the chamber. These ratios denote a correctly resolved LES [17]. The TKI table is built using the iso-octane mechanism of Jerzembeck [18], while the laminar flame speed is given by the correlation of Metghalki and Keck [19].

Starting from a zero velocity initial field, 17 consecutive cycles were run. The first two cycles are discarded because they still depended on the initial conditions. The 15 useful cycles represent about 300 000 CPU hours on Intel Sandy Bridge 2.7GHz processors. A lthough much smaller than the 500 experimental cycles, this figure allows a quantitative assessment of knock as shown in the next sections.

3.2. Comparisons at the reference spark timing

The spark timing (ST) of +8 CA after Top Dead Center (aTDC) is chosen as a reference. It corresponds to the experimental knock limit, *i.e*. the maximum spark advance with an acceptable knock level to avoid engine damages.
The Indicated Mean Effective Pressure (IMEP) and its coefficient of variation (COV) are accurately predicted by the LES as shown in Table 2.

Table 2: Comparison of the mean and COV of IMEP

	mean IMEP	COV of IMEP
Experiment	19.01 bars	2.6%
LES	19.12 bars	2.7%

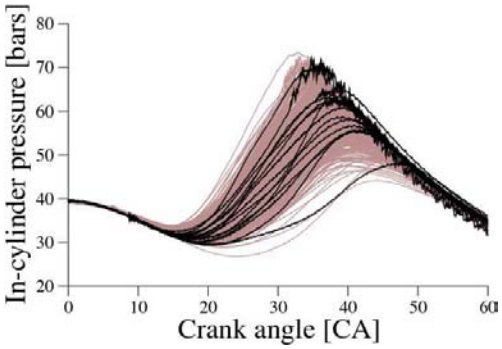


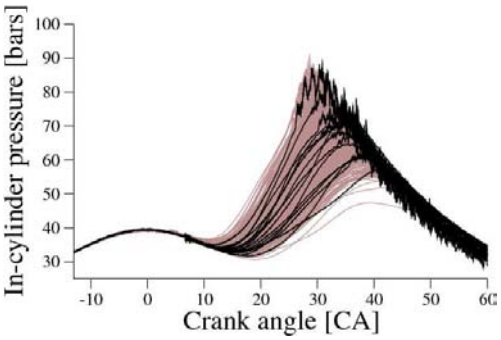
Figure 2: Local in-cylinder pressure evolution for LES cycles (black) and experimental envelope (brown) at +8 CA aTDC

The local LES in-cylinder pressure, shown in Fig. 2 for all simulated cycles, is monitored by a numerical probe set at the same location (in the cylinder head) as in the experiment. LES cycles are seen to be correctly distributed from the bottom to the top of the experimental envelope, confirming the ability of LES to naturally reproduce cycle to cycle fluctuations. As in the experiment, the fastest cycles, which correspond to the highest peak pressure, lead to knock, here identified by strong pressure fluctuations. This confirms qualitatively that the knock limit is well predicted by LES. A detailed knock analysis is performed in section 3.3.

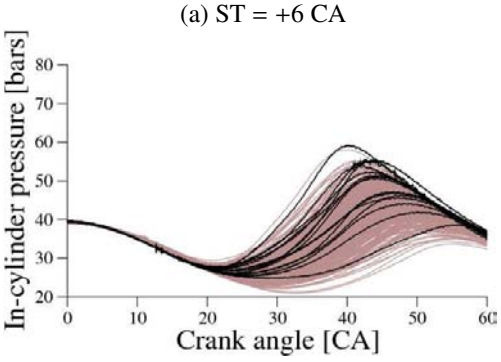
3.3. Knocking analysis on a spark timing sweep for the same operating point

In this section, comparisons are extended to an ST sweep which is carried out from -4 to +15 CA aTDC for the LES and only from +6 to +17 CA aTDC for the experiment (to prevent damage on the real engine).

Performing a multi-cycle simulation for each ST would represent 105 cycles (15 cycles per ST), which is quite expensive in the perspective of an industrial usage of LES. Considering that the flow and combustion of a given cycle have a low impact on the following cycle in SI 4-stroke engines [8] due to the uncoupling of intake and exhaust phases, we propose a specific strategy to limit the CPU time. As the different ST simulated have the same operating conditions (in terms of engine speed and load), we consider that the 15 LES consecutive cycles with the reference ST provide independent initial conditions (corresponding to fields of velocity, energy and mass fraction at ST CAD) for the other ST. This way, only the combustion phases of each cycle are simulated by just changing the ST. CPU time is then reduced by more than twice, which makes the ST variation much cheaper.



(a) ST = +6 CA



(b) ST = +12 CA

Figure 3: Local in-cylinder pressure evolution for several LES cycles (black) compared to the experimental envelope (brown) at ST=+6 CA (a) and +12 CA (b).

In addition to Fig. 2, the comparison of the local pressures for the ST of +6 CA and +12 CA are presented in Fig. 3. LES pressure results agree very well with experimental data whatever the ST, both in terms of shape and maximum pressure (which decreases when ST increases). The same conclusions are made for ST of +10

CA and +15 CA (not presented). To completely validate LES results, IMEP and COV for these two ST are depicted in Tab. 3. LES is able to reproduce the decrease of IMEP and the increase of COV when ST is delayed, with a good quantitative prediction.

Table 3: Comparison of mean and COV of IMEP for ST of +6 CA (left) and +12 CA (right)

	ST = +6 CA		ST = +12 CA	
	IMEP	COV	IMEP	COV
Exp.	19.88	2.3	17.06	3.4
LES	19.41	2.7	17.61	4.1

Like for the reference ST, both LES and experiment show that knock is observed only for the cycles presenting the fastest premixed flame combustion speed. This shows that knock is here essentially triggered by the history of fresh gases temperature and pressure during the combustion stroke: the cycles burning the fastest lead sooner to a higher pressure and fresh gases temperature which in turn leads to a reduction of the auto-ignition delay.

In the following, the 15 LES combustion cycles acquired at each ST are averaged in order to perform additional comparisons with the experiment. Although this figure is too small to get converged averages, it provides an indication sufficient to prove that experimental trends are well reproduced by the LES.

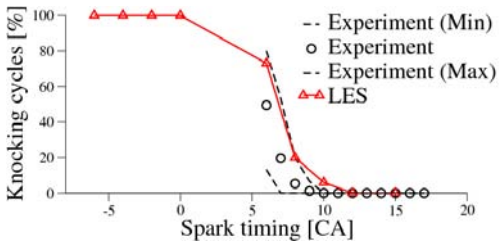


Figure 4: Percentage of knocking cycles for several ST

The number of knocking cycles is first compared in Fig. 4. At the largest ST, no knocking cycle is identified by both LES and experiment, whereas LES predicts that all cycles are knocking for the lowest ST (operating point unfeasible on a real engine bench). Between these extrema, LES very well captures the experimental increase of the percentage of knocking cycles when ST decreases, a result never achieved in RANS. In order to assess the error induced by the insufficient convergence of LES results, Fig. 4 also presents the envelope (minimum and maximum percentage of knocking cycles) obtained by considering a large number of randomly chosen 15 consecutive experimental cycles. As this envelope is quite narrow, it first confirms that 15 cycles are already quite representative of the 500 cycles for this working point. It can then be observed that the LE
of
wi

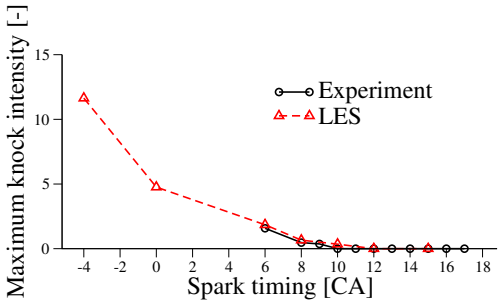


Figure 5: Maximum knocking intensity for several ST

This increase of the knock occurrence is also visible in Fig. 2 and 3, where no pressure fluctuations are visible for ST of +12 CA aTDC, whereas several cycles are knocking at ST=+8 CA, and even more at +6 CA aTDC.

The second important factor in knock analysis is the quantification of the maximum knocking intensity for the different ST. The intensity is here extracted from the local pressure signal for both LES and experiment. A filtering operation is performed to keep characteristic frequencies of knock typically in the range of [5kHz;9kHz]. The Fast Fourier Transform (FFT) of this filtered signal is then computed, and the maximum intensity corresponds to the maximum of the FFT envelope. Results, plotted in Fig. 5, show that the maximum intensities predicted by LES are in very good agreement with the experiment. For an ST up to +8 CA aTDC, no knocking cycles are predicted whereas for lower ST, the knocking intensity increases exponentially. In addition, LES allows simulating engine conditions not reachable by the real engine, like ST between -4 CA and 0 CA which show a very high, thus destructive, knocking intensity. These results demonstrate that the present LES are able to capture the correct amplitude of pressure oscillations generated by knock, thanks to the use of a compressible code, a high order numerical scheme and an accurate auto-ignition heat release rate model.

Finally, the mean CA knock onset plotted in Fig. 6 confirms the accuracy of the LES results. LES predicts an earlier onset CA when ST decreases which confirms

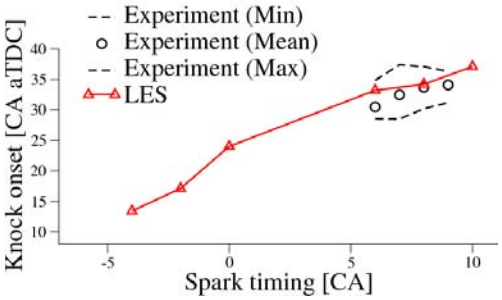
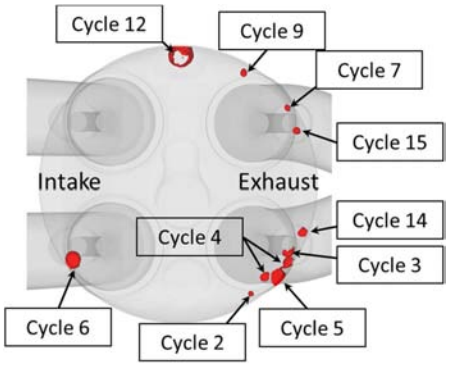
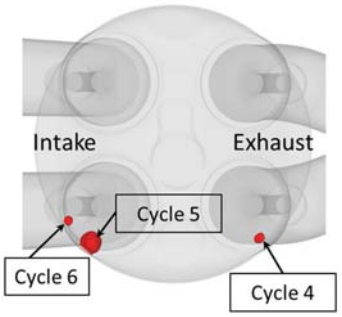


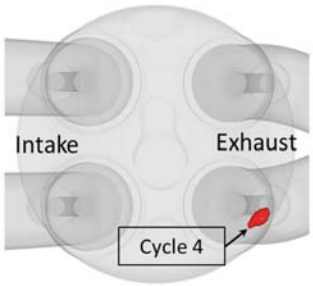
Figure 6: Mean knock onset CA aTDC at different ST



(a) ST = +6 CA



(b) ST = +8 CA



(c) ST = +10 CA

Figure 7: Bottom view of AI location onset thanks to iso-surfaces of progress variables c_{ai} for three ST: +6 CA (a), +8 CA (b) and +10 CA (c). Visualization are not at the same timing.

that the tabulated AI model predicts the ignition delay correctly whatever the pressure and temperature conditions. Like in Fig. 6 an experimental envelope based on 15 random cycles is computed. It can be observed again that this envelope is quite narrow and that the LES curve falls in this envelope, which further confirms the relatively good convergence achieved with only 15 cycles.

3.4. 3D analysis of knocking spots

Based on LES results only, a more qualitative 3D analysis is addressed here. Using an iso-surface for $\tilde{c}_{ai})(1 - \tilde{c}_{\Sigma}) = 0.9$, the initial AI location is shown in Fig. 7 for the knocking cycles at three different ST (+6 CA, +8 CA and +10 CA aTDC).

AI mainly starts in the half of the cylinder located under the exhaust valves, which is explained by their higher temperature of about 150 K compared to intake ones. The exhaust valves are commonly warmer, and LES wall temperatures are extracted from a detailed thermal model of the studied engine. At ST 6 and 8 CA aTDC, one (respectively two) cycles present an AI spot below the intake valves. Such a location has already been observed experimentally in the literature [20], and is explained by the larger residence time of fresh gases there (the flame tends to burn fresh gases more rapidly on the exhaust side due to the tumble motion). The randomness of AI spots location observed experimentally [20] from one cycle to another is also well captured by the LES. It is explained by the randomness of turbulence which leads to different temperature and pressure fields from one cycle to the other.

Fig. 8 represents the knock intensity correlated to the fuel mass percentage consumed by AI. Up to an AI intensity of 4.5, the increase of the pressure wave intensity is proportional to the fuel mass burned, which confirms that at first order the mass burned by auto-ignition is the main factor controlling knock intensity. For intensities larger than 4.5, an exponential increase is observed. This observation suggests that other factors might become important at large intensities. The AI location is probably such a factor, the coupling mechanism between the pressure wave and the AI heat release as suggested in [21–23] could be another factor. Such an analysis will be carried out in a future publication.

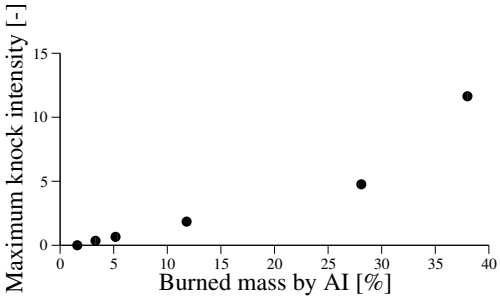


Figure 8: Maximum knock intensity correlated to the percentage of fuel mass burned in AI (each point corresponds to a different ST)

4. Conclusion

This paper addresses for the first time a quantitative analysis of knock using LES. An operating point of a downsized piston engine at high load and low speed is simulated using updated versions of ECFM-LES, ISSIM and TKI allowing a complete uncoupling of flame propagation and auto-ignition reaction rates. These models are first evaluated at the reference ST with 15 consecutive cycles acquired. Very good agreement with the experiment is obtained in terms of IMEP, mean and maximum pressure, combustion speed and cycle-to-cycle variations, showing that 15 LES cycles are already sufficient to cover the entire experimental envelope and to recover essential statistics. Looking at cycle to cycle local pressure evolutions, it is concluded that LES is able to predict the ST knock limit, here equal to +8 CA aTDC.

Comparisons are then extended to an ST sweep. Whatever the ST, LES cycles are again well distributed on the experimental envelopes. A quantitative knock analysis is then achieved applying the same analysis tools to experimental and LES pressure curves. Although statistical convergence of LES results can not be guaranteed due to the limited number of knocking cycles acquired, LES is found in very good agreement in terms of percentage of knocking cycles, intensity of knock and mean knock onset angle, whatever the ST. It is also shown that at first order, knock intensity is directly proportional to the fresh gases mass burned by auto-ignition as expected.

For the present operating point, it is observed that knock occurs for fast burning cycles, that is, when the pressure and unburned gases temperature increase substantially compared to slow burning cycles. The good prediction of knock statistics by LES can then be explained by the fact that i/ the frequency of fast burning cycles is well reproduced by LES, which is correlated to the good prediction of COV, which is itself correlated to the good sensitivity of the premixed flame model (ECFM-LES and ISSIM) to turbulence intensity fluctuations, and ii/ that the auto-ignition delay and reaction rate sensitivity to pressure and temperature variations are well reproduced by the TKI model.

Finally, auto-ignition spots locations are presented. It is observed that auto-ignition starts at random locations from one cycle to the other but that the spots are essentially located below the exhaust valves, and more seldom below the intake valves. It is inferred that the randomness of the ignition spot location could be partially responsible for the variation of knock intensity at the strongest knock intensities. Further comparisons will be performed in the future, focusing in particular on the possible coupling between the auto-ignition heat release and pressure waves. The present LES tool could also be used to assess super-knock occurrence probability under different operating points.

5. Acknowledgement

This work was granted access to the High Performance Computing (HPC) resources of CCRT under the allocation c2013-026139 made by GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif). The authors also acknowledge Benoit ENAUX from PSA Peugeot Citroën for fruitful discussions on LES engine calculations.

References

[1] F.-A. Lafossas, M. Castagne, J. P. Dumas, S. Henriot, SAE Technical Paper, 2002-01-2701, 2002.

[2] E. Corti, C. Forte, Vol. 2, SAE Int. J. Engines, 2009-24-0019, 2009, pp. 368–380.

[3] D. Linse, A. Kleemann, C. Hasse, *Combust. Flame* In press, 2013.

[4] G. Lecocq, S. Richard, J.-B. Michel, L. Vervisch, *Proc. Combust. Inst.* 33 (2011) 3105 – 3114.

[5] S. Fontanesi, S. Paltrinieri, A. D'Adamo, G. Cantore, C. Rutland, Vol. 6, SAE Int. J. Fuels Lubr., 2013-01-1082, 2013, pp. 98–118.

[6] S. Richard, O. Colin, O. Vermorel, A. Benkenida, C. Angelberger, D. Veynante, *Proc. Combust. Inst.* 31 (2007) 3059 – 3066.

[7] O. Colin, A. Pires da Cruz, S. Jay, *Proc. Combust. Inst.* 30 (2005) 2649–2656.

[8] O. Vermorel, S. Richard, O. Colin, C. Angelberger, A. Benkenida, D. Veynante, *Combust. Flame* 156 (8) (2009) 1525 – 1541.

[9] O. Colin, K. Truffin, *Proc. Combust. Inst.* 33 (2011) 3097 – 3104.

[10] O. Colin, A. Benkenida, *Combust. Flame* 134 (3) (2003) 207–227.

[11] O. Colin, A. P. da Cruz, S. Jay, *Proc. Combust. Inst.* 30 (2005) 2649–2656.

[12] V. Knop, J.-B. Michel, O. Colin, *Applied Energy* 88 (2011) 4968–4979.
[13] F. Charlette, C. Meneveau, D. Veynante, *Combust. Flame* 131 (1-2) (2002) 159 – 180.
[14] V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, T. Poinsot, *J. Comp. Phys.* 202 (2005) 710 – 736.
[15] J. Smagorinsky, *Monthly Weather Review* 91 (3) (1963) 99–164.
[16] A. Misdariis, A. Robert, O. Vermorel, S. Richard, T. Poinsot, *Oil Gas Sci. Technol., In press, 2013*.
[17] P. Sagaut, *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*, New-York & Berlin : Springer-Verlag, 1998.
[18] S. Jerzembeck, N. Peters, P. Pepiot-Desjardins, H. Pitsch, *Combust. Flame* 156 (2) (2009) 292–301.
[19] M. Metghalki, J. Keck, *Combust. Flame* 48 (1982) 191–210.
[20] A. Hettinger, A. Kulzer, U. Spicher, Int. Symp. Combust. Diag. (9), Baden-baden, 2010.
[21] E. Bradley, C. Morley, SAE Technical Paper, 2002-01-2868, 2002.
[22] J. Rudloff, J.-M. Zaccardi, S. Richard, J. Anderlohr, *Proc. Combust. Inst.* 34 (2013) 2959 – 2967.
[23] N. Peters, B. Kerschgens, G. Paczko, Vol. 6, SAE Int. J. Engines, 2013-01-1109, 2013, pp. 953–967.



ANNEXE

B

Mise en place d'un calcul de probabilités d'AI en LES

L'objectif est ici de présenter une nouvelle méthode pour le calcul de probabilités d'AI, celle-ci n'ayant pas pu être testée durant cette thèse par manque de temps. A la manière de travaux basés sur des calculs RANS [83], une probabilité d'AI est définie permettant de mesurer la proximité au rumble à partir de calculs LES.

Les différences essentielles avec l'analyse réalisée en RANS par [83] sont les suivantes :

- ✓ en RANS, la fluctuation locale de l'avancement d'AI est estimée à partir d'une équation de la variance de c. Etant donné le caractère stochastique de l'AI, la capacité d'une telle équation à prédire les fluctuations de c_{ai} est incertaine, ne serait-ce que parce que la prédiction des fluctuations de la température de gaz frais dont dépend la fluctuation de c_{ai} est elle même extrêmement délicate à obtenir en RANS.
- ✓ le dégagement de chaleur en AI n'est pas pris en compte. En effet, ces calculs ne considèrent que le délai d'AI ($c_{ai} = 1$ signifie dans ce cas que le délai est atteint). Comme il a été montré précédemment sur les LES de cliquetis, cette hypothèse et particulièrement restrictive pour l'étude du cliquetis intense qui montre un couplage entre divers spots d'AI successifs. Cette limitation est par contre moins pénalisante dans le cas du rumble du fait que le délai n'étant en pratique jamais atteint dans les LES (du fait d'un nombre de cycles calculés trop faible), le dégagement de chaleur n'entre pas en compte.

En utilisant les modèles ECFM-LES et TKI-LES, la flamme de prémélange est suivie grâce à la variable d'avancement c_{Σ}. L'AI est quant à elle suivie grâce à une variable d'avancement notée c_{ai}. L'ensemble des calculs de probabilités suivants vont être basés sur ces deux variables d'avancement.



Soit P la probabilité moyenne de sous-maille d'avoir une valeur c_Σ et c_{ai} en un point donné. Elle s'exprime :

$$P(c_{ai}, c_\Sigma) = P(c_{ai}|c_\Sigma)P(c_\Sigma) \tag{B.1}$$

Si on considère les variables c_{ai} et c_Σ indépendantes à l'ordre 1, ce qui est justifié par le découplage total présenté dans ces travaux, on peut écrire :

$$P(c_{ai}, c_\Sigma) = P(c_{ai})P(c_\Sigma) \tag{B.2}$$

Une probabilité globale notée I_p peut alors être calculée en tout point de la chambre de combustion en intégrant la probabilité locale P. La probabilité I_p s'exprime alors :

$$I_p = \int\limits_{\substack{c_{ai}\geq\varepsilon_{ai}\\ c_\Sigma\leq\varepsilon_\Sigma}} P(c_{ai}, c_\Sigma)dc_{ai}dc_\Sigma \ = I_p^{ai} I_p^\Sigma \tag{B.3}$$

avec

$$I_p^{ai} = \int\limits_{c_{ai}\geq\varepsilon_{ai}} P_{ai}(c_{ai})dc_{ai} \tag{B.4}$$

$$I_p^\Sigma = \int\limits_{c_\Sigma\leq\varepsilon_\Sigma} P_\Sigma(c_\Sigma)dc_\Sigma \tag{B.5}$$

Cette définition de I_p est basée sur le fait qu'en 1 point, une AI peut se déclencher si la masse de gaz frais à oxider est suffisament importante ($c_\Sigma \leq \varepsilon_\Sigma$) et si l'avancement d'AI est suffisamment proche de l'instant auquel survient le dégagement de chaleur ($c_{ai} \geq \varepsilon_{ai}$).
Les valeurs ε_{ai} et ε_Σ sont alors des constantes à fournir comme limites inférieure et supérieure des intégrales précédentes. Leur ordre de grandeur est néanmoins connu : ε_Σ ne doit pas être négligeable devant 1 (typiquement de l'ordre de 0.1 au moins) et ε_{ai} doit être proche de l'avancement en AI caractéristique de l'emballement des réactions, c'est-à-dire de l'ordre de 0.01 à 0.1.
Cet outil ne peut ainsi pas prétendre être prédictif en termes de fréquence de rumble. Par contre, il devrait permettre, moyennant des valeurs de ε_{ai} et ε_Σ raisonnables, de dégager des tendances entre différents points de fonctionnement ou pour un même point de fonctionnement entre différentes valeurs d'un paramètre infuençant l'AI. Disposer d'un tel outil constituerait déjà une avancée importante.

Pour aller plus loin, il est à présent nécessaire d'estimer les deux intégrales I_p^{ai} et I_p^Σ.

Soit $P_\Sigma^k(c_\Sigma)$ la probabilité pour le cycle k donnée par la PDF bimodale de l'approche ECFM-LES :

$$P_\Sigma^k(c_\Sigma) = (1 - \tilde{c}_\Sigma)\delta(c_\Sigma) + \tilde{c}_\Sigma\delta(1 - c_\Sigma) \tag{B.6}$$

On obtient alors :

$$(I_P^\Sigma)^k = 1 - \tilde{c}_\Sigma \tag{B.7}$$

On en déduit l'expression de I_p^Σ comme la moyenne statistique sur l'ensemble de N_{cycl} cycles simulés.



$$I_p^{\Sigma} = \frac{\sum_{k=1}^{N_{cycl}} (I_p^{\Sigma})^k}{\sum_{k=1}^{N_{cycl}} k} = 1 - < \tilde{c}_{\Sigma} > \tag{B.8}$$

où < > représente la moyenne statistique sur l'ensemble de cycles.

On obtient ainsi l'expression de la probabilité I_p

$$I_p = (1 - < \tilde{c}_{\Sigma} >) I_p^{ai} \tag{B.9}$$

Le calcul de I_p^{ai} (Eq.B.4) nécessite le calcul de la probabilité $P_{ai}(c_{ai})$. La moyenne des cycles LES permet alors de fournir une valeur moyenne de c_{ai} en tout point, ainsi que la variance associée. Une hypothèse est cependant effectuée en choisissant comme fonction de répartition présumée, une Probability Density Function (PDF) de forme de gaussienne tronquée. Intégrée grâce à l'équation B.4, elle permet le calcul de I_p^{ai}.

A ce stade, une probabilité en tout point du domaine de calcul est donc disponible. Trois méthodes différentes d'exploitation sont alors envisagées pour déterminer la probabilité d'AI :

- ✓ une première méthode pourrait être de prendre la probabilité maximale de l'ensemble de tous les points du domaine. La probabilité serait alors $P_{ai}(t) = max(P_{ai}(x,t), x \in \Omega)$ et t l'instant où elle serait atteinte correspondrait à l'angle le plus probable de départ du rumble. Cependant, cette méthode ne permet pas de s'affranchir d'une éventuelle erreur numérique qui augmenterait localement cette probabilité.

- ✓ une deuxième méthode s'inspire des travaux de Linse & al. [83].
  Soit Ω_{Ip} les points du domaine de calcul Ω dont la probabilité est supérieure à une valeur ε_{P_i} en fonction du temps. Ce domaine est ainsi défini par :

  $$\Omega_{I_p}(t) = \{x | I_p(x,t) \geq \varepsilon_{P_i}\} \tag{B.10}$$

  On peut alors définir la fraction massique de gaz qui peut partir en AI avec une probabilité supérieur à la constante ε_{P_i} fixée par l'utilisateur. Cette fraction est définie comme :

  $$Y_{I_p^0}(t) = \frac{\int_{\Omega_{I_p}} < \bar{\rho} > (1 - < \tilde{c}_{\Sigma} >) dV}{\int_{\Omega} < \bar{\rho} > dV} \tag{B.11}$$

  En traçant la valeur de Y_{I_p} au cours du temps comme illustré par la figure B.1, il est possible de déterminer l'angle vilebrequin correspondant à la fraction massique maximale susceptible de partir en AI (avec une probabilité ε_{P_i}). On détermine ainsi l'instant dans le cycle où la probabilité d'AI est la plus forte.
  Cette méthode est certainement plus robuste que la première, par contre elle ne donne pas accès à la probabilité de rumble.



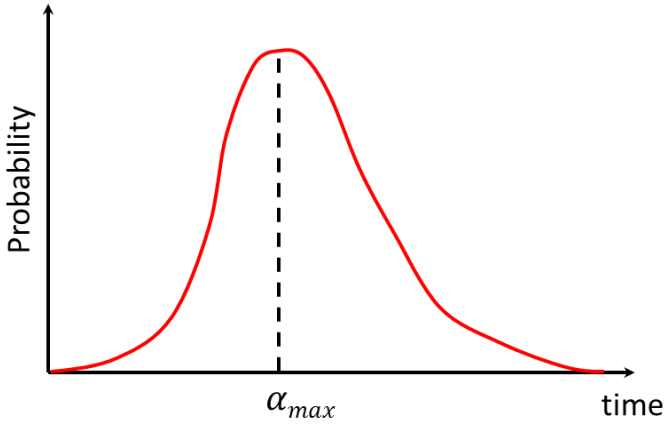


FIG. B.1: Evolution de la fraction massique Y_{I_p} de gaz ayant une probabilité supérieure à la valeur ε_{P_i} de partir en AI.

✓ Pour finir, une troisième exploitation de la probabilité d'AI est proposée ici. Soit $P_2(I_p, t)$ la fraction massique moyenne de gaz frais (sur l'ensemble des cycles) dont la probabilité d'AI est I_p. On définit alors $P_2(I_p)$ pour la probabilité I_p^0 comme :

$$P_2(I_p^0, t) = \frac{\int\limits_{I_p^0-\varepsilon<I_p<I_p^0+\varepsilon} < \bar{\rho} > (1-\tilde{c}_\Sigma)dV}{\int\limits_{\Omega} \bar{\rho}(1-\tilde{c}_\Sigma)dV} \tag{B.12}$$

La valeur I_p^{max} peut alors être définie de façon à ce que l'intégrale de I_p^{max} à 1 de $P_2(I_p)$ soit égale à une fraction massique de gaz frais ε_{gf} définie par l'utilisateur.

$$\text{Soit } I_p^{max}(t) = \left\{ I_p | \int_{I_p^{max}}^{1} P_2(I_p, t) dI_p = \varepsilon_{gf} \right\} \tag{B.13}$$

La figure B.2 schématise ainsi la répartition de la probabilité I_p pour tous les points du maillage à un instant t. Ainsi en fonction de la constante ε_{gf} définie par l'utilisateur (et correspondant à l'aire en rouge sur cette figure), une valeur différente de I_p^{max} est déterminée.
Comme pour la méthode 2 (Fig. B.1), on peut ainsi suivre l'évolution de cette probabilité au cours du temps, et déterminer le degré vilebrequin le plus proche du préallumage.

N'ayant pas pu être testées, aucune des deux dernières méthodes ne peut a priori être considérée comme plus précise. Une application sur une moyenne de cycles LES sera donc effectuée à l'avenir, avec comme principal avantage de se baser sur la variable c_{ai} qui est issue de grandeurs résolues comme les gradients de température.



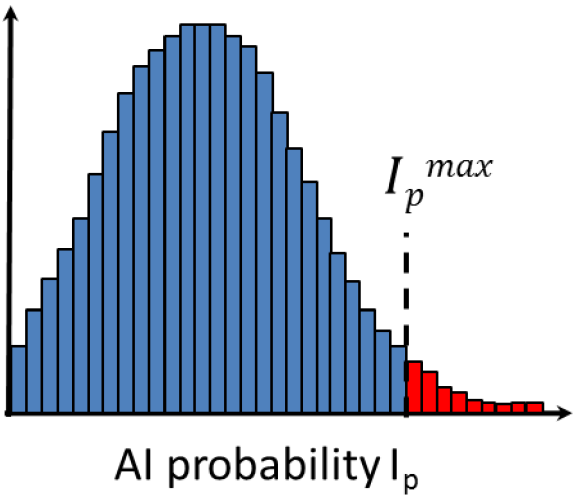


FIG. B.2: Histogramme des points du maillage en fonction de leur probabilité Ip.

