

Approche microscopique de la modélisation des transferts thermiques pariétaux dans une chambre de combustion à volume constant

Microscopic approach of parietal heat transfer modeling in a constant combustion vessel.

Taïssir KASRAOUI^{1*}, Karl JOULAIN², Rémi BERTOSSI¹,

¹IDRII, IPSA, 63, boulevard de Brandebourg, 94200 Ivry-sur-Seine, France

²Institut Pprime, département Fluide, Thermique et Combustion, UPR 3346

ENSIP, Bâtiment de Mécanique B25, 2, rue Pierre Brousse, TSA 41105, F86073 Poitiers Cedex 9

* (auteur correspondant : taissir.kasraoui@ipsa.fr)

Résumé – Pour évaluer les pertes thermiques pariétales dans les chambres de combustion, une alternative aux modèles macroscopiques existants de transfert de chaleur est suggérée. Cette étude présente une approche physique du transfert de chaleur pariétal basée sur la théorie cinétique des gaz afin de décrire les phénomènes de convection entre les particules de gaz et la paroi froide à petite échelle. Le modèle mentionné est implémenté dans un code FORTRAN 90 simulant la combustion dans une chambre sphérique à volume constant.

Mots-clés : Transfert thermique pariétal ; régime balistique ; théorie cinétique des gaz ; transfert thermique instationnaire ; combustion.

Abstract – To evaluate the wall heat losses in combustion vessel, an alternative to existing macroscopic models of heat transfer is suggested. This study aims to provide a physical approach for wall heat transfer based on kinetic theory of gases in order to describe the convection phenomena between gas particles and the cold wall in short scales. The model mentioned is implemented in a FORTRAN 90 code simulating combustion in a constant volume spherical chamber.

Keywords: unsteady heat transfer ; combustion ; kinetic theory of gases ; ballistic regime.

Nomenclature

C_p chaleur massique, $J.kg^{-1}.K^{-1}$

k_b constante de Boltzmann, $J.K^{-1}$

Q densité de flux thermique, $MW.m^{-2}$

Sl vitesse de flamme laminaire non étirée, $m.s^{-1}$

T température, K

P pression, Bar ou Pa

Y_{fuel} fraction massique carburant dans gaz frais

Symboles grecs

λ conductivité thermique, $W.m^{-1}.K^{-1}$

Indices et exposants

u gaz frais

w paroi

g gaz

moy moyenne

1. Introduction

La modélisation des échanges de chaleur dans les chambres de combustion bénéficie d'une attention majeure du fait de la complexité des phénomènes physiques mis en jeu et de la difficulté des mesures expérimentales. Dans notre étude, nous nous intéressons à la mise en œuvre d'un outil de simulation des transferts couplés d'une flamme laminaire de prémélange dans une chambre de combustion à volume constant.

2. Etat de l'art de la modélisation des pertes thermiques pariétales dans une chambre de combustion à volume constant

Au fil des années, plusieurs chercheurs se sont intéressés à déterminer expérimentalement le flux de chaleur pariétal Q_w et à établir des modèles simulant les pertes thermiques pariétales dans des chambres de combustion à volume constant. Pour reproduire l'effet des phénomènes rencontrés dans les écoulements réactifs, il faut généralement écarter les formulations théoriques qui introduisent le coefficient de Newton h et élaborer des modèles empiriques ou bien des modèles d'interaction fluide-paroi.

2.1. Aspects théoriques de l'interaction flamme-paroi et gaz brûlés-paroi dans une chambre de combustion à volume constant

L'interaction flamme-paroi est constituée de deux phénomènes distincts. Il s'agit de l'interaction flamme-paroi (phase de combustion), puis de l'interaction gaz brûlés-paroi. Pour une combustion dans une chambre à volume constant, la flamme s'éteint à une distance donnée de la paroi, δq , suite à la présence des pertes thermiques pariétales couplée ou non à l'étirement du front de flamme.

2.2. Travaux antérieurs concernant la modélisation du flux thermique pariétal

2.2.1. Modèles empiriques des pertes thermiques pariétales

Il s'agit d'une approche globale, thermodynamique, 1 zone ou 0D qui a accompagné le développement des moteurs à combustion interne depuis plusieurs années. Parmi les corrélations les plus connues et les plus anciennes, nous citons la formulation établie par Nusselt [1] à partir des expériences de combustion laminaire. Cette corrélation, basée sur la convection naturelle, a été établie dans le cas d'une bombe sphérique comme suit :

$$h = 1,15^3 \sqrt{P^2 T_g} \quad (1)$$

avec P la pression en bar, T_g la température moyenne des gaz dans la chambre

Cette formulation, bien qu'elle prenne en compte les paramètres thermodynamiques moyens de l'écoulement, sous-estime le flux de chaleur à la paroi.

Pour contourner ce problème, d'autres formulations basées sur la convection forcée ont été établies. Nous citons la formulation de Woschni [2] qui inclut la vitesse caractéristique w , l'alésage D et le volume V_{cyl} du cylindre, la vitesse moyenne du piston $\langle V_{piston} \rangle$ et la température moyenne des gaz dans la chambre de combustion T_{moy} :

$$\begin{cases} h = 130 D^{-0,2} P^{0,8} T_{moy}^{-0,53} w^{0,8} \\ w = 2,28 \langle V_{piston} \rangle + 0,00324 \frac{V_{cyl} T_1}{P_1 V_1} (P - P_0) \end{cases} \quad (2)$$

avec P en bar et l'indice 0 correspond aux essais moteur en régime entraîné et l'indice 1 aux conditions du PMB (Point Mort Bas). Pour appliquer ce modèle dans une enceinte sphérique, certains paramètres ont été adaptés tels que l'alésage qui est pris égal au diamètre de la chambre et la vitesse caractéristique w qui néglige la vitesse moyenne du piston. La nouvelle formulation s'écrit comme suit :

$$\begin{cases} h = 130 D^{-0,2} P^{0,8} T_{moy}^{-0,53} w^{0,8} \\ w = 0,00324 \frac{T_0}{P_0} (P - P_0) \end{cases} \quad (3)$$

En conclusion, les corrélations empiriques bien qu'elles donnent un résultat à moindre coût, dépendent des coefficients empiriques caractéristiques du type du moteur considéré.

2.2.2. Lois de paroi

Pour remédier aux problèmes issus des modèles empiriques, des lois de paroi sont déduites. Parmi les modèles basés sur la couche limite thermique, nous citons le modèle établi par Rivère [3] qui fait appel à des notions de théorie cinétique des gaz. Le coefficient h de convection est alors établi comme suit :

$$h = \rho_g \sqrt{T_g} \sqrt{2/\pi} \left(\frac{R}{M}\right)^{3/2} \left(\eta + \frac{\kappa}{\sqrt{T_w}} - \frac{\lambda}{T_w}\right) \quad (4)$$

avec T_g représente la température locale des gaz frais au-delà de la couche limite thermique qui est égale à la température moyenne des gaz frais, M la masse molaire des gaz, ρ_g la densité des gaz frais, λ et κ des coefficients empiriques qui dépendent des propriétés de la paroi et η qui dépend de l'écoulement. L'évolution de η est déterminée à partir d'essais sur moteur dont la vitesse du piston est entre 2 à 10 m.s⁻¹. Elle est égale à :

$$\eta = 7e^{-4} + 7e^{-5}\langle V_{piston} \rangle \quad (5)$$

Cette approche locale, bien que constituant une avancée dans la compréhension des phénomènes de proche paroi, reste une formulation semi-empirique qui requiert l'expérience pour ajuster ses paramètres. En conclusion, la majorité des modèles proposés dans la littérature représentent des limites d'application. Une nouvelle approche basée sur l'estimation du flux de chaleur pariétal par choc entre particules de gaz et la paroi en régime balistique est présentée dans la suite de l'article.

3. Modélisation des pertes thermiques pariétales dans une chambre de combustion sphérique à volume constant

3.1. Description du code de calcul

Le code de calcul développé en Fortran 90 a pour but de simuler, par une approche monodimensionnelle, la propagation d'une flamme laminaire dans une chambre sphérique à volume constant. A chaque pas de temps, la flamme, à symétrie sphérique, se propage et brûle une tranche de prémélange de façon isobare. Elle génère ainsi une tranche de gaz brûlés. Quant aux gaz frais, ils sont divisés en N tranches. La dernière tranche, maintenue à côté de la paroi, est définie de manière à avoir une épaisseur égale au libre parcours moyen afin d'appliquer le modèle du transfert thermique en régime balistique (la nouveauté du présent travail). Le calcul passe par plusieurs étapes principales : une combustion isobare, la prise en compte des transferts thermiques par conduction et par rayonnement à travers toutes les tranches de gaz et l'évaluation des pertes thermiques pariétales ; une dilatation isobare et enfin, une recompression isentropique. Une fois la combustion terminée (selon le critère de coincement), le refroidissement est simulé de la même manière (excepté l'étape de combustion). La vérification du bilan énergétique au cours du temps est assurée pendant la combustion.

3.2. Diffusion thermique dans les gaz

Durant les deux phases de l'interaction flamme-paroi et gaz brûlés-paroi, la modélisation des transferts thermiques convectifs fait appel, toujours, au même modèle des pertes thermiques établi en passant par la résolution de l'équation de chaleur instationnaire 1D en coordonnées sphériques dans les différentes tranches de gaz brûlés et de gaz frais. La température de la

dernière tranche de gaz frais est déterminée en imposant une égalité des flux : à chaque pas de temps, le flux conductif issu de la diffusion est égal au flux convectif à la paroi.

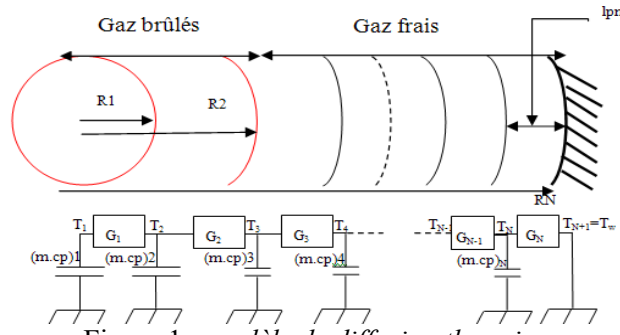


Figure 1 : modèle de diffusion thermique

Le modèle instationnaire 1D se base sur une approche nodale (cf. figure1). L'espace est discrétisé en N tranches selon des vecteurs de rayon $r_{i[1,N]}$ avec $r_N = R$. Les conductances thermiques sont définies comme suit :

$$\begin{cases} G_i = \frac{4\pi\lambda_i}{1/r_{i-1} - 1/r_i}, & i \in [2, N-1] \\ G_1 = \frac{4\pi\lambda_1}{1/\delta - 1/r_1}, & \delta = 10^{-4}m \\ G_N = h \cdot S_{chambre}, & \text{avec } h : \text{le coefficient de transfert convectif (cf. § 3.3.)} \end{cases} \quad (6)$$

La résolution temporelle et spatiale de l'équation de la chaleur fait appel à la méthode des différences finies. Le système d'équations obtenu est le suivant :

$$\begin{cases} (m \cdot C_p)_1 \frac{T_{1,t+\Delta t} - T_{1,t}}{\Delta t} = G_1(T_{2,t} - T_{1,t}) \\ (m \cdot C_p)_i \frac{T_{i,t+\Delta t} - T_{i,t}}{\Delta t} = G_i(T_{i+1,t} - T_{i,t}) + G_{i-1}(T_{i-1,t} - T_{i,t}), & i \in [2, N-1] \\ T_{N,t+\Delta t} = \frac{(T_{N-1,t+\Delta t} + \frac{G_N \cdot T_w}{G_{N-1}})}{(1 + G_N/G_{N-1})}, & i = N \end{cases} \quad (7)$$

Pour toute résolution numérique, un problème d'instabilité de calcul peut apparaître. Une condition nécessaire à la convergence de la méthode des différences finies consiste à la prise en compte de la condition de Friedrichs-Lewy (CFL). Cette condition est nécessaire mais pas suffisante pour obtenir une solution stable. Sur la base d'une généralisation classique du schéma de Crank-Nicolson, la condition de stabilité devient alors :

$$0 \leq \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad (8)$$

Dans le code de calcul, la condition de stabilité est appliquée aux tranches de gaz frais ainsi qu'à celles des gaz brûlés.

3.3. Modèle balistique des pertes thermiques pariétales

Le modèle des pertes thermiques pariétales considéré dans cette étude est basé principalement sur la notion de fonction de distribution et sur l'équation de Boltzmann [4]. Il décrit les transferts thermiques dans les gaz dilués aux courtes échelles de longueur et de temps. Pour les systèmes hors équilibre thermodynamique local, le flux convectif en régime balistique entre deux parois séparées par une distance inférieure ou égale au libre parcours moyen (lpm) est décrit selon l'équation suivante :

$$Q_{conv} = h * \Delta T, \quad h = \frac{nT_w(2k_b)^{3/2}}{2\sqrt{\pi m}T_w} \quad (9)$$

Avec n la densité du gaz en proche paroi (exprimé en m^{-3}), k_b la constante de Boltzmann et m la masse d'une molécule de gaz frais (kg). Dans notre étude, il s'agit de considérer une paroi fictive dans les gaz frais séparée par une distance égale ou inférieure au libre parcours moyen

de la paroi afin d'assurer le régime raréfié. Il s'agit donc d'un flux convectif entre la paroi de la chambre et les molécules de gaz frais présents dans la dernière couche de gaz frais prédéfinie précédemment (voir figure 1).

3.4. Transfert radiatif à la paroi

Le rayonnement des gaz brûlés pour des mélanges riches est modélisé d'une manière simple basée sur la loi de Stefan en considérant les gaz brûlés comme un corps gris de température uniforme T_{gb} et d'émissivité ε . Seuls les rayonnements de CO_2 et de H_2O sont pris en compte. Pour une position donnée du front de flamme r tel que $r < R$ (rayon de la chambre), le flux surfacique radiatif reçu par la paroi d'absorptivité α est calculé comme suit :

$$Q_{wray}(r) = \frac{4\pi r^2}{4\pi R^2} \alpha * \varepsilon * \sigma * (T_{gb}^4 - T_w^4) \quad (10)$$

3.5. Distance de coincement

La fin de la combustion est caractérisée par le coincement de la flamme. La distance de coincement est alors choisie comme critère d'arrêt de cette phase. La formulation établie par Westbrook et *al.* [5] est alors adoptée de par sa validité à des hautes pressions (1- 40 atm) :

$$Pe_{gb} = \frac{\delta_q}{\lambda_{gb}/\rho_{gf}S_l c_{p_{gb}}} = 3.5P^{-0.06} \quad (11)$$

Avec Pe_{gb} le nombre de Peclet basé sur les gaz brûlés.

4. Résultats numériques

4.1. Données expérimentales de référence

Les données expérimentales sont fournies par Boust [6]; les expériences ont été réalisées dans une enceinte sphérique à volume constant. Ce choix a été retenu car cette géométrie représente les conditions locales du moteur où le volume reste quasi constant. Pour les expériences, seuls la pression et le flux de chaleur ont été mesurés. L'évolution temporelle de la pression est enregistrée avec un transducteur piézoélectrique (Kistler 601A) qui est monté affleurant à la paroi. Concernant la mesure locale de flux thermique, un capteur à thermocouple de surface (CFTM, société CRMT) monté affleurant en paroi de la chambre est utilisé. Ce capteur est muni de deux thermocouples Fe/constantan de type J, l'un en surface, l'autre en profondeur.

4.2. Validation du modèle balistique des pertes thermiques pariétales

Les simulations numériques sont faites pour les mêmes conditions expérimentales pour un mélange méthane-air stœchiométrique de pression initiale $P_0 = 0,4MPa$ et de température initiale égale à $T_0 = 300K$ dans une chambre ($\varnothing 82mm$) en acier inoxydable. Les variations temporelles du flux thermique pariétal et de la pression sont présentées dans la figure 2.

Le flux simulé indique deux phases majeures de transfert thermique : pour $t < t_{pic} = 47,55$ ms, le flux simulé est faible et ne dépasse pas $0,4MW/m^2$. Cet apport est négligeable devant le flux thermique simulé au moment du coincement de la flamme dont la valeur simulée atteint $2,2 MW/m^2$ comparativement à la valeur expérimentale qui est égale à $2,26MW/m^2$ (erreur relative=2,6%). La combustion s'arrête selon le critère de coincement basé sur le nombre de Peclet (cf. §3.5) avec une distance de coincement simulée égale à $95\mu m$. L'apparition d'un pic brutal au moment du coincement est expliquée par le fait que toute la chaleur de combustion destinée à la zone de préchauffage passe brutalement à la paroi par conduction à travers les gaz

frais. Après l’extinction de la flamme, le flux de chaleur décroît brutalement : c’est le refroidissement. Globalement, les phases de combustion et de refroidissement sont simulées correctement en termes de flux thermique. Cependant, la courbe de la pression simulée ne correspond pas parfaitement à la courbe expérimentale. Concernant la différence observée entre le pic de pression simulé qui est de 3,7 MPa et le pic de pression expérimental qui est de 2,9 MPa (l’écart relatif est estimé à 27%), elle peut être expliquée par les effets de l’expansion thermique dans les gaz frais après la diffusion qui s’accroissent en s’approchant de la paroi. En effet, les températures des tranches des gaz frais ont augmenté suite à la diffusion de la chaleur des gaz brûlés vers la paroi, alors que le fort gradient de température doit, normalement, être présent dans la zone de flamme et que la température des gaz frais augmente sous l’effet de la compression. Cette augmentation de température est suivie par une augmentation de la pression afin de conserver le volume total de la chambre.

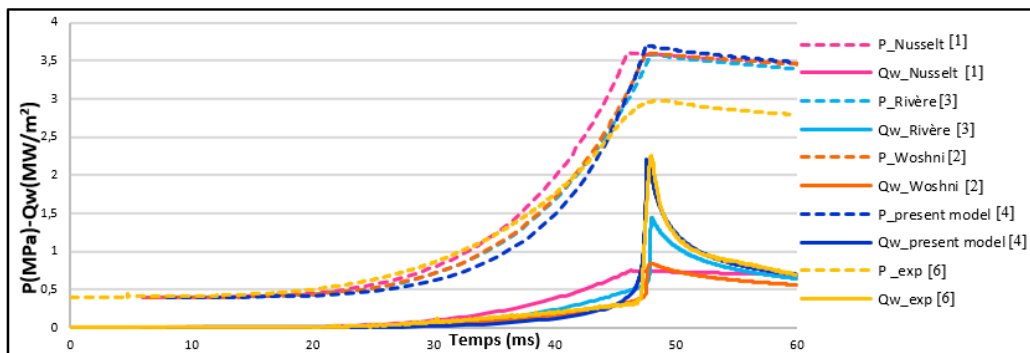


Figure 2 : Pression et flux thermique pariétal- CH_4 -air, $\Phi=1$, $P_0=0.4MPa$, $\varnothing =82mm$

Dans cette étude, d’autres modèles des pertes thermiques pariétales présents dans la littérature ont été implémentés afin de comparer leurs résultats avec les résultats du présent modèle. Les simulations numériques montrent que le pic de flux au moment du coincement n’est reproduit avec satisfaction qu’avec les modèles basés sur l’approche microscopique y compris notre modèle et le modèle de Rivère [3]. Ce dernier rend compte du pic de flux qui apparaît après l’extinction de la flamme. Cependant, ce dernier est inférieur à celui simulé par le modèle balistique qui reste le plus proche du pic expérimental. La reproduction des valeurs expérimentales par le modèle balistique le met en valeur par rapport aux modèles de transfert diffusif ou convectif classiques qui reproduisent moins bien les valeurs expérimentales (surtout en termes de pic de flux de chaleur).

4.3. Comparaison entre la contribution convective et radiative

Durant les phases de combustion et de refroidissement, les différents modes de transfert de chaleur sont présents. Il s’agit de la diffusion thermique dans les gaz brûlés et les gaz frais, de la convection entre les gaz frais et la paroi et du rayonnement entre les gaz brûlés et la paroi. Dans ce travail, les pertes thermiques radiatives et convectives ont été prises en compte dès le début de la combustion : le rayonnement permet d’extraire de la chaleur des gaz brûlés du centre de la chambre tandis que la convection permet de refroidir les gaz frais en proche paroi. A partir des courbes présentées dans la figure 3, nous remarquons que la courbe de flux thermique convectif présente la même allure que l’évolution temporelle du flux thermique pariétal total. Pendant la combustion, les flux radiatifs et convectifs augmentent simultanément jusqu’au moment du coincement. Ensuite, la courbe de flux thermique convectif enregistre un pic brutal qui atteint 1,83 MW/m² ce qui représente environ 80% du flux thermique total suite à l’extinction de la flamme. Cependant, la contribution radiative diminue jusqu’à atteindre 20%

du flux thermique total au moment du coincement. Pendant la période de refroidissement, la convection reste supérieure au rayonnement jusqu'à la fin de la phase de refroidissement où la convection et le rayonnement restent respectivement égaux à 55% et 45%.

Au début de la phase de combustion, la contribution radiative des gaz brûlés prédomine sur la convection à travers les gaz frais. Les faibles valeurs de flux thermique pariétal total enregistrées sont dues, d'une part, à la faible émissivité des gaz brûlés maintenus à hautes températures et à basse pression [6] et d'autre part, à la faible diffusion de la chaleur vers la paroi au début de la combustion.

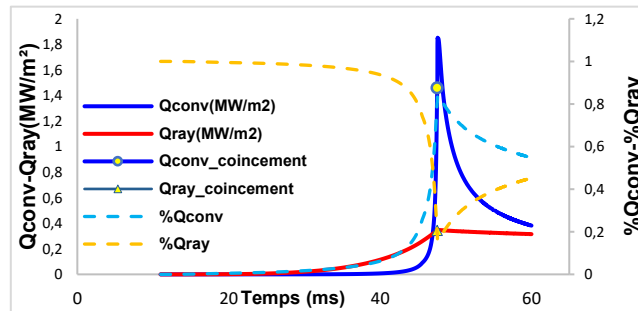


Figure 3 : comparaison entre la contribution radiative et convective dans les pertes thermiques pariétales- CH4-air, $\Phi=1$, $P_0=0,4$ MPa, $\varnothing = 82$ mm

Ces résultats mettent en évidence l'importance des pertes thermiques convectives dans la combustion prémélangée en régime laminaire et peuvent, ainsi, être extrapolés à la combustion en régime turbulent (cas des moteurs à allumage commandé) où l'advection des gaz brûlés sur la paroi accentue le flux diffusé surtout en présence d'aérodynamique intense.

4.4. Profil de température des gaz

La figure 4 montre l'évolution spatio-temporelle de la température pour des positions radiales différentes allant de 0,1 mm à 1,7 mm de la paroi en fonction du temps relatif au temps de coincement ($\Delta t=0$ correspond au temps de coincement). Le but de cette étude est de comparer les résultats simulés aux résultats expérimentaux établis par Mann et *al.* [7] dans un injecteur assurant une propagation instationnaire d'une flamme de prémélange stœchiométrique méthane- contre une paroi froide maintenue à 300 K. Les mesures de la température sont fournies selon la direction axiale centrée de l'injecteur assurant une configuration de coincement frontal.

Les résultats montrent que l'évolution spatio-temporelle des températures simulées dans la chambre semble avoir la même allure que les températures mesurées. Ces positions sont maintenues à des distances supérieures à la distance de coincement simulée (0,094 mm) ce qui fait que toutes les températures simulées correspondent aux tranches de gaz brûlés au moment du coincement. Après le moment de coincement, les températures de toutes les positions diminuent rapidement à l'exception des positions les plus distantes de la paroi. Cependant, l'écart de température des gaz frais simulé est supérieur à 500 K contre 300 K mesuré. Il est de 2600 K contre 2000 K mesuré pour les gaz brûlés. Cette différence est due au fait que les simulations tiennent compte des effets de l'expansion thermique après la diffusion qui s'accroissent en s'approchant de la paroi alors que le fort gradient de température doit, normalement, être présent dans la zone de flamme (cf. §4.2). Concernant les courbes expérimentales, le moment de coincement est déterminé par le pic de la température au point le plus proche de la paroi qui coïncide à la diminution des fluctuations de température. Pour une position loin de la paroi ($r = 1,7$ mm), la flamme et sa zone de post oxydation ne sont pas perturbées et la température reste élevée durant tout le coincement [7]. Ces résultats sont

identiques aux résultats simulés ($r = 1,7$ mm et $r = 0,9$ mm) où les températures restent élevées et ne diminuent pas rapidement après le coincement.

En s'approchant de la paroi, les expériences montrent que les pics de la température diminuent par un facteur de 2 entre $r = 1,7$ mm et $r = 0,1$ mm. Cette diminution n'apparaît pas dans les courbes simulées qui gardent le même ordre de grandeur de température avant le coincement et diminuent après le coincement avec l'apparition de quelques oscillations probablement dues à un problème numérique. Il reste à noter que dans les simulations, les effets de diffusion de masse ont été négligés entre les tranches alors qu'ils s'accroissent lorsque les tranches voisines ont des compositions différentes ; par exemple, entre les tranches qui ont brûlé et les tranches de gaz frais après le coincement. Ce phénomène doit être alors pris en compte dans les simulations vu l'importance qu'il représente.

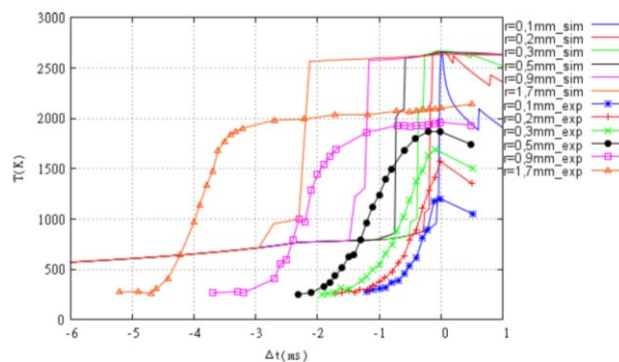


Figure 4 : Comparaison des températures simulées à des positions différentes par rapport aux valeurs expérimentales [7]

5. Conclusion

Ce travail considère la diffusion thermique instationnaire dans les tranches de gaz frais et applique un modèle de pertes convectives basé sur la théorie cinétique des gaz. La résolution instationnaire de l'équation de chaleur dans toute la chambre reproduit assez bien le phénomène d'interaction flamme-paroi et met en évidence des résultats proches des mesures expérimentales. Ce code nécessite cependant une bonne discrétisation spatio-temporelle pour assurer une bonne convergence numérique.

Références

- [1] Nusselt W., "Der Wärmeübergang in der Verbrennungskraftmaschine", V.D.I. Forschungsheft 264,1923.
- [2] Woschni G., "A universally applicable equation for the instantaneous heat transfer coefficient in the internal combustion engine", SAE Technical Paper 670931, 1967.
- [3] Rivère J.P, Mechkor M, Modeling of the parietal heat exchanges in a combustion chamber, rapport RENAULT, 2005.
- [4] Carminati R., Transport en milieux dilués, ch 2 dans Micro et nanothermique, édité par S. Volz, Editions du CNRS, (Paris, France), 2007.
- [5] Westbrook C. K., Adamczyk A.A., Lavoie G.A., « A numerical study of laminar flame wall quenching », Combustion and Flame (40) 81-99, 1981.
- [6] Boust B., Etude expérimentale et modélisation des pertes thermiques pariétales lors de l'interaction flamme-paroi instationnaire. Thèse de doctorat de l'université de Poitiers, 2006.
- [7] Mann M., Jainski C., Euler M., Böhm B., Dreizler A., « Transient flame-wall interactions: Experimental analysis using spectroscopic temperature and CO concentration measurements », Combustion and Flame, 161, 2371–2386, 2014.