

Modélisation stochastique de l'interaction chimie / turbulence de la combustion homogène Diesel : effets du temps caractéristique de la turbulence

Fadila MAROTEAUX

Laboratoire d'Ingénierie des Systèmes de Versailles, Université de Versailles Saint Quentin en Yvelines
10-12, avenue de l'Europe, 78140 Vélizy Villacoublay, France
(auteur correspondant : fadila.maroteaux@iut-velizy.uvsq.fr)

Résumé - Cet article décrit une approche stochastique pour modéliser la combustion homogène Diesel et plus particulièrement l'interaction chimie/turbulence. Le micromélange est décrit par un modèle IEM (Interaction by Exchange with the Mean). L'évolution temporelle du temps caractéristique de la turbulence qui représente l'objectif de cet article est modélisée par un modèle $k-\varepsilon$. Les résultats ont permis de montrer qu'un temps caractéristique de la turbulence considéré variable au cours du cycle permet de prédire précisément les profils de pression dans la chambre de combustion en comparaison avec les mesures expérimentales.

1. Introduction

La volonté de réduire les émissions de CO_2 issues du transport automobile conduit depuis plusieurs années à une part grandissante des ventes de véhicules à moteur diesel, dont un des avantages par rapport aux moteurs à allumage commandé est le niveau nettement inférieur d'émissions de ce gaz contribuant à l'effet de serre. En revanche le traitement des émissions polluantes (NO_x et particules) de ces moteurs est plus difficile et nécessite des systèmes de post-traitement complexes et coûteux. C'est pourquoi les recherches se sont orientées depuis une décennie vers une remise en cause du processus de combustion diesel, permettant une réduction drastique des émissions à la source. Ainsi la combustion homogène par auto-inflammation (aussi appelée HCCI, Homogeneous Charge Compression Ignition) permet de réduire les températures de combustion, traditionnellement élevées, et donc la production d'oxydes d'azote, tandis que l'homogénéité du mélange permet une réduction des émissions de particules.

Cependant, les études théoriques et expérimentales publiées dans la littérature ont montré que le mélange réactif dans la chambre de combustion est loin d'être parfaitement homogène et présente des hétérogénéités en composition et température [1-3]. Ainsi la progression de la combustion est contrôlée à la fois par la cinétique chimique et par l'intensité de la turbulence. Pour modéliser ce mode de combustion en prenant en compte l'interaction entre la chimie et la turbulence avec des temps de calculs raisonnables, l'approche stochastique semble plus prometteuse que la modélisation tridimensionnelle. Cette étude se situe dans ce contexte et décrit un modèle stochastique basé sur un modèle IEM (Interaction by Exchange with the Mean) pour décrire le micromélange. Le fluide réactif présent dans la chambre de combustion est représenté par un ensemble de particules. L'évolution de chaque particule est déterminée par la variation du terme réactif et du terme de mélange caractérisé par un temps caractéristique de la turbulence, généralement considéré comme un paramètre du modèle dans la littérature. Le terme réactif est décrit par un mécanisme réactionnel réduit du n-heptane, développé dans notre précédente étude, comprenant 25 espèces et 26 réactions élémentaires [4]. Ainsi, à partir des conditions initiales moyennes correspondant au point de

fonctionnement du moteur, les tirages aléatoires pour chaque particule en termes de masse et de température ont été calculés à partir d'une loi de distribution normale.

Cette étude est axée sur la modélisation du temps caractéristique de la turbulence afin d'inclure les phénomènes physiques mis en jeu. Cet article résume le modèle stochastique complet ou la fonction de densité de probabilité (PDF) est supposée homogène dans l'espace. La PDF inclut les effets du mouvement du piston, des échanges de chaleur par convection aux parois, le mélange turbulent et le dégagement d'énergie par la combustion. Le temps caractéristique de la turbulence est décrit à travers l'énergie cinétique turbulente et son taux de dissipation. Ainsi, un modèle de turbulence (k-ε) basé sur le principe de la cascade d'énergie appliqué à un cycle compression détente est développé, afin de modéliser l'évolution du temps caractéristique de la turbulence au cours du temps.

2. Description du modèle

2.1. Formulation générale

Le modèle utilisé dans cette étude est basé sur le principe d'un réacteur stochastique similaire au réacteur agité pour modéliser le processus de la combustion HCCI. Ce modèle suppose une homogénéité statistique du mélange dans le réacteur. Le mélange réactif évolue suivant un cycle de compression-combustion-détente dans la chambre de combustion. Ainsi, les fractions massiques de chaque espèce contenues dans le mélange et la température du mélange réactif sont des variables aléatoires représentées par une fonction de densité de probabilité (PDF). L'équation du réacteur stochastique est obtenue à partir de l'équation de transport de la PDF dont le processus stochastique est déterminé par le système d'équations différentielles suivant :

$$\frac{d\psi_i(t)}{dt} = -H_i(\psi(t)) - C[\psi_i(t) - E(\psi_i(t))] \quad (1)$$

où l'état initial $\psi(0)$ est distribué suivant F_0 (fonction de densité de probabilité), et où :

- ψ représente les variables aléatoires du système comme la masse des espèces chimiques (ici 25 espèces) et la température T (i.e. $\psi = \psi(\psi_1, \dots, \psi_s, \psi_{s+1}) = (m_1, \dots, m_s, T)$).
- $E(\psi_i(t))$ représente l'espérance de la variable aléatoire $\psi_i(t)$, (valeur moyenne).
- C est le paramètre qui mesure l'intensité du micromélange.

Le premier terme de droite de l'équation (1) décrit les effets des réactions chimiques, la variation du volume de la chambre de combustion et les échanges de chaleur aux parois par convection. Le second terme de droite de cette même équation décrit le micromélange et correspond au modèle IEM. Rappelons que ce dernier est un modèle déterministe dont l'un des avantages et sa facilité de mise en œuvre et son faible coût en terme de temps de calculs. Ce modèle est basé sur le principe que la valeur du scalaire approche la valeur moyenne sur la totalité du volume de la chambre avec un temps caractéristique τ_t . Ce temps caractéristique est introduit dans le paramètre C qui s'écrit :

$$C = \frac{C_\phi}{\tau_t} \quad (2)$$

où : C_ϕ est une constante non universelle prise égale à 2 [5] dans cette étude et τ_t est le temps caractéristique de la turbulence. Le terme H_i dans l'équation (1) décrit l'évolution due au mécanisme réactionnel, la variation du volume et les pertes de chaleur aux parois. Avec

l'hypothèse que les pertes de chaleur s'effectuent uniquement par convection et que le mélange réactif est assimilé à un gaz parfait, ce terme s'écrit :

$$H_i = VM_i \dot{\alpha}_i \quad i=1,\dots,S \quad (3)$$

$$H_{S+1} = -\frac{1}{c_v} \left(\sum_{i=1}^S \left(h_i(T) - \frac{RT}{M_i} \right) \frac{M_i}{\rho} \dot{\alpha}_i + \frac{RT}{M} \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} \right) - \frac{h_g A}{m c_v} (T - T_w) \quad (4)$$

Les détails du calcul du taux de production ω_i de l'espèce i introduit dans l'équation (3) sont donnés dans la référence [4].

Avec : M_i est la masse molaire de l'espèce i , M est la masse molaire du mélange, m est la masse totale dans la chambre de combustion (cylindre), ρ est la masse volumique du mélange, A est la surface d'échange de chaleur fonction du temps, V est le volume de la chambre de combustion fonction du temps [6], c_v est la chaleur spécifique à volume constant du mélange, R est la constante universelle du gaz parfait, T_w est la température des parois, T est la température du mélange, h_i est l'enthalpie spécifique de l'espèce i , h_g est le coefficient d'échange convectif (les détails du calcul de ce coefficient sont donnés dans la [6].

Pour générer des trajectoires du processus stochastique, l'espérance est approchée par :

$$E(\psi_i(t)) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \psi_i^k(t) \quad (5)$$

où N est le nombre de particules stochastiques. Ainsi, chaque particule a une température et une composition avec 25 espèces et est par conséquent reliée à une particule fluide. Le mélange réactif dans la chambre de combustion est ainsi représenté par un ensemble de N particules. Chaque particule évolue suivant le système d'équations différentielles (équation (1)). Le système étant de grande dimension, une méthode de splitting pour découpler la partie réactive et la partie mélange a été utilisée. Son intérêt est de permettre le passage d'une équation complexe à un système d'équations simples, pour un coût en terme de temps de calcul ne dépendant que du fractionnement du pas de temps. De plus, cette méthode permet le calcul parallèle, chaque système pouvant être résolu indépendamment des autres.

2.2. Le temps caractéristique de la turbulence

Le temps caractéristique de la turbulence introduit dans l'équation (2) a été relié aux caractéristiques de l'écoulement turbulent. Ainsi, ce temps est directement fonction de l'énergie cinétique turbulente k et de son taux de dissipation ε par :

$$\tau_t = \frac{k}{\varepsilon} \quad (6)$$

A chaque instant du cycle, la vitesse moyenne U et l'intensité de la turbulence u' sont obtenues à partir de l'énergie cinétique moyenne K et de l'énergie cinétique turbulente k :

$$K = \frac{1}{2} U^2 \quad \text{et} \quad k = \frac{3}{2} u'^2 \quad (7)$$

Le modèle turbulent utilisé dans cette étude est basé sur la cascade d'énergie 0D appliqué au cycle compression-détente [7]. Les équations décrivant cette cascade sont :

$$\frac{dK}{dt} = -P_p \quad (8)$$

$$\frac{dk}{dt} = P_p - \varepsilon + P_{amp} \quad (9)$$

Les équations ci-dessus sont écrites pour un système thermodynamique fermé (soupapes d'admission et d'échappement fermées). On notera que celles-ci ont la forme classique des équations de transport ayant un terme instationnaire et un terme source/puits. L'énergie cinétique moyenne (équation (8)) décrit l'évolution de l'énergie cinétique moyenne initiale, qui correspond au point de départ de la cascade d'énergie. En effet, l'énergie cinétique moyenne au début de la phase de compression correspond à l'image de l'écoulement moyen dans le cylindre après la fermeture des soupapes. Au cours du temps cette énergie est transformée en énergie cinétique turbulente, dont l'évolution est décrite par l'équation (9). Cette énergie cinétique turbulente est alors transformée en chaleur au travers de la dissipation visqueuse.

On observe à partir de l'équation (8) d'une part que l'énergie cinétique moyenne ne dépend que du terme de production P_p et d'autre part qu'elle ne peut que décroître à partir de sa valeur initiale, étant donné qu'elle est transformée en énergie cinétique turbulente (équation (9)). L'évolution de l'énergie cinétique turbulente (équation (9)) inclut le terme de production, le terme d'amplification P_{amp} dû à la déformation rapide que subit le système lors de la phase de compression et la phase de combustion, et le terme de dissipation ε par unité de masse. En supposant que la production de la turbulence dans le cylindre est similaire à celle de la couche limite d'une plaque plane, le terme de production s'écrit :

$$P_p = \nu_t c_\beta \left(\frac{U}{L} \right)^2 \quad (10)$$

Par ailleurs, lorsque la turbulence est considérée homogène et isotrope le taux de dissipation visqueuse est relié à u' et s'exprime suivant :

$$\varepsilon = \frac{u'^3}{l} = \frac{1}{l} \left(\frac{2k}{3} \right)^{3/2} \quad (11)$$

où la viscosité turbulente est exprimée par $\nu_t = c_\mu (k^2 / \varepsilon)$, c_β est une constante prise égale à 1 dans cette étude. L et l représentent respectivement l'échelle de longueur de la géométrie du problème et l'échelle des gros tourbillons. Ces longueurs sont toutes deux identifiées à partir des grandes échelles de la turbulence [7] et sont données par :

$$l = L = V / (\pi B^2 / 4) \quad (12)$$

avec la restriction sur l'échelle de longueur : $l = \min \left\{ \frac{4V}{\pi B^2}, \frac{B}{2} \right\}$

où B est l'alésage. Durant les phases de compression et combustion l'énergie cinétique turbulente est amplifiée par la déformation rapide du fluide dans le cylindre soumis à une variation rapide de sa masse volumique. En supposant que la conservation de la masse et du moment angulaire peut être appliquée aux gros tourbillons durant cette rapide distorsion, le terme d'amplification introduit dans l'équation (9) s'exprime suivant :

$$P_{amp} = -\frac{2}{3} k \frac{\dot{V}}{V} \quad (13)$$

En utilisant les relations 10, 11 et 13 les équations (8) et (9) sont réécrites sous la forme :

$$\frac{dK}{dt} = -2c_\mu c_\beta \frac{K}{L^2} \left(\frac{k^2}{\varepsilon} \right) \quad (14)$$

$$\frac{dk}{dt} = 2c_\mu c_\beta \frac{K}{L^2} \left(\frac{k^2}{\varepsilon} \right) - \frac{2}{3} k \frac{\dot{V}}{V} - \varepsilon \quad (15)$$

Les conditions initiales pour résoudre les équations ci-dessus ont été fixées en fonction de la vitesse moyenne du piston \bar{S}_p . Dans les applications relevant du moteur à combustion interne et principalement lorsqu'aucune description spatiale n'est prise en compte pour modéliser le processus, la vitesse moyenne du piston est plus appropriée que la vitesse instantanée [6]. Rappelons que la vitesse moyenne du piston reflète le mouvement moyen du fluide sur l'ensemble du cycle, de plus elle ne dépend que la vitesse de rotation du moteur et de sa géométrie. Les conditions initiales sont exprimées comme suit :

$$\begin{cases} K(0) = \frac{1}{2} \bar{S}_p^2 \\ k(0) = \frac{3}{2} \bar{S}_p^2 \end{cases} \quad (16)$$

La vitesse moyenne du piston est calculée à partir $\bar{S}_p = 2L_{str}N_{speed}$. Où L_{str} est la longueur de la bielle donnée dans le tableau 1 et N_{speed} est la vitesse de rotation du moteur.

2.3. Processus stochastiques : conditions initiales

A partir des conditions initiales moyennes (masse et température correspondant au point de fonctionnement du moteur), pour chaque particule stochastique, une masse aléatoire et une température aléatoire sont générées suivant une distribution normale. De plus, chaque particule contient 25 espèces et chaque espèce a une masse (i.e. $m_s(0) > 0$), générée également lors du tirage aléatoire. On notera qu'à l'instant initial, le mélange est composé d'air et des espèces provenant de l'EGR (Exhaust Gas Recirculation). A cet effet, chaque particule initiale a une masse totale contenant 4 espèces avec leur propre masse : N_2 , O_2 , H_2O et CO_2 . L'injection du carburant s'effectue après le début de la phase de compression, ainsi le carburant est introduit dans la phase de simulation à $t > 0$. Notons que durant l'injection le carburant est distribué pour chaque particule stochastique également suivant la loi normale. La géométrie du moteur est donné dans le tableau 1.

Une première étude paramétrique [8] incluant un nombre de particules variant de 50 à 10^4 et prenant en compte une large gamme de points de fonctionnement a montré qu'un nombre de particules égal à 200 représente un bon compromis entre la précision des résultats et les temps de calculs. Ce nombre de 200 particules a été obtenu lorsque la distribution a été limitée en terme de gradients initiaux (masse et température). Nos résultats diffèrent des travaux d'Amit Bhave et al [9], qui ont trouvé qu'un nombre de 125 particules était suffisant. On notera que ces auteurs n'ont pas limité leur distribution, et qu'à comparaison égale un minimum de 500 particules est requis pour obtenir le même niveau de précision lorsqu'aucune limitation n'est appliquée à la distribution.

3. Résultats

Les résultats ont été obtenus avec des conditions initiales moyennes mesurées sur banc d'essais moteur. Les essais expérimentaux ont été effectués sur un moteur Renault

monocylindre fonctionnant en mode HCCI. Les caractéristiques géométriques du moteur sont données dans le tableau 1. Le moteur était équipé d'un régulateur du taux d'EGR, évalué à partir de la mesure de la concentration de CO₂ à l'admission et l'échappement. La pression dans la chambre de combustion était mesurée par un capteur monté sur la culasse.

Dans le modèle de turbulence (équations (14) et (15)) nous avons introduit la grande échelle de la turbulence l qui est limitée en dimension par la géométrie du cylindre. La figure 1 montre l'évolution du rapport grande échelle de la turbulence / alésage en fonction du degré de vilebrequin (CAD). Le modèle prédit que la taille des gros tourbillons est donnée par la distance instantanée entre la culasse et la tête du piston. Quand cette distance devient supérieure au demi alésage, celle-ci est prise égale à cette dernière valeur. La figure 1 montre que les valeurs obtenues sont en accord avec les études publiées dans la littérature [6,7], qui montrent que la taille des gros tourbillons au point mort haut (0 CAD sur la figure 1) est de l'ordre de 2 mm à 5 mm.

Les évolutions de l'énergie cinétique turbulente et de son taux de dissipation sont tracées respectivement sur les figures 2 et 3, lorsque la vitesse de rotation du moteur est égale à 2000 tr/mn. Pour ce point de fonctionnement la pression d'admission est égale à 2.04 bar et la température d'admission égale à 387 K. Une seule injection est effectuée à 80 degré de vilebrequin (DV) avant le point mort haut (PMH), avec une masse injectée égale à 16.4 mg/cycle et un taux d'EGR égal à 55%. Tant que la soupape d'admission est ouverte (depuis 180 DV jusqu'à 166 DV avant le PMH), la variation de l'énergie cinétique turbulente au cours du cycle (figure 2) décroît principalement à cause du niveau faible de la pression dans le cylindre, ce qui entraîne une faible amplification de la turbulence. La figure 3 montre quant à elle que durant cette même période le taux de dissipation reste constant, cependant sa contribution au phénomène de dissipation reste effective. On observe sur ces deux figures durant les phases de compression et de combustion, une importante amplification de la turbulence due aux déformations rapides induites par la compression des gaz. Par conséquent comme le montre la figure 2, l'énergie cinétique turbulente atteint un niveau maximum au PMH et décroît par la suite durant la phase de détente. Le taux de dissipation présente les mêmes tendances (figure 3). Cependant, comme le montre la figure 4, le temps caractéristique de la turbulence décroît, ce qui est dû au fait que le taux de dissipation est plus élevé que la production de l'énergie cinétique turbulente au cours des phases de compression et combustion. Cette même figure montre que ce temps caractéristique de la turbulence augmente durant la phase de détente, ce qui s'explique principalement par la diminution rapide du taux de dissipation observé sur la figure 3.

Taux de compression	11.68
Alésage	6.8075 cm
Demie-course	3.95 cm
Longueur bielle	13.265 cm

Tableau 1 : caractéristiques géométriques du moteur

L'objectif principal de ce travail est d'introduire une évolution temporelle au cours du cycle du temps caractéristique de la turbulence, celui-ci contrôlant l'intensité du mélange au travers du paramètre C (équation 2). Les études publiées dans la littérature ne prennent pas en compte la variation de temps caractéristique de la turbulence et considèrent le paramètre C comme une constante du modèle IEM. La figure 5 reproduit la comparaison de l'évolution de la pression au cours du cycle pour le même point de fonctionnement que ci-dessus. Cette figure montre une comparaison entre les différents profils de pression au cours du cycle : mesure expérimentale, τ_t constant (égal à 0.1 s, valeur qui donne le meilleur ajustement avec

les valeurs expérimentales) et τ_t variable. On observe sur cette figure que le calcul de la pression cylindre avec un temps caractéristique de la turbulence variable reproduit parfaitement le profil de la pression expérimentale. Lorsque le temps caractéristique de la turbulence est maintenu constant, on observe que le délai d'auto-inflammation est avancé induisant une pression cylindre plus élevée, ce phénomène est dû principalement au processus du micromélange.

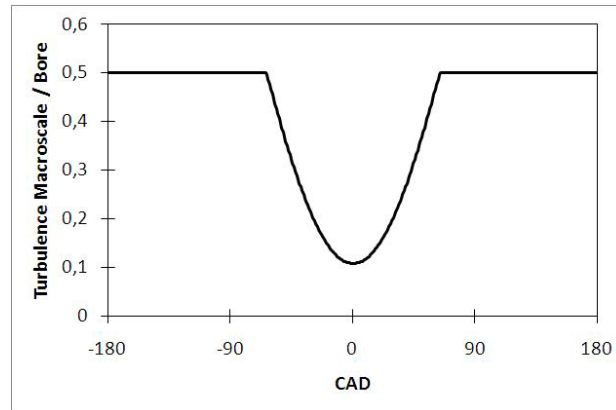


Figure 1 : Evolution de la macro-échelle de la turbulence par rapport à l'alésage.

4. Conclusion

Un modèle stochastique basé sur l'équation de transport de la PDF a été développé. Le micromélange est décrit par un modèle IEM, où l'intensité du mélange est contrôlée par un temps caractéristique de la turbulence. A cet effet, un modèle $k-\varepsilon$ basé sur la cascade d'énergie a été développé pour modéliser ce temps caractéristique de la turbulence. Les tirages aléatoires de la masse et de la température pour chaque espèce et chaque particule ont été calculés par une loi de distribution normale. Le terme réactif a été modélisé par un mécanisme réactionnel réduit développé précédemment.

Les résultats ont montré que les profils de l'énergie cinétique ont une allure très réaliste : augmentation de cette grandeur durant les phases de compression-combustion suivie d'une diminution de cette énergie cinétique. Le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente présente les mêmes tendances. Cependant, les résultats ont montré que ce taux de dissipation était supérieur au taux de production de l'énergie cinétique turbulente durant les périodes de compression-combustion, ceci ayant pour conséquence directe une diminution du temps caractéristique de la turbulence durant ces mêmes périodes. Durant la phase de détente, nous avons observé une augmentation de ce temps caractéristique de la turbulence, due en grande partie à la diminution du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente. Enfin, les résultats ont permis de mettre en évidence l'intérêt de prendre en compte l'évolution temporelle du temps caractéristique de la turbulence. Effectivement, cette dernière permet de prédire plus précisément les évolutions expérimentales de la pression dans le cylindre en comparaison avec le cas où ce temps est maintenu constant.

Références

- [1] R. Dibble, M. Au, J. Girard, S.M. Aceves, D.L. Flowers, J. Martinez-Frias, J.R. Smith. Current research in HCCI at UC Berkeley and LLNL. SAE paper 2001-01-2511, 2001.
- [2] S.C. Kong, CD. Marriott, R.D. Reitz, M. Christensen. Modeling and experiments of HCCI engine combustion using detailed chemical kinetics with multidimensional CFD. SAE paper 2001-01-1026, 2001.

- [3] S.M. Aceves, D.L. Flowers, J. Martinez-Frias, J.R. Smith, R. Dibble, M. Au, J. Girard. HCCI combustion: analysis and experiments. SAE paper 2001-01-2077, 2001.
- [4] F. Maroteaux and L. Noel. Development of a reduced n-heptane oxidation mechanism for HCCI combustion modeling, Combustion and Flame, Vol 146, pages 256-267, 2006.
- [5] Markus Kraft and Wolfgang Wagner. An efficient stochastic chemistry approximation for the PDF transport equation, ISSN 0946-8633, 2001.
- [6] J.B. Heywood. Internal Combustion Engine Fundamentals, McGraw-Hill, New-York, 1988.
- [7] N. Dennis. Assanis and John B. Heywood. Development and use of a computer simulation of the turbocompounded Diesel system for engine performance and component heat transfer studies. SAE paper 860329, 1986.
- [8] Pierre-Lin Pommier, Fadila Maroteaux, Michel Sorine. A PDF method for HCCI combustion modeling CPU time optimization through a restricted initial distribution. Mechanics & Industry. 2012. Vol 13, issue 3, pp 219-228.
- [9] Amit Bhave, Michael Balthasar, Markus Kraft, Fabian Mauss. Numerical analysis of natural gas fuelled HCCI engine with exhaust gas recirculation, using a stochastic reactor model. University of Cambridge ISSN 1734-4273, 2003.

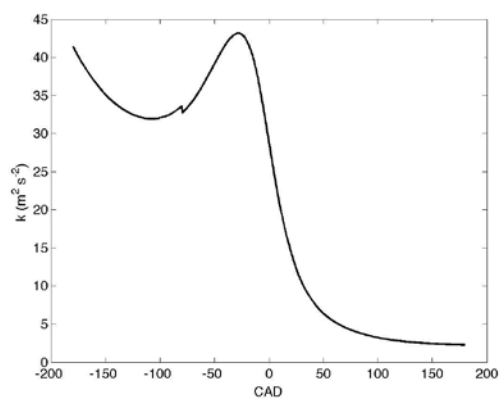


Figure 2 : Evolution de l'énergie cinétique turbulente

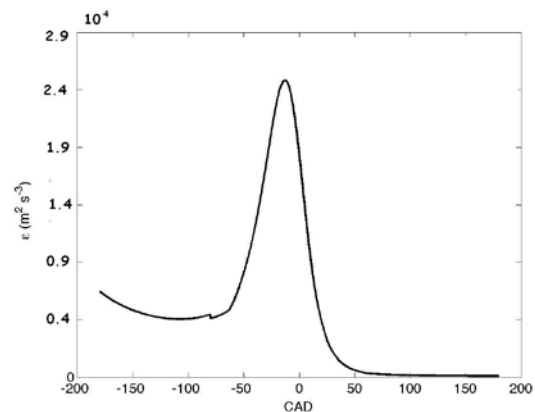


Figure 3 : Evolution du taux de dissipation

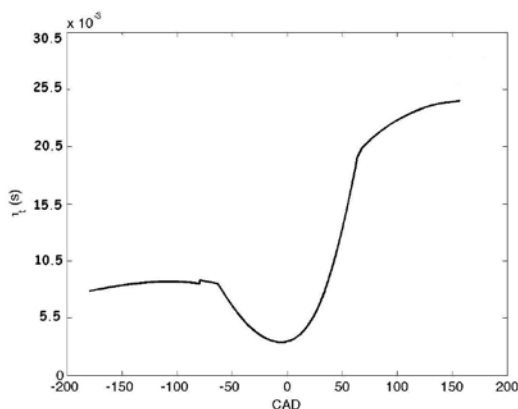


Figure 4 : Evolution du temps caractéristique de la turbulence

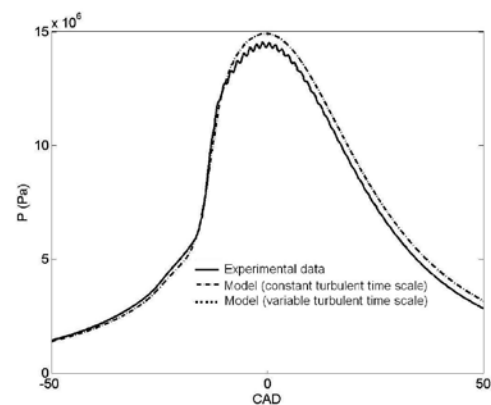


Figure 5 : Comparaison des évolutions de la pression cylindre