

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université M'hamed BOUGARA, Boumerdes
Faculté des Sciences de l'Ingénieur

Ecole Doctorale en Energétique et Développement Durable



Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de Magister

OPTION

Systèmes Energétiques Avancés

**INVESTIGATIONS NUMERIQUES DU PROCESSUS
DE COMBUSTION DANS UN MOTEUR DIESEL**

Présenté par : **Cheikh KEZRANE**

Soutenu le : 24 juin 2009

Examineurs :

Mohand TAZEROUT	Professeur	EMNantes / France	Président
Samir HANCHI	Professeur	EMP / Alger	Examineur
Pascal STOUFFS	Professeur	Univ de Pau / France	Examineur
Mourad BALISTROU	Maître de conférences/A	UMBB/ Boumerdes	Examineur
Abdelkrim LIAZID	Professeur	ENSET/ Oran	Directeur de mémoire

Année Universitaire 2008/2009



A la mémoire de mon père
A toute ma famille
A tous ceux qui me sont chers

REMERCIEMENTS

Grâce soit rendue à dieu que nulle expression ne saurait glorifier en dénombrer les bienfaits ou lui rendre l'hommage requis.

J'exprime ma profonde reconnaissance au Professeur LIAZID Abdelkrim, Directeur du Laboratoire de Recherche en Technologie de l'Environnement à l'ENSET-ORAN, qui a guidé mes premiers pas vers la recherche. Je le remercie vivement pour la confiance qu'il m'a témoigné et pour sa constante disponibilité. Son expérience, ses connaissances, ses idées, ses remarques pertinentes et sa méthodologie de travail m'ont beaucoup appris.

Que tous ceux qui ont participé à la réussite de cette première promotion, de l'Ecole Doctorale en Energétique et Développement Durable, en particulier les deux coordonateurs en l'occurrence le Professeur M. TAZROUT de l'Ecole des Mines de Nantes et le Docteur M. BALISTROU de l'Université de Boumerdes. Qu'ils trouvent ici l'expression de mes vifs remerciements.

Je voudrais remercier les membres du jury de soutenance, le Professeur P. Stouffs, directeur du LaTEP de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour et le Professeur S. HANCHI de l'Ecole Militaire Polytechnique, pour l'honneur qu'ils me font pour examiner ce travail.

Je remercie également l'ensemble des chercheurs du laboratoire LTE, en particulier Mr S. BENMECHERNEN pour ses encouragements et le groupe qui travaille sur KIVA pour l'ambiance de travail.

Mes remerciements vont également à mes amis A. ROUIBEH, F. KHODJA, A. SAADALLAH et C. BERRABEH pour leur soutien continu.

Je ne saurais terminer mes remerciements sans citer les étudiants de la première promotion de l'EDED pour les moments qu'on a partagé.

KEZRANE Cheikh (JUIN 2009)

Table des matières

Liste des figures	vi
Liste des tableaux	vii
Nomenclature	viii
Introduction	1
Chapitre 1 : Synthèse bibliographique	3
1.1 Spécificités de la combustion dans les moteurs Diesel.....	4
1.1.1 Combustion/Turbulence.....	4
1.1.2 Ecoulements diphasiques/Turbulence.....	5
1.1.3 Ecoulements diphasiques/ Combustion.....	5
1.2 Déroulement de la combustion.....	5
1.3 Les émissions du moteur diesel.....	7
1.3.1 Hydrocarbures non brûlés HC.....	7
1.3.2 Le monoxyde de carbone.....	7
1.3.3 Les oxydes d'azote.....	7
1.3.4 Les suies.....	8
1.4 La dualité NO _x /Suie.....	8
1.5 Paramètres influants sur la combustion et les émissions.....	9
1.5.1 Utilisation de l'EGR.....	9
1.5.2 Niveaux de swirl.....	10
1.5.3 Stratégies des systèmes d'injection.....	10
1.5.3.1 Injections multiples.....	11
1.5.3.2 Injection pilote.....	11
1.5.3.3 Post-injection.....	12
Chapitre 2 : Phénoménologie et Modélisation de la combustion.....	16
2.1 Phase gazeuse.....	17
2.1.1 L'équation de conservation de l'espèce chimique.....	17
2.1.2 L'équation de conservation de la masse totale.....	18
2.1.3 L'équation de la quantité de mouvement.....	18
2.1.4 L'équation de conservation d'énergie.....	18
2.1.5 L'équation d'état.....	19
2.2 Equations de l'écoulement moyen.....	19
2.3 Phase liquide.....	20
2.3.1 Modélisation du Jet.....	20
2.3.2 Formulation Mathématique.....	21
2.3.3 Interaction Jet- Gaz.....	21
2.4 Les Modèles physiques.....	22
2.4.1. Turbulence.....	22
2.4.1.1 Le Modèle de Turbulence $k-\varepsilon$	22
2.4.1.2 Le Modèle de Turbulence $RNG\ k-\varepsilon$	23
2.4.1.3 Le Modèle SGS	23
2.4.2 Transfert thermique.....	24
2.4.2.1 Loi de paroi.....	24
2.5 Les Modèles chimiques.....	25
2.5.1 Mécanismes réactionnels détaillés.....	25
2.5.2 Mécanismes réactionnels globaux.....	26

2.5.3 Chimie d'équilibre.....	27
2.5.4 Modèle d'Allumage.....	28
2.5.5 Formations des polluants.....	29
2.5.5.1 Formation de NOx.....	29
2.5.5.2 Formation de suie.....	31
2.6 Interactions Chimie-turbulence.....	33
2.6.1 Taux moyen de réaction en utilisant des valeurs moyennes.....	33
2.6.2 Taux moyen de réaction en utilisant des pdf.....	33
2.6.3 Taux moyen de réaction en utilisant des modèles CTS.....	34
Chapitre 3 : Code de calcul et démarches numériques.....	35
3.1 Code de calcul.....	35
3.1.1 Description générale du code de simulation KIVA 3v.....	35
3.1.2 Structure standard de KIVA-3V.....	36
3.2 Démarches numériques.....	37
3.2.1 Discrétisation spatiale.....	37
3.2.2 Discrétisation Temporelle.....	39
3.2.3 Techniques de solution numérique.....	39
2.2.3.1 Technique ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian).....	39
2.2.3.2 Convergence.....	41
3.2.4 Conditions aux limites.....	41
2.2.4.1 Conditions aux limites sur la vitesse.....	41
2.2.4.2 Conditions aux limites thermiques.....	42
Chapitre 4 : Résultats et Discussions.....	43
4.1 Maillage.....	44
4.2 Calage du code.....	45
4.3 Ecoulement à froid.....	46
4.4 Allumage.....	48
4.5 Evolution de la flamme.....	50
4.6 Formation de polluant.....	52
4.7 Champs dynamique et scalaire.....	53
4.7.1 Champ de vitesse.....	53
4.7.2 Champ de la température.....	53
4.7.3 Fraction massique de CO2.....	54
4.7.4 Evolution du spray.....	54
4.8 Etude paramétrique du jet.....	56
4.8.1 Effet de l'inclinaison du jet.....	56
4.8.2 Effet du diamètre du jet.....	57
4.8.3 Effet de l'instant d'injection.....	57
4.8.4 Effet de la vitesse d'injection.....	58
Conclusion et perspectives.....	59
Bibliographie.....	xii
Annexes.....	xvi

Liste des figures

Figure 1.1: Liens entre les trois domaines.....	4
Figure 1.2: Evolution de la vitesse de dégagement de chaleur en fonction de l'angle vilebrequin.	5
Figure 1.3: Evolution de la pression en fonction de l'angle vilebrequin.....	6
Figure 1.4: Approches pour achever les objectifs d'émissions de suie et des NOx.....	8
Figure 1.5: Taux de dégagement de chaleur et Profile d'injection.....	11
Figure 2.1: Schéma représentant le Jet à la sortie de l'injecteu	20
Figure 3.1: Structure standard de KIVA3V.....	37
Figure 3.2: Une maille typique de KIVA	38
Figure 3.3: Organigramme de résolution.....	40
Figure 4.1: Banc d'essais du moteur considéré.....	43
Figure 4.2: Pression moyenne dans le cylindre.....	44
Figure 4.3: Analyse du maillage.....	44
Figure 4.4: Maillage du moteur étudié bowl cylindrique.....	45
Figure 4.5: Comparaison des valeurs de la pression calculée et mesurée.....	46
Figure 4.6: Distribution de l'énergie cinétique turbulente à 180° avant le PMH.....	46
Figure 4.7: Distribution de l'énergie cinétique turbulente à 15° avant le PMH.....	47
Figure 4.8: Mouvement de Squish.....	47
Figure 4-9: Tumble et swirl en régime d'écoulement à froid.....	48
Figure 4.10: Masse de CO2 en fonction de l'angle vilebrequin.....	48
Figure 4.11: Premières cellules d'allumage.....	49
Figure 4.12: Taux de dégagement de chaleur.....	49
Figure 4.13: Distribution de la température pendant l'injection.....	50
Figure 4.14: Evolution de la flamme à 4.5° avant le PMH.....	50
Figure 4.15: Evolution de la flamme à 5° après le PMH.....	51
Figure4.16: Evolution de la flamme à 15°après le PMH.....	51
Figure 4.17: Masse des atomes de O.....	52
Figure 4.18: Température moyenne dans le cylindre.....	52
Figure 4.19: Masse du NO thermique.....	52
Figure 4.20: Champ de vitesse pendant l'admission et l'échappement.....	53
Figure 4.21:Champs de la température pendant différents angles de vilebrequin.....	54
Figure 4.22: Champ de la fraction massique de co2.....	54
Figure 4.23: Champs iso-volume du spray et de la température.....	55
Figure 4.24: Forme du jet.....	56

Figure 4.25: Evolution de la pression moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes inclinaisons de jet.....	56
Figure 4.26: Evolution de la température moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes inclinaisons de jet.....	56
Figure 4.27: Evolution de la pression moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents diamètres de jet.....	57
Figure 4.28: Evolution de la température moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents diamètres de jet.....	57
Figure 4.29: Evolution de pression moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents angles d'injection.....	57
Figure 4.30: Evolution de la température moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents angles d'injection.....	57
Figure 4.31: Evolution de pression moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes vitesses d'injection.....	58
Figure 4.32: Evolution de la température moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes vitesses d'injection.....	58
Figure A.1 Schéma de principe du modèle de Reitz.....	xvii
Figure C.1 : Maillage par bloc du moteur étudié.....	xxiii

Liste des tableaux

Tableau 2.1: Valeurs des constantes utilisées dans les modèles de turbulence $k-\varepsilon$ et $RNG k-\varepsilon$	23
Tableau 4.1: Modèles adoptés pour la simulation.....	45
Tableau B.1 : Caractéristiques du moteur MKDIR 620-145.....	xxii
Tableau B.2 : Spécifications du système d'injection.....	xxii

Nomenclature

Notations

A	Surface de contrôle
A_{fr}	facteur pré-exponentiel
B_{rd}	Nombre de transport de Spalding
b	Paramètre d'impact de collision
b_{cr}	Paramètre d'impact critique de collision
$a_{m,r}, b_{m,r}$	Coefficients stœchiométriques intégrales pour la réaction r
C_p	Chaleur spécifique du fluide
C_{pm}	Chaleur spécifique du fluide de l'espèce m
$C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}$	Constantes des modèles $k - \varepsilon$ et RNG $k - \varepsilon$
D	Coefficient de diffusion
d_s	Diamètre de suie
E_a	Energie d'activation
E_c	Energie cinétique
F	Le taux temporel de changement individuel d'une gouttelette
f	Fonction de distribution de probabilité des gouttelettes
\dot{Q}^s	Terme source de destruction
\dot{Q}^c	Terme source de collision
f_w	Taux de chaleur par unité de surface de la paroi
Δh_f^o	Chaleur de formation de l'espèce m au zéro absolu
h_m	Enthalpie spécifique de l'espèce m
I	Matrice unité
I_m	Energie interne spécifique de l'espèce m
J	Vecteur du flux thermique
k	Energie cinétique turbulente
$k_c(T)$	Constante d'équilibre
k_{fr}, k_{br}	Constantes d'avancement et de la réaction r dans les deux sens
L_{SGS}	Longueur SGS
L	Chaleur latente
M_m	Masse molaire
m_a	Taux de l'entraînement de l'air

m_f	Masse du fuel dans la zone considérée
m_{fg}	Masse du fuel vaporisé
n	Normale à la surface de la paroi
P	Pression du fluide
\dot{Q}^c	Source due à la chimie
\dot{Q}^s	Source due au spray
R	Vitesse de la gouttelette
R_c	Nombre de Reynolds critique
R_0	Constante universelle des gaz
R^*	Radical
RH	Hydrocarbure
r	Rayon de gouttelette
S	Pénétration du jet
T	Température du fluide
T_d	Température de la gouttelette
t	Temps
Δt	Pas de temps
T_p	Température des parois
T_a	Température d'admission
T_f	Température de fuel
u	Vitesse des gaz
u^*	Vitesse de cisaillement,
u_i	Vitesse d'injection du carburant
u, v, w	Composantes de la vitesse
V	Volume de contrôle
W_m	Masse moléculaire de l'espèce m
W_{wall}	Vitesse des parois
X	Vecteur de position
\dot{y}	Vitesse d'oscillation de la gouttelette
\ddot{y}	Taux temporel de changement d'une gouttelette
Y_m	Fraction de masse de l'espèce m

Lettres grecques

Γ_ϕ	Coefficient de diffusion de ϕ
σ	Tenseur des contraintes visqueuses
ε	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente
λ	Conductivité thermique.
μ	Viscosité dynamique
μ_t	Viscosité dynamique turbulente
ν	Viscosité cinématique
ν_t	Viscosité cinématique turbulente
ρ	Masse volumique
ρ_m	Masse volumique de l'espèce
ρ_s	Masse volumique de suie
τ_c	Echelle de temps caractéristique de la réaction chimie
τ_l	Echelle de temps caractéristique laminaire
τ_t	Echelle de temps caractéristique de la turbulence
$\dot{\omega}_r$	Taux de réaction
α_d	Coefficient de tension superficielle de liquide

Nombre sans dimension

CFL	Nombre de Courant-Friedrichs-Lewy
Pr	Nombre de Prandtl
Nu	Nombre de Nusselt
Re_L	Nombre de Reynolds
Sc	Nombre de Schmidt
Sh	Nombre de Sherwood
Ta	Nombre de Taylor
We	Nombre de Weber
We_L	Nombre de Weber liquide
Z	Nombre de Ohnesorge

Acronymes

AFR	Air fuel ratio
CAI	Controlled Auto-Ignition
CFD	Computational Fluid Dynamic
CIDI	Compression ignition Direct Injection
CTS	Characteristic Time Scales
DI	Direct Injection
EGR	Exhaust Gas Recirculation
EDC	Eddy Dissipation Concept
EBU	Eddy Break Up
HSDI	High Speed Diesel Injection
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition
IMEP	Indicated Mean Effective Pressure
JANAF	Joint Army, Navy and Air Force
NSC	Nagle and Strickland-Constable
PDF	Probability Density Function
PGS	Pressure Gradient Scaling
PMH	Point Mort Haut
PMB	Point Mort Bas
RSTM	Reynolds Stress Turbulence Model
RNG	ReNormalization Group
SIMPLE	Semi-implicit pressure linked equations
TAB	Taylor Analogy Breakup

Introduction

Devant la croissance des soucis vis-à-vis des réserves limitées en énergie fossile et les règlements rigoureux en matière de respect de l'environnement, la recherche pour l'amélioration des performances du moteur à combustion interne, et la réduction des émissions est devenue l'aspect le plus important chez la communauté scientifique qui s'intéresse à la combustion et au développement de ces moteurs.

Les situations difficiles (dernières guerres, chocs pétroliers) et la prise de conscience du caractère forcément limité des ressources pétrolières ont été à la base l'inspirateur de nombreux travaux de recherche sur les combustibles. Plus récemment, la pression sur la réduction des émissions polluantes a renforcé l'intérêt de ces recherches.

Dans l'attente de la généralisation des motorisations encore moins polluantes (véhicules électriques, pile à combustible) et la diffusion des carburants alternatifs (l'hydrogène, le gaz naturel et les biocombustibles), le moteur diesel reste, de nos jours, le plus performant du point de vue énergétique. La volonté persistante d'augmenter la performance et de diminuer la pollution du moteur a suscité la recherche vers de nouveaux modes de combustion plus sophistiqués : HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) et CAI (Controlled auto-ignition). L'implantation de ces modes de combustion nécessite tout d'abord une compréhension et une maîtrise de tous les phénomènes qui se manifestent dans un moteur à combustion interne.

L'optimisation du processus de combustion par des options telles que les modèles améliorés de chambres de combustion, les systèmes à haute pression d'injection de carburant, et l'utilisation de l'EGR promettent des réductions significatives des émissions du moteur. La combinaison de telles stratégies avec le post-traitement avancé et les systèmes de contrôle électroniques poussent le moteur à allumage par compression à injection directe CIDI à saisir la chance de se présenter en tant qu'amical à l'environnement. Cependant, la perception du grand nombre de dilemmes discernables et de leur combinaison optimale est une tâche très délicate qui doit être abordée par un arrangement de séries d'investigations expérimentales et numériques.

Les expériences entreprises soigneusement peuvent fournir des résultats relativement précis pour un essai particulier, et sont nécessaires donc pour la validation de résultats numériques éventuels. Mais il est souvent difficile d'interpréter les rapports de cause et d'effet implicite dans les résultats d'un essai. Ce fait rend très pénible (coût en argent et en temps) d'établir des stratégies d'expérimentation que de faire une série d'itérations d'un modèle validé sur une machine de calcul.

D'autre part, la modélisation et les approches de simulation, bien qu'elles sont moins précises en prévoyant les résultats d'un essai particulier, peuvent effectivement isoler une variable à la fois et préciser les causes et les tendances. Par conséquent, les modèles de simulation validés ont pu être un outil utile et efficace pour le développement des performances énergétiques et environnementales des moteurs.

Le sujet abordé dans ce mémoire (investigation numérique du processus de combustion dans un moteur diesel) s'inscrit dans le cadre de l'Ecole Doctorale en Energétique et Développement Durable. Il a été réalisé au sein du Laboratoire de Recherche en Technologie de l'Environnement à l'ENSET –ORAN.

Agréé le 25 juillet 2000 par le MERS (Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique), le laboratoire **LTE** s'attelle à former et instruire des chercheurs, des étudiants en post-graduation et des techniciens de l'industrie à tenir compte des facteurs environnementaux à travers diverses activités industrielles, il regroupe des chercheurs organisés dans 07 équipes de recherche multidisciplinaires. Son objectif est d'adapter de nouvelles technologies aux problèmes de l'Environnement.

Le présent rapport expose le travail réalisé pendant cette phase d'étude. Il se compose de quatre chapitres :

- Le premier concerne une synthèse bibliographique portant respectivement sur les phénomènes de mélange et de combustion dans un moteur à allumage par compression à injection directe, sur les émissions du moteur Diesel et un bref état de l'art consacré aux stratégies d'optimisation des performances énergétiques et environnementales du moteur Diesel.
- Le deuxième chapitre entame les différents modèles adoptés, et la formulation mathématique utilisée dans ces modèles.
- Le troisième chapitre contient une présentation du code de simulation employé, et les démarches numériques procédées.
- Le quatrième chapitre expose quelques résultats obtenus avec le code, et leurs analyses en se servant des potentialités de visualisation de résultats qu'offre le post-processeur du code utilisé.
- Une conclusion générale sur le travail réalisé pendant le stage, sur les objectifs atteints à la fin de cette première phase de la formation et les perspectives de la phase suivante du travail.

Chapitre 1

Synthèse bibliographique

Depuis son invention au 19^{ème} siècle, le moteur à combustion interne a eu un impact phénoménal sur le transport et, ainsi, sur notre style de vie. Depuis lors il a tout entraîné à partir des petites voitures jusqu'aux grands bateaux. Bien qu'il existe diverses solutions alternatives pour la production de la puissance mécanique en mesure d'utilisation à des fins de génération d'électricité et de transport routier et maritime, la position du moteur à combustion interne demeure intacte.

Malheureusement, sa popularité ne signifie pas qu'il n'a aucun inconvénient. Il emploie des combustibles fossiles non-renouvelables. Aussi il émet des gaz d'échappement polluants et parfois considérés comme contribuant à l'effet de serre. Les émissions polluantes du moteur ont suivi les diminutions imposées par les règles environnementales successives, le fonctionnement a été optimisé pour une large gamme d'utilisation. Finalement, les exigences économiques s'ajoutent aux contraintes techniques et environnementales et le moteur actuel doit avoir les caractéristiques suivantes : rendement de combustion élevé, plage d'utilisation large en termes de charge et de richesse, faible perte de charge, facilité de démarrage à froid, distribution de température homogène pour assurer la longévité des différents organes, faible émission de polluants (notamment NOx et suie).

La réalisation d'un moteur répondant à toutes ces contraintes est le fruit de nombreuses années de développement de méthodes empiriques et la mise au point de prototypes, en passant également par le développement d'outils numériques adaptés. Le principal objectif est d'apporter des informations supplémentaires sur la physique de l'écoulement que l'expérience ne peut pas fournir ou seulement à un coût prohibitif. C'est dans ce contexte que ces dernières décennies la simulation numérique s'est développée chez les motoristes. Le but de ces simulations numériques n'était pas d'obtenir avec une grande précision toute la physique du problème mais plutôt de déterminer les ordres de grandeur en matière de pollution, de consommation dans différentes conditions de fonctionnement. Malgré tout, même sans chercher à atteindre un ordre de précision élevé, la physique à prendre en compte est complexe car elle réunit des disciplines aussi diverses que la thermique, l'acoustique, la turbulence, la combustion ou les écoulements à phase dispersée. L'approche la plus naturelle est d'abord de définir pour chaque problème séparé un modèle capturant une grande partie de la physique et ensuite de faire fonctionner ensemble tous ces modèles au sein d'un même outil numérique donnant des résultats dans des temps raisonnables (de l'ordre d'une dizaine d'heures). Pour répondre à

ces contraintes, les chercheurs (puis les industriels) ont développé depuis quelques décennies des codes de mécanique des fluides basés sur l'approche RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes). Cette approche apporte une information sur les quantités moyennes régissant l'écoulement et permet de connaître la position moyenne de la flamme ainsi que de nombreuses informations utiles telles que les flux thermiques aux parois ou le champ de température dans la chambre de combustion. Cette approche a connu un réel essor et elle est aujourd'hui utilisée pour des calculs de production par tous les motoristes.

1.1 Spécificités de la combustion dans les moteurs diesel

La combustion turbulente avec spray est un ensemble de trois phénomènes complexes: les écoulements diphasiques, la turbulence et les réactions chimiques. Les mécanismes physiques inhérents à chacun de ces domaines sont rappelés sur la figure 1.1. Dans cette figure, ce n'est pas seulement le contenu de chaque domaine qui est intéressant mais bien aussi leurs liens, que nous allons expliquer ci-après.

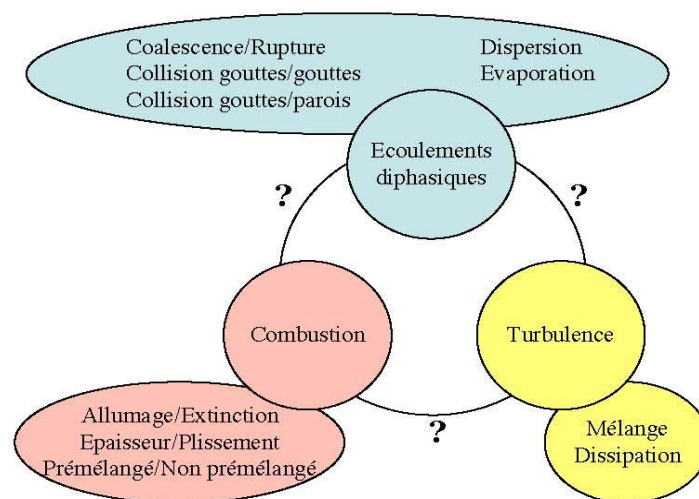


Figure 1.1: Liens entre les trois domaines

1.1.1 Combustion/Turbulence

Les liens joignant la combustion à la turbulence ont fait et font encore l'objet de très nombreux travaux. La combustion turbulente naît de l'influence réciproque de la chimie et de la turbulence. Lorsqu'une flamme interagit avec les tourbillons, la turbulence est fortement modifiée par le front de flamme à cause des forts gradients massiques et thermiques qu'induisent le dégagement de chaleur et la différence de température entre gaz frais et gaz brûlés. Ce mécanisme peut générer de la turbulence ou l'atténuer. De l'autre côté, la turbulence altère la structure de la flamme (épaisseur, plissement,...) et peut favoriser la réaction ou au contraire la ralentir voir éteindre la flamme.

1.1.2 Ecoulements diphasiques/Turbulence

Les deux phases à savoir celle du gaz et celle du jet liquide sont influencées par la turbulence mais elles peuvent également modifier la turbulence. Dans la majorité des applications, la fraction volumique de liquide est faible par rapport à celle du gaz. Dans ce cas, l'écoulement diphasique est dit dilué et l'influence des gouttes sur la turbulence est négligeable. Seule l'influence de la turbulence sur les gouttes de carburant est prise en compte. Cette influence est primordiale car c'est elle qui gouverne le déchirement du jet liquide et la transformation d'une phase liquide continue en une multitude de gouttes de tailles différentes. Ce phénomène, de fractionnement, peut être décomposé en un fractionnement primaire qui transforme, principalement par cisaillement, le jet liquide en plusieurs entités liquides séparées et un fractionnement secondaire qui scinde ces entités en gouttes. Une fois les gouttes créées, la turbulence influence le mouvement des gouttes. En effet, puisque les gouttes vont s'évaporer et créer du carburant gazeux, il est important de connaître leur position et leur taille pour évaluer la quantité et la localisation du carburant évaporé. La turbulence influencera ensuite le mélange entre l'air et le carburant évaporé. La dispersion doit donc être prise en compte fidèlement dans la modélisation utilisée pour étudier l'influence de la phase dispersée sur la combustion. Enfin, la dispersion turbulente joue un rôle sur la phase dispersée en favorisant les échanges tels que la coalescence ou la rupture des gouttes ou les collisions gouttes/gouttes et gouttes/paroi.

1.1.3 Ecoulements diphasiques/ Combustion

La présence de gaz chauds va favoriser l'évaporation des gouttes et donc la création de carburant gazeux et par l'intermédiaire du mélange avec l'air, la richesse, paramètre important pour la structure et l'intensité de la flamme. L'évaporation va donc jouer un rôle directement sur le caractère pré-mélangé ou non de la flamme et sur l'épaisseur du front de flamme, directement lié à la quantité de gouttes en train de s'évaporer. Cette forte corrélation entre évaporation et combustion est à l'origine d'un grand nombre de structures de flammes.

1.2 Déroulement de la combustion

La combustion dans un moteur à allumage par compression se développe à travers quatre étapes distinctes identifiables grâce à l'étude de la vitesse de dégagement de chaleur [1].

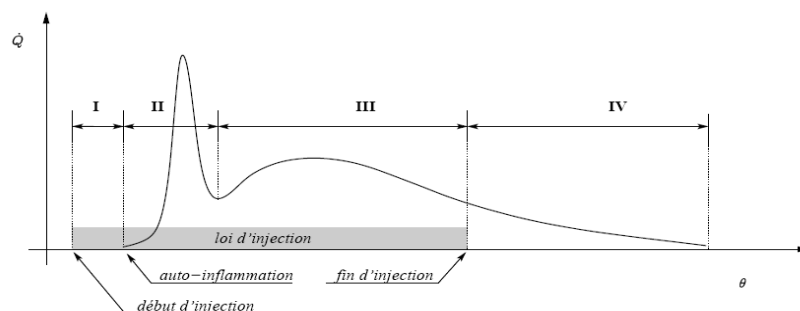


Figure 1.2: Evolution de la vitesse de dégagement de chaleur en fonction de l'angle vilebrequin [2].

Etape I : Délai d'auto-inflammation

Cette étape intervient dans l'intervalle qui sépare l'injection du carburant et le début de la combustion. Elle correspond à un temps de préparation du mélange et de l'oxydation du carburant. Le point de départ de cette phase est le début d'injection, l'auto-inflammation du carburant marque son achèvement.

Etape II : Phase de combustion pré-mélangée

La combustion s'amorce dans une zone du cylindre où le carburant injecté pendant le délai d'auto-inflammation a eu le temps de se mélanger avec l'air. La flamme qui en résulte est appelée flamme de pré-mélange. Pendant cette étape, les niveaux du mélange sont élevés et les rapports air/carburant locaux sont au dessus de 14.5:1, voir stœchiométriques, au delà de la limite de l'inflammabilité dans la frontière extérieure du jet. Ce mélange globalement pauvre est caractérisé par une combustion à basse température. La flamme de pré-mélange se propage extrêmement rapidement sur tout le volume du cylindre où le mélange est homogène. Pendant cette phase, la vitesse de libération de l'énergie chimique est très importante provoquant un fort gradient de pression (4 à 5 bar par degré vilebrequin). Cette étape s'étale sur la brève période angulaire (quelques degrés vilebrequin) qui sépare l'auto-inflammation de l'instant où la pression atteint sa valeur maximale.

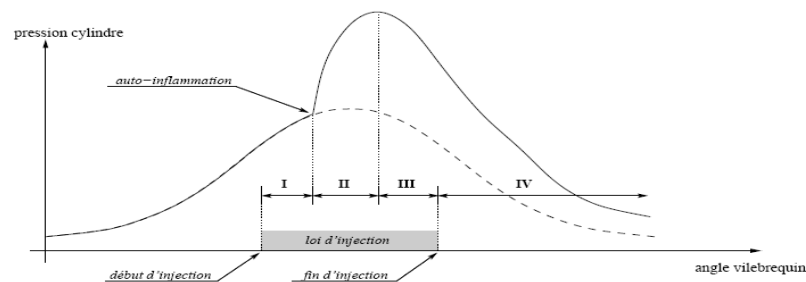


Figure 1.3: Evolution de la pression en fonction de l'angle vilebrequin.

Etape III : Combustion turbulente

Du moment que le mélange homogène est totalement consommé, la vitesse de transformation des réactifs décroît en raison du temps nécessaire à l'apparition de zones favorables à la propagation de la flamme (atomisation, vaporisation) c'est pourquoi cette phase est également connue sous le nom de combustion contrôlée (mixing-controlled combustion). Pendant cette phase, la température de cylindre est élevée et les mélanges réactifs sont caractérisés par des rapports air/carburant proche de la stœchiométrie. Le régime de combustion se modifie, la flamme de pré-mélange laisse la place à une flamme de diffusion. La vitesse de libération d'énergie dépend alors de la diffusion entre les réactifs. La combustion est essentiellement gouvernée par la loi de débit de l'injecteur, et par les phénomènes aérodynamiques. La fermeture de l'injecteur marque la fin de cette étape.

Etape IV : Combustion tardive

La combustion tardive met en jeu le combustible qui ne s'est pas encore mélangé avec l'air. Durant cette période, la vitesse de libération d'énergie est tributaire de la rencontre de l'air et du carburant. La combustion du carburant non encore utilisé dépend uniquement du brassage des gaz dans le cylindre, c'est pourquoi l'aérodynamique joue un rôle décisif au cours de ce dernier épisode de la réaction.

1.3 Les émissions du moteur diesel

Après avoir identifié le dioxyde carbonique (CO₂) comme un gaz à effet de serre, contribuant au réchauffement climatique, les moteurs Diesel sont apparus comme un concurrent très puissant aux moteurs à essence à cause de leurs faibles consommations de combustible et leurs bons rendements thermiques. Bien que les émissions du monoxyde de carbone (CO) sont négligeables dans les moteurs diesel dus au fonctionnement pauvre, ainsi que la possibilité de gérer les émissions des hydrocarbures non brûlés par des catalyseurs d'oxydation, les émissions des oxydes d'azote (NO_x) et des particules (PM) restent une principale préoccupation.

HC, CO, NO_x et Suie représentent les émissions considérées par des normes. Les mécanismes principaux pour leur formation sont décrits par Heywood [1] et sont liés aux caractéristiques de mélange et de température de flamme.

1.3.1 Hydrocarbures non brûlés HC

Les émissions des hydrocarbures non brûlés HC sont formées de deux manières possibles dans un moteur diesel conventionnel. La première est quand le mélange local fuel-air est trop pauvre pour enflammer ou supporter une propagation de flamme (limite inférieure) et la seconde est quand le mélange fuel-air est trop riche pour enflammer ou supporter une flamme (limite supérieure).

1.3.2 Le monoxyde de carbone

Les émissions de CO sont formées dans les endroits de la combustion où le rapport air/carburant (AFR) est proche ou au-dessous de la stoechiométrie, reflétant un manque d'oxygène. Cela a rarement été un souci avec les moteurs diesel conventionnels depuis même dans les pires cas, la flamme est stabilisée à un mélange avec un AFR supérieur à la stoechiométrie.

1.3.3 Les oxydes d'azote

Les émissions de NO_x, regroupent le dioxyde d'azote NO₂ et l'oxyde nitrique NO. Ce dernier étant prédominant, les NO_x sont formées pendant la combustion quand elle atteint des températures très élevées. Ces conditions sont réalisées pendant la combustion d'un mélange proche de la stoechiométrie dans un environnement à haute pression et température. Une corrélation directe a été établie entre les régimes de formation de NO_x et les températures de flamme de combustion supérieure à 700°K [3]. Ces conditions sont réalisées pendant la combustion diffusive, une fois que la température de flamme est

augmentée par la phase de combustion pré-mélangée et quand la flamme est stabilisée dans une zone de mélange pauvre. La combustion pré-mélangée ne contribue pas considérablement aux émissions de NO_x puisque les températures sont basses et le mélange est bien effectué.

1.3.4 Les suies

Les émissions de suie sont formées dans les régions riches en combustible dans le coeur liquide du jet de carburant diesel. La température de la région de flamme varie entre 1000°K et 2800°K d'où la pyrolyse du combustible par les gaz brûlés chauds qui l'environnent et forme donc les PM [3]. Une grande partie des PM est brûlée avec l'oxygène, cependant, une plus petite partie se développe et s'agglomère pour former les émissions de PM, qui quittent le cylindre sous forme de fumée noire visible. La phase de combustion diffusive est le contributeur principal aux émissions de suie puisque la combustion pré-mélangée est caractérisée par des niveaux très élevés de mélange défavorables pour former les PM. Toutefois, si la température de la phase de combustion diffusive est assez élevée, elle promouvra l'oxydation des PM et réduira toutes les émissions.

1.4 La dualité NO_x/Suie

La dualité NO_x/Suie est un problème classique bien connu et bien spécifique au moteur Diesel. Une étude récente [4] a confirmé cet état de fait qui continu à alimenter plusieurs travaux de recherche.

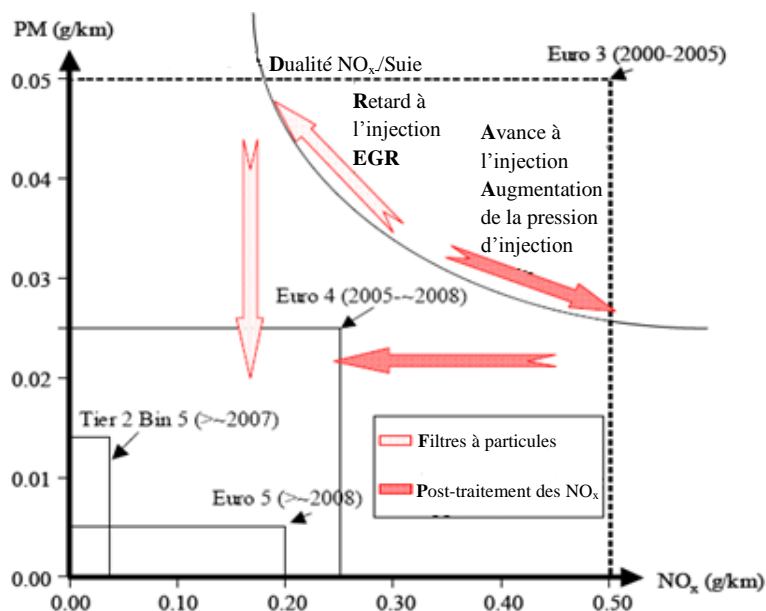


Figure 1.4: Approches pour achever les objectifs d'émissions de suie et des NO_x [3]

Il existe deux procédures pour concilier les émissions de NO_x et de suie. L'une est l'utilisation du post-traitement pour les NO_x, et l'utilisation des filtres à particules pour les suies [5,6]. L'autre approche est d'agir par le potentiel d'optimiser le fonctionnement d'un moteur particulier pour minimiser les émissions de suie et des NO_x, à l'égard des

capacités appropriées de post-traitement (considération du coût, de la technologie et également de la durabilité).

La figure 1-4 montre les deux options pour faire face à la norme Euro 4 basée sur les émissions de suie et des NOx d'un moteur qui répond à l'Euro 3. Les objectifs de l'Euro 5 sont également indiqués sur la figure 1-4.

Le moteur Diesel rejette d'importantes quantités d'oxydes d'azote et de suie. En contrepartie des faibles taux de CO et HC à l'échappement. De plus, les mécanismes de formation de ces espèces sont fortement couplés. La production des oxydes d'azotes dépend des températures maximales du cycle et de leur séjour et les fumées sont issues d'une combustion partielle. Etant donné qu'abaisser la température de la flamme risque d'entraîner une combustion incomplète, toute tentative de réduire les émissions de NOx conduit inévitablement à l'augmentation des niveaux de suie et vice versa: c'est le dilemme NOx /suie.

Comme peut être vu sur la Figure 1-4, la réduction des émissions du moteur par voie d'optimisation de la combustion et le post-traitement supplémentaire sont exigés pour atteindre de futurs objectifs d'émissions. La diminution des rejets de NOx et des suies est devenue la priorité pour les constructeurs de moteur Diesel afin d'alléger le coût de post-traitement.

1.5 Paramètres influants sur la combustion et les émissions

En fait, plusieurs paramètres influent sur la combustion et les émissions qu'elle génère. On peut citer les paramètres d'injection (instant d'injection, durée et loi d'injection), les paramètres aérodynamiques (turbulence, swirl), le rapport air/fuel, la géométrie de la chambre de combustion (bowl du piston, sections des soupapes...), les conditions de fonctionnement du moteur (vitesse de rotation, charge), l'EGR, la qualité du carburant etc...

1.5.1 Utilisation de l'EGR

Une tendance claire pour les moteurs diesel est l'utilisation du recyclage des gaz d'échappement afin de contrôler la formation des NOx dans la chambre de combustion.

Lorsque la vanne EGR est ouverte le collecteur d'admission contient un mélange d'air frais et de gaz brûlés. La conséquence directe est une réduction du taux d'oxygène dans les gaz admis dans les cylindres. Le gaz d'échappement est assimilé à un gaz inerte puisqu'il est peu réactif pendant la combustion. La carence en oxygène se traduit par une diminution du taux d'oxydation du combustible, une réduction de la vitesse de combustion et un abaissement de la température de la flamme [7,8]. Le dernier effet est essentiel car la production des NOx dépend de la température. Les expériences montrent qu'un abaissement de 50% de NOx peut être obtenu à partir d'un taux d'EGR de 20% [9].

De plus, à de faibles taux, l'EGR améliore sensiblement la consommation spécifique du moteur (en charge partielle uniquement). Les recherches sur banc d'essai moteur pourvus d'accès optiques à la chambre de combustion ont démontré que l'EGR modifie la physionomie de la combustion (formation du spray, délai d'auto-inflammation,

durée de la combustion) [10]. L'utilisation de l'EGR n'est pas sans contreparties et peut affecter les performances du moteur.

L'inconvénient de l'EGR est son effet sur les émissions de la suie puisqu'à la même pression de tubulure d'admission, l'EGR se substitue à une partie de l'air. Ceci est compensé par des développements dans des systèmes de turbo-remplissage et d'injection comme suggéré par Payri et al [11], qui ont fait fonctionner le moteur à des pressions d'admission plus élevées et à des pressions d'injection plus élevées. Afin de faire fonctionner le moteur aux régimes élevés d'EGR sans augmenter les conditions de pression d'admission, il est nécessaire de refroidir les gaz recyclés pour augmenter leur densité et pour introduire de plus grandes masses pour le même volume.

Le Turbo-remplissage peut augmenter la consommation de carburant aux faibles charges puisqu'il augmente la contre-pression et de ce fait, des pertes de pompage. Les constructeurs ont proposé beaucoup de solutions technologiques telles que les turbines à géométrie variable pour assurer des niveaux plus élevés de pression d'admission et des pertes de pompage inférieures lors des faibles charges [12].

1.5.2 Niveaux de swirl

Le swirl augmente les interactions de mélange air-carburant et par conséquent la réduction des émissions de suie. Pour des applications avec les niveaux variables du swirl, un niveau élevé est employé aux faibles charges et aux faibles vitesses de moteur, où les avantages du swirl sont plus grands, alors qu'un niveau plus bas de swirl est employé pour que des charges plus grandes obtiennent le débit d'air le plus élevé possible, comme décrit par Kawashima et al [13]. L'effet principal du swirl est d'accroître les interactions de combustible gazeux et d'air [14], augmentant de ce fait la partie de carburant brûlée dans la combustion pré-mélangée, sans affecter le délai d'auto-allumage.

L'inconvénient du swirl est la dégradation du rendement volumétrique, malheureusement, les moteurs courants nécessitent différents niveaux de swirl pendant leur fonctionnement, pourtant ils ont rarement des capacités de swirl variables. En pratique il faut chercher un niveau de swirl donnant le meilleur compromis, en termes d'émission de suie, entre le fonctionnement en pleine charge et en charge partielle.

La nécessité de varier le swirl devient moins importante du moment que les systèmes d'injection jouent le plus grand rôle dans le procédé de mélange [15].

1.5.3 Stratégies des systèmes d'injection

Les améliorations des systèmes d'injection représentent peut-être l'opération la plus significative dans l'évolution des moteurs diesel. Une meilleure injection en termes de pulvérisation, évaporation et mélange air-carburant, mène à une combustion plus contrôlée, réduisant les émissions et la consommation de carburant. Afin d'augmenter les interactions air-carburant, les diamètres de trou d'injecteur ont été considérablement réduits, suivant les limitations des contraintes de fabrication et de durabilité car de plus petits trous sont capables de produire de plus petites gouttelettes qui tendent à se vaporiser et se mélanger plus rapidement. Afin de compenser la restriction d'écoulement imposée

par la réduction de diamètre, le nombre de trous est augmenté jusqu'à un compromis entre la taille de trou et le nombre de trous.

La pression d'injection est également en constante élévation puisqu'elle agit de nombreuses façons :

- Elle compense les trous plus petits pour maintenir les régimes d'injection de carburant.
- Elle augmente le niveau du remplissage avant auto-allumage ainsi que les interactions fuel-air qui mènent à réduire les émissions de suie (les émissions de NOx augmentent mais dans une proportion beaucoup plus petite que la réduction des émissions de la suie) [12].
- Elle mène à un entraînement d'air beaucoup plus élevé et par conséquent à un mélange qui réduit des émissions de suie.

1.5.3.1 Injections multiples

Avec l'arrivée de la rampe commune (Common rail), les systèmes d'injection ont porté la possibilité d'exécuter des injections multiples qui donnent la possibilité d'affecter le régime de dégagement de chaleur. Au début, une combinaison d'une injection pilote et une injection principale a été employée mais actuellement, des post-injections sont ajoutées et quelques systèmes sont capables de diviser la quantité de combustible en plus de cinq injections.

1.5.3.2 Injection pilote

L'avantage d'injecter une petite quantité de combustible avant l'injection principale est que la température au début de l'injection principale est plus haute, ce qui réduit le délai d'allumage et ainsi la combustion pré-mélangée de l'injection principale. La réduction de la phase de combustion pré-mélangée réduit le pic de pression et de température et par conséquent, des pertes mécaniques inférieures, des pertes de chaleur inférieures et moins de bruit [16].

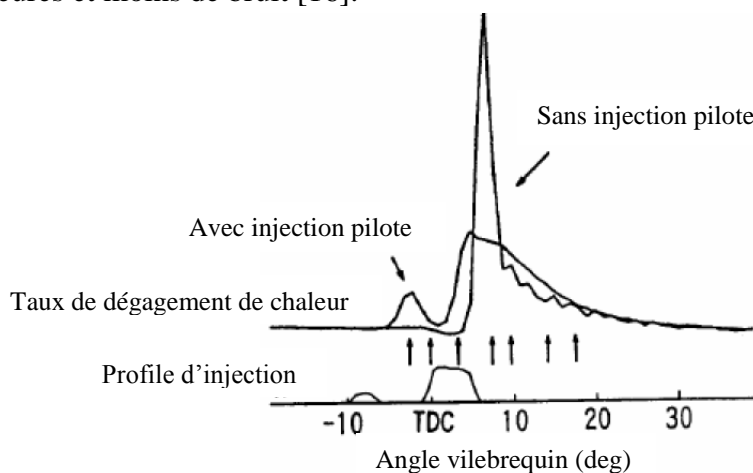


Figure 1.5: Taux de dégagement de chaleur et Profil d'injection

Une stratégie employée couramment pour réduire les émissions de NOx des moteurs diesel est de retarder l'injection. La combustion tardive réduit la pression

maximale et la température moyenne des gaz et ainsi la formation de NO_x. Ce retard est limité par le fait que la température d'air chute pendant la détente et le délai d'allumage devient inadmissiblement long (même des ratés du moteur peuvent se produire) s'ils sont trop longs. La combustion tardive diminue également le rendement thermodynamique et augmente ainsi la consommation de combustible.

Avec l'injection pilote, ce retardement peut être augmenté considérablement. A cause de la combustion pilote, la température de cylindre est plus élevée pendant l'injection principale, l'allumage demeure stable. La combustion pionnière du combustible pilote, conduit à un meilleur dégagement de chaleur et améliorant de ce fait le rendement du carburant pour un niveau donné des émissions de NO_x. Les avantages de l'injection pilote les plus affirmés sont dans la plage de fonctionnement à faible charge [16]. Les émissions de la suie sont en général égales ou légèrement plus hautes puisque le combustible de l'injection principale est injecté dans des produits de combustion de la combustion pilote, avec une concentration en oxygène réduite [17].

1.5.3.3 Post-injection

Pendant que l'injection pilote peut être employée pour abaisser des émissions de NO_x, ajouter une troisième injection (post-injection) peut avoir comme conséquence des réductions significatives des émissions de suie. La post-injection étend de ce fait le processus de combustion plus longtemps dans la course de détente qui retarde la baisse de la température et augmente la turbulence dans la chambre de combustion [17] améliorant de ce fait l'oxydation des suies. Bakenhus et al [18] ont annoncé que l'arrêt de l'enrichissement continu de la partie principale du jet aboutit à améliorer l'utilisation de l'air dans les zones où le combustible est injectée, introduisant une combustion rapide et des régimes élevés d'oxydation.

La post-injection a été vérifiée par beaucoup de groupes de recherche. Souvent, des réductions de la suie jusqu'à 50 % ont été trouvées, avec pratiquement aucun changement de NO_x.

Dans l'optique d'optimisation des différentes stratégies évoquées précédemment, beaucoup de travaux ont été effectués :

R. D. Reitz et C. J. Rutland, 1995 [19] ont effectué une investigation expérimentale et une étude numérique sur les moteurs diesel. Une revue détaillée sur le développement des modèles implémentés dans le code KIVA-3 est présenté (la combustion, le jet, la turbulence, la formation des NO_x, des suies et l'allumage sont représentés par les modèles suivants : modèle de flamlet, TAB, RNG k-ε modifié proposé par Reitz et Han, Zeldovich, Hiroyasu, et le modèle de Shell respectivement), afin d'étudier les processus au sein de la chambre de combustion. Ils ont obtenu un excellent accord avec les données expérimentales. En mettant l'accent sur l'influence de l'injection pilote dans les moteurs Diesel sur la combustion et les couples NO_x-Suies, l'analyse des résultats montre que l'injection pilote réduit la formation des couples NO_x-suies de manière significative.

F. Haddad, Z. Nemouchi, M. S. Boulahlib [20] ont étudié la dynamique et l'énergétique des gouttelettes dans une chambre de combustion d'un moteur Diesel à injection directe lors de l'injection et la combustion du spray à l'aide du code de calcul KIVA II. L'évolution du spray est simulée en utilisant la fonction densité de probabilité et la technique stochastique a été utilisée pour faire la résolution de l'équation du spray. Cette approche est composée de la méthode de Monté Carlo et la méthode discrète de la particule. Le modèle de turbulence $k-\varepsilon$ tenant compte de l'effet de l'interaction turbulence-spray a été employé.

En l'an 2000, B. Ramadan [21] au moyen de la simulation numérique avec le code KIVA-3V s'est intéressé à deux configurations géométriques différentes pour la génération de Swirl dans les moteurs Diesel à injection directe. L'étude a indiqué qu'il y a une grande influence de la géométrie sur le champ de vitesse.

En 2001, D.Jung et D.N.Assanis [22] ont développé et implémenté un modèle quasi-dimensionnel, multi-zones de combustion pour les moteurs diesel suralimentés à injection directe, pour l'étude et la simulation des performances et les émissions. Une corrélation modifiée de Hiroyasu pour la pénétration de jet montre la bonne concordance avec des données expérimentales. L'étude numérique a indiqué l'influence de la charge, de la vitesse de rotation de moteur, de la pression d'injection et de la durée d'injection sur les performances et la formation des polluants.

En 2004, A. Broatch et al [23] ont étudié l'influence de l'injection (injection pilote, taux d'injection), le Bowl, la charge, et le régime du moteur sur la combustion et la réduction des émissions des polluants dans les moteurs Diesel.

En 2005, W. L.Cheng et al [24] ont mené une étude expérimentale et numérique sur la combustion et les NOx dans les moteurs diesel HSDI. Dans ce travail, la combustion est représentée par un modèle d'échelle de temps de pré-mélange laminaire. Le code KIVA3V-R2 a été pris comme outil de travail, ce travail met l'accent sur l'influence de l'EGR et la température de combustion sur la formation des NOx. Les résultats ont été validés par une comparaison avec des données expérimentales. La synthèse des résultats a prouvé que l'augmentation de l'EGR, et la réduction de la température de combustion réduisent les NOx.

De même en 2005, C.A.Chryssakis, D.N.Assanis [25] ont mené des investigations expérimentales numériques sur les moteurs Diesel ID commun Rail. Dans cette étude ils ont traité l'influence du nombre de trous d'injecteur, de l'injection pilote et multiple, sur la formation de mélange, les NOx, HC, et CO, en utilisant le modèle de suie développé par Hiroyasu et modifié par Han et autres [26] pour modéliser la formation des suies et le modèle de temps caractéristique pour représenter la combustion. Les résultats expérimentaux et numériques montrent que dans le cas d'injection multiple, la fumée et les NOx diminuent, et dans le cas d'injection pilote les résultats donnent un bon mélange qui implique une bonne combustion, avec la réduction des NOx, mais une légère augmentation de suie. Les résultats de simulation sont obtenus à l'aide du code multidimensionnel KIVA-3V.

Toujours en 2005, T.J.Jacobs et al [27] ont effectué une étude expérimentale concernant la réduction des émissions des polluants (NO_x, HC, et CO), et la consommation de fuel. En variant la durée d'injection et l'EGR. Les résultats sont comparés avec les données d'un diesel conventionnel classique. Les expériences montrent clairement que ces investigations donnent des résultats très intéressants sur la réduction des polluants.

En 2006, Haiyong Peng et al [28] ont montré avec des études expérimentales et numériques que la variation de l'EGR pendant le démarrage à froid du moteur diesel ID donne une influence claire sur la combustion et la réduction des NO_x-Suies.

En 2007, Cenk Sayin et al [29] ont effectué des investigations expérimentales sur un moteur Diesel. L'analyse des résultats montre l'antagonisme des évolutions des NO_x et suies, et expose clairement l'influence du temps d'injection sur la formation des NO_x-CO₂ et la réduction des CO-HC.

En 2008, D.T. Hountalas et al [30], Alain Maiboom et al [31], montrent que la variation de la température de l'EGR a une influence directe sur les performances des moteurs ID, et la formation des émissions polluantes.

Toujours en 2008, H. Bousbaa [32] a réalisé une étude sur la combustion turbulente dans un moteur Diesel turbocompressé, au moyen du code KIVA 3v, il a comparé les résultats de simulation en utilisant deux mécanismes réactionnels. Le premier étant un schéma cinétique réduit d'une réaction de DF2 et le second est celui de Meintjes-Morgan (schéma à six équations d'équilibre). Il a montré la capacité de ce dernier à prédire le phénomène de combustion dans une chambre de combustion d'un moteur Diesel.

En 2009 M. Bencherif et al [4] ont mené une étude concernant l'effet de l'instant d'injection, la durée d'injection, le diamètre du bowl et le taux d'EGR sur les émissions des NO_x et des suies ainsi que sur les performances mécaniques. La simulation numérique a indiqué qu'il y a une grande influence de ces paramètres sur la combustion et la réduction des polluants.

Dans le but de s'approcher du fonctionnement HCCI, M.Coppo et al [33] ont examiné l'effet de différents modes de multi-injection dans un moteur diesel. L'analyse est basée sur les conditions de combustion, sur les émissions du moteur, sur l'efficacité thermique et la distribution d'énergie. Les résultats expérimentaux prouvent que la combustion diesel HCCI est extrêmement sensible aux modes d'injection multi-pulse. Il y a beaucoup de modes qui peuvent presque atteindre zéro émission de NO_x et de suie, mais ils doivent être soigneusement conçus pour que le rendement thermique puisse être amélioré sensiblement avec certains modules.

Afin de respecter les futurs règlements d'émissions, H.Yun et R.D.Reitz ont expérimenté en 2007 [34] le nouveau concept de systèmes diesel à basse température de combustion. De basses émissions de NO_x sont réalisées par la minimisation des

températures maximales pendant le processus de combustion. Concomitamment, la formation de suie est inhibée par une combinaison des basses températures de combustion et une charge air-carburant largement pré-mélangée. L'effet de la post-injection sur les modes opératoires en dehors des conditions de fonctionnement de base (combustion à basse température 1500 tr/min, 3 bars IMEP avec un taux 50% d'EGR) a été examinée. La prolongation à des charges élevées a été envisagée, les stratégies de post-injection ont donné des résultats très favorables d'émission dans le régime à basse température de combustion à toutes les charges considérées dans cette étude puisque, la post-injection mène à l'amélioration du mélange. D'autres réductions des émissions de suie ont été réalisées sans détériorer les émissions de NOx avec de plus petites quantités de carburant injectées dans la deuxième impulsion. Cependant, la détermination de l'angle de saturation entre les injections s'est avérée très importante pour les émissions.

J.Boulanger et al [35] ont mené des simulations en renforçant un sous-modèle phénoménologique pour que la formation de suie inclue les effets d'agglomération près de la paroi. Le sous-modèle amélioré a été incorporé dans un CFD commercial et a été employé pour étudier la formation de suie dans un moteur diesel. Les résultats de la simulation numérique, compatibles aux données expérimentales, prouvent que le processus d'oxydation de suie est réduit près des parois de la chambre de combustion, en raison de la perte de chaleur et de plus grandes particules et faisceaux de suie sont prévus en volume annulaire à la fin du cycle de combustion.

D.Jung et D.N.Assanis [36] ont rapporté le développement et la validation des modèles phénoménologiques pour prévoir les émissions de moteur diesel à injection directe, y compris l'oxyde nitrique (NO), les suies, et les hydrocarbures non brûlés (HC) en utilisant une pleine simulation du cycle de moteur. Les auteurs ont perfectionné la simulation du cycle développé plus tôt [22] qui comporte un modèle multizones, pour expliquer l'évolution transitoire du jet, le mélange carburant-air, l'auto-allumage et la combustion. Le mécanisme de Zeldovich est employé pour prévoir les émissions de NO. La formation et l'oxydation de suie est calculée avec un modèle semi-empirique, à deux équations. Les modèles de calcul pour les émissions de HC non brûlés expliquent trois sources importantes de HC dans les moteurs diesel : (1) carburant penché-dehors pendant le délai d'allumage, (2) carburant restitué par le trou d'injecteur et (3) carburant pénétrant vers la paroi. Les modèles d'émissions ont été validés contre des données expérimentales obtenues à partir de différents moteurs diesel à injection directe représentatifs. Les résultats de simulation montrent que les modèles peuvent prévoir les émissions avec une exactitude raisonnable. Après validation, l'utilité de la simulation comme outil de conception pratique est démontrée avec une étude de cas de l'effet du coefficient de décharge du bec d'injecteur sur des émissions de polluants.

Chapitre 2

Phénoménologie et Modélisation de la combustion

Les réactions chimiques sont le résultat d'un changement de la configuration électronique de deux réactifs à l'échelle moléculaire, qui peut conduire à former ou à casser des liaisons chimiques. Pour réaliser une combustion efficace il faut mélanger complètement les réactifs. Or, porter ces deux réactifs, à savoir le carburant et l'oxygène, dans une grande proximité l'un à l'autre à l'échelle moléculaire, reste un challenge dans la conception de n'importe quel système de combustion avancé.

Dans les applications industrielles, la majorité des combustibles utilisés sont des mélanges de plusieurs espèces chimiques. Chacune de ces espèces réagit avec l'oxygène en relâchant une quantité de chaleur respective à cette réaction. Ces réactions ne se produisent pas en une simple étape mais constituent plusieurs étapes élémentaires concernant beaucoup d'espèces intermédiaires. La connaissance de telles opérations et espèces intermédiaires est nécessaire pour comprendre le comportement exact de combustion des carburants.

La nature des écoulements à l'intérieur des systèmes de combustion varie, du laminaire dans certains cas au turbulent dans la majorité des équipements industriels. L'écoulement des fluides peut avoir des caractères supplémentaires. Il peut être compressible, tourbillonnant, et instationnaire ou une combinaison de ces caractères. Ces caractéristiques de l'écoulement affectent la manière et l'ampleur auxquelles les molécules du combustible et de l'oxydant se mettent en contact.

Ainsi, en plus de la connaissance de la chimie détaillée et du comportement turbulent du processus de la combustion, il est également nécessaire de disposer d'une méthode descriptive pour simuler les interactions entre les deux (à savoir l'interaction turbulence-chimie).

La reproduction des détails minutieux de la turbulence est réalisable grâce à l'approche DNS, approche très couteuse en temps et financièrement. De même, l'utilisation d'un mécanisme réactionnel détaillé, écrit en considérant toutes les espèces intermédiaires possibles et toutes les réactions éventuelles entre ces espèces, n'est pas une démarche envisageable car le nombre de réactions deviendrait rapidement énorme. Les espèces doivent donc être sélectionnées d'une part en prenant en compte au moins toutes les espèces dosées expérimentalement et d'autre part à partir de considérations thermodynamiques.

Cependant, pour l'optimisation efficace des systèmes énergétiques, un compromis entre l'exactitude et la durée de calcul est toujours demandée, approches RANS et LES.

Durant les dernières années, le nombre de travaux consacrés à la modélisation et aux simulations numériques des moteurs à combustion interne n'a cessé de croître. La modélisation des moteurs dans l'optique du contrôle ou du diagnostic des performances énergétiques et environnementales implique des chercheurs issus de champs disciplinaires très différents.

Un modèle est une abstraction, sous forme mathématique, d'un phénomène observé. Il joue un rôle fondamental dans toute démarche scientifique; il fait poste de jonction entre l'objet et la science, c'est-à-dire entre le réel et l'abstrait. En fait, la modélisation est étroitement liée au besoin péremptoire non seulement de mieux comprendre mais aussi de maîtriser notre environnement.

Ce chapitre englobe l'essentiel des techniques de modélisation reposant sur les lois de la physique ainsi que les modèles purement empiriques. Ces deux catégories sont largement explicitées dans la littérature scientifique, notamment dans les ouvrages de Heywood [1], de Warnatz [37], Norbert [38], Baumgarten [39] et autres.

Dans la suite on expose les équations qui gouvernent la phase gazeuse, la phase liquide suivies par les modèles physiques « Turbulence, transfert de chaleur... », les modèles chimiques « Combustion, Allumage, et Formations des Polluants ».

Equations gouvernant la combustion

En plus des équations qui gouvernent un écoulement tridimensionnel d'un fluide, des équations supplémentaires pour modéliser le jet, la chimie et la turbulence sont nécessaires dans le cas des écoulements réactifs avec spray telle que la combustion dans les moteurs diesel.

2.1 Phase gazeuse [40,41]

A l'égard d'une équation d'état, la phase gazeuse, est régit par les équations de conservation, qui forment un système composé des équations de conservation de la masse (des espèces chimiques), de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie.

L'équation de bilan pour une variable ϕ peut s'écrire sous une forme générale contenant des termes dus à la convection, à la diffusion, et les termes sources:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}\phi) = \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) + S_\phi \quad (2.1)$$

Accumulation Convection Diffusion Source

\vec{u} est le vecteur vitesse, Γ_ϕ est le coefficient de diffusion.

2.1.1 L'équation de conservation de l'espèce chimique

La fraction massique pour chaque espèce, m , est déterminée par la résolution de l'équation de transport de la forme (2.2) :

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \vec{u}) = \nabla \cdot \left[\rho D \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \right] + \dot{\rho}_m^c + \dot{\rho}_m^s \delta_{m1} ; \quad m = 1 \div n \quad (2.2)$$

ρ_m est la masse volumique de l'espèce m , ρ la masse volumique totale, $\dot{\rho}_m^c$ et $\dot{\rho}_m^s$ sont les termes sources dus respectivement à la chimie et au spray, u est la vitesse du fluide.

Le coefficient de diffusion est donné par $D = \frac{\mu}{\rho S_c}$

μ est la viscosité dynamique et S_c est le nombre de Schmidt (le nombre de Schmidt estime les effets de la viscosité par rapport aux effets de la diffusion), $S_c = \frac{\nu}{D}$

2.1.2 L'équation de conservation de la masse totale

La sommation des équations (2.2) pour toutes les espèces chimiques donne l'équation de la masse volumique totale du fluide (équation de continuité)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = \dot{\rho}^s \quad (2.3)$$

2.1.3 L'équation de conservation de la quantité de mouvement

L'équation de bilan de la quantité de mouvement pour le mélange fluide est donné par:

$$\frac{\partial (\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\frac{1}{\alpha^2} \nabla p - A_0 \nabla \left(\frac{2}{3} \rho k \right) + \nabla \cdot \sigma + \vec{F}^s + \rho \vec{g} \quad (2.4)$$

Où le tenseur des contraintes visqueuses est de forme newtonienne :

$$\sigma = \mu \left[\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T \right] - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{u}) \vec{I} \quad (2.5)$$

F^s est le gain du taux de quantité de mouvement par unité de volume dû au spray. La quantité α est utilisée en conjonction avec la méthode de l'échelle de gradient de pression PGS (Pressure Gradient Scaling). Cette méthode sert à augmenter l'efficacité de calcul pour les écoulements à faibles nombres de Mach, où la pression est presque uniforme. La quantité A_0 , dans l'équation (2.4), est égale à zéro pour les écoulements laminaires, et à l'unité si l'un des modèles de turbulence est utilisé.

2.1.4 L'équation de conservation d'énergie

L'équation de conservation de l'énergie s'écrit :

$$\frac{\partial \rho I}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} I) = -p \nabla \cdot \vec{u} + (1 - A_0) \sigma : \nabla \vec{u} - \nabla J + A_0 \rho \varepsilon + \dot{Q}^c + \dot{Q}^s \quad (2.6)$$

Le vecteur du flux thermique J est la somme des contributions dues à la conduction thermique, à la diffusion de l'enthalpie, il peut inclure un troisième terme dû au rayonnement.

$$J = -K \nabla T - \rho D \sum_m h_m \nabla (\rho_m / \rho) \quad (2.7)$$

I : énergie interne, h_m est l'enthalpie spécifique de l'espèce m , K est la conductivité thermique, calculée à partir du nombre de Prandtl et la chaleur spécifique à pression constante :

$$K = \frac{\mu C_p}{P_r} \quad (2.8)$$

La chaleur spécifique du mélange est calculée avec la relation:

$$C_p(T) = \sum_m \frac{\rho_m}{\rho} C_{p_m}(T) \quad (2.9)$$

2.1.5 L'équation d'état

L'équation d'état donne l'équation supplémentaire pour relier la température, la pression et la masse volumique. L'une des équations d'état les plus simples à cette fin est la loi des gaz parfaits. Cette loi est acceptable pour le cas des gaz réels à basses pressions et à températures élevées. Cependant, cette équation devient de plus en plus imprécise à des pressions plus élevées et des températures plus basses [42]. A des pressions normales, le volume occupé par les particules de gaz est négligeable devant le volume total du gaz. Mais aux grandes pressions, ceci n'est plus vrai et le comportement des gaz réels à fortes pressions s'éloigne de celui des gaz parfaits.

En 2007 R. Algrave [42] dans ses travaux de simulation sur la combustion dans les moteurs diesel a introduit une correction à la loi des gaz parfaits sur la base de l'équation d'état de Redlich-Kwong qui n'a produit aucun changement significatif (différence de moins de 2%) dans les profils de pression et de température. De ce fait le fluide est supposé comme un mélange homogène de gaz parfait, et on peut écrire les relations suivantes :

$$p = R_0 T \sum_m (\rho / W_m) \quad (2.10) \quad I(T) = \sum_m (\rho_m / \rho) I_m(T) \quad (2.11)$$

$$Cp(T) = \sum_m (\rho_m / \rho) c_{pm}(T) \quad (2.12) \quad h_m(T) = I_m(T) + R_0 T / W_m \quad (2.13)$$

W_m est la masse moléculaire de l'espèce m , $I_m(T)$ est son énergie spécifique interne.

La chaleur spécifique des espèces Cp_m , les enthalpies spécifiques h_m , sont issues de la base des données thermodynamiques JANAF.

2.2 Equations de l'écoulement moyen

La solution numérique complète des équations instantanées de l'écoulement est une tâche très ardue et elle n'est réalisable que si toutes les échelles de temps et de longueur sont résolues. Ceci est limité à quelques cas relativement simples.

Pour beaucoup d'applications, seules les grandeurs moyennes des écoulements ont une importance, les valeurs instantanées le sont beaucoup moins. On ne s'intéresse alors qu'à ces valeurs moyennes et on utilise la décomposition de Reynolds qui consiste à séparer chaque variable de l'écoulement en la somme de sa moyenne d'ensemble (moyenne de Reynolds) et de sa fluctuation.

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (2.14) \quad \bar{\phi} = \lim_{Ns \rightarrow \infty} \sum_{m=1}^{Ns} \frac{\phi^{(m)}}{Ns} \quad (2.15)$$

L'application de cette moyenne aux équations de conservation, fait apparaître des termes représentant la composante turbulente de l'écoulement, qui ne sont pas connus à priori telle que la corrélation $\overline{u' \phi'}$. La fermeture du problème consiste à les modéliser (Reynolds Averaged Navier-Stokes).

Dans le cas des écoulements compressibles, le cas du moteur diesel, le dégagement de chaleur provoque de grandes fluctuations de la densité dont l'influence devient importante et la solution des équations moyennées de Reynolds devient plus

difficile (introduction des corrélations $\overline{\rho'\phi'}$). La modélisation de ces termes, peut être évitée si l'on introduit une moyenne pondérée par la masse appelée "moyenne de Favre".

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \qquad \tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\rho} \qquad (2.16)$$

La décomposition de Favre appliquée aux équations de Navier-Stokes donne un nouveau système d'équations, semblable au système d'équations initiales (2.2) à (2.6) [32.42] :

Y_m étant la fraction de masse de l'espèce m $\rho_m = \rho Y_m$.

L'équation de conservation de l'espèce m :

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{Y}_m}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{Y}_m \tilde{u}}) = \nabla \cdot [\overline{\rho D \nabla Y_m} - \overline{\rho \tilde{u}'' Y''}] + \overline{\rho \dot{Y}_m^c} + \overline{\rho \dot{Y}_m^s} \qquad (2.17)$$

L'équation de conservation de la masse totale :

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{u}}) = \overline{\dot{\rho}_m^s} \qquad (2.18)$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial (\overline{\rho \tilde{u}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{u} \tilde{u}}) = \nabla \cdot (\overline{\sigma} - \overline{\rho \tilde{u}'' \tilde{u}''}) - \nabla \tilde{p} + \overline{F^s} + \overline{\rho \tilde{g}} + A_0 \nabla (2/3 \rho k) \qquad (2.19)$$

L'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{I}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{u} \tilde{I}}) = - \tilde{p} \nabla \cdot \tilde{u} - \nabla \cdot (\overline{\tilde{J}} + \overline{\rho \tilde{u}'' \tilde{I}''}) + A_0 \overline{\rho \tilde{\epsilon}} + \overline{\dot{Q}^c} + \overline{\dot{Q}^s} \qquad (2.20)$$

2.3 Phase liquide

2.3.1 Modélisation du Jet

Le jet liquide issu de l'orifice de l'injecteur doit être réduit en de fines gouttelettes, qui vont s'évaporer facilement et favoriser ainsi le mélange et la combustion. Transformer le jet liquide en "spray" (nuage de gouttelettes) c'est l'atomiser. Cette transformation s'effectue en deux étapes. Le fractionnement primaire du jet produit des gouttes directement à partir de la colonne liquide. Le fractionnement secondaire divise ces gouttes issues du fractionnement primaire en gouttes encore plus petites. Les gouttelettes injectées dans le cylindre peuvent subir un ou plusieurs processus à savoir, l'atomisation, la collision et l'évaporation. Par conséquent, on exige des modèles qui décrivent ces processus (atomisation, collision, et évaporation).

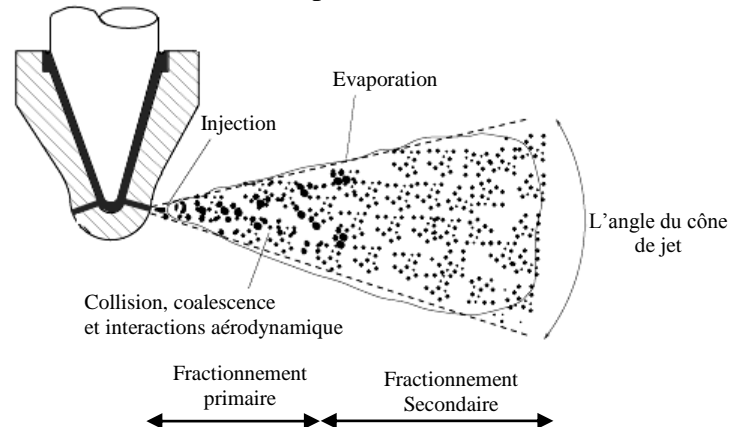


Figure 2.1: Schéma représentant le Jet à la sortie de l'injecteur

2.3.2 Formulation Mathématique [20.32.41]

Pour calculer la masse, la quantité de mouvement, et l'échange d'énergie entre le spray et le gaz, on doit présenter une distribution des tailles, des vitesses, et des températures de gouttes. Dans la plupart des sprays, les nombres de Weber de la goutte sont plus grands que l'unité, et les oscillations, les distorsions et la fragmentation des gouttes doivent être considérées. Les collisions et les coalescences des gouttes se sont avérées importantes dans la modélisation des sprays dans un moteur.

Une formulation mathématique basée sur une technique discrète de Monte Carlo est capable de représenter ces processus physiques complexes.

f est une fonction de densité de probabilité telle que :

$$f = f(\vec{x}, \vec{v}, r, T_d, y, \dot{y}, t) d\vec{v} dr dT_d dy \dot{y} \quad (2.21)$$

qui représente le nombre probable de gouttelettes par unité de volume à la position \vec{x} et au temps t . Elle est fonction de dix variables indépendantes en plus du temps :

Les trois coordonnées spatiales \vec{x} . Les trois composantes de vitesse \vec{v} .

Le rayon d'équilibre d'une gouttelette r . La température d'une gouttelette T_d .

La déformation de la sphéricité y .

La vitesse de déformation d'une gouttelette $\dot{y} = \frac{dy}{dt}$

L'équation du spray s'écrit:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot (f\vec{v}) + \nabla_{\vec{v}} \cdot (f\vec{F}) + \frac{\partial}{\partial r} (fR) + \frac{\partial}{\partial T_d} (f\dot{T}_d) + \frac{\partial}{\partial y} (f\dot{y}) + \frac{\partial}{\partial \dot{y}} (f\ddot{y}) = \dot{f}_{coll} + \dot{f}_{bu} \quad (2.22)$$

$\vec{F} = \frac{d\vec{v}}{dt}$, $R = \frac{dr}{dt}$, $\dot{T}_d = \frac{dT_d}{dt}$ et $\ddot{y} = \frac{d\dot{y}}{dt}$ sont les taux de changements liés à une gouttelette. \dot{f}_{coll} et \dot{f}_{bu} sont des termes sources dus aux collisions et au fractionnement de la gouttelette, voir annexe [A].

2.3.3 Interaction Jet- Gaz

Les termes sources dus au jet dans les équations de la phase gazeuse (2.17 à 2.20) et dans l'équation de transport du taux de dissipation ε (2.28) sont donnés de la manière suivante:

$$\overline{\rho \dot{Y}_m^S} = - \int f \rho_d 4\pi r^2 R d\vec{v} dr dT_d dy \dot{y} \quad (2.23)$$

$$\overline{\vec{F}^S} = - \int f \rho_d \left(4/3\pi r^3 \vec{F} + 4\pi r^2 R \vec{v} \right) d\vec{v} dr dT_d dy \dot{y} \quad (2.24)$$

$$\overline{Q^S} = - \int f \rho_d \left(4\pi r^2 R \left[E_1(T_d) + \frac{1}{2}(\vec{v} - \vec{u})^2 + \frac{4}{3}\pi r^3 \left[C_{p1} \dot{T}_d + \vec{F}(\vec{v} - \vec{u} - \vec{u}^{\vec{n}}) \right] \right] \right) d\vec{v} dr dT_d dy \dot{y} \quad (2.25)$$

$$\overline{W^S} = - \int f \rho_d \frac{4}{3}\pi r^3 \vec{F} \vec{u}^{\vec{n}} d\vec{v} dr dT_d dy \dot{y} \quad (2.26)$$

2.4 Les Modèles physiques

Les modèles employés pour décrire les divers processus physiques dans la simulation du moteur diesel sont décrits ci-après. Ces modèles, utilisés en conjonction avec les modèles chimiques et les équations gouvernantes, complètent la formulation mathématique nécessaire pour simuler le processus de combustion dans un moteur diesel.

2.4.1. Turbulence

Dans certains cas simples on peut aujourd'hui faire de la simulation directe, c'est-à-dire mettre en œuvre directement les équations de bilans avec des conditions aux limites et initiales connues. Mais, dans la plupart des applications, on est conduit à faire une modélisation des effets des petites structures de turbulence.

Les modèles basiques développés sont pour l'essentiel les suivants:

- tension de Reynolds (fermeture au second ordre).
- viscosité turbulente (fermeture algébrique ou transport $k - \varepsilon$).
- spectraux (ou fermeture en deux points - corrélation de vitesses entre 2 points).

Seuls les modèles utilisés dans le code KIVA sont rappelés ici.

2.4.1.1 Le Modèle de Turbulence $k-\varepsilon$ [32,41]

L'approche consiste à représenter les propriétés de la turbulence à l'aide des échelles de vitesse et de longueur caractéristiques des fluctuations. L'échelle de vitesse est obtenue par l'intermédiaire de l'énergie cinétique turbulente (k). L'échelle de longueur, quant à elle est plus délicate à définir et l'on a recours à une nouvelle équation de transport portant sur le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente. Ce taux de dissipation est relié, par l'intermédiaire de l'hypothèse de l'unicité de l'échelle des temps, à l'échelle de longueur. En définitif deux équations de transport additionnelles sont résolues pour l'énergie cinétique k et le taux de dissipation ε .

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{k}) = -\frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \nabla \cdot \tilde{u} + \bar{\sigma} : \nabla \tilde{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{pr_k} \right) \nabla \tilde{k} \right] - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} + \bar{W}^s \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\varepsilon}) = & - \left(\frac{2}{3} c_{\varepsilon 1} - c_{\varepsilon 3} \right) \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \nabla \cdot \tilde{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{pr_\varepsilon} \right) \nabla \tilde{\varepsilon} \right] \\ & + \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \left[c_{\varepsilon 1} \bar{\sigma} : \nabla \tilde{u} - c_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} + c_s \bar{W}^s \right] \end{aligned} \quad (2.28)$$

Ce sont les équations $k - \varepsilon$ standards avec quelques termes additionnels. Le terme source $(c_{\varepsilon 3} - \frac{2}{3} c_{\varepsilon 1}) \nabla \cdot \tilde{u}$ dans l'équation (2.28) explique le changement de l'échelle des

longueurs en présence d'une vitesse de dilatation. Le terme source \bar{W}^s est dû à l'interaction avec le spray et les valeurs des constantes sont déterminées à partir des travaux expérimentaux, en respectant quelques considérations théoriques.

2.4.1.2 Le Modèle de Turbulence *RNG* $k-\varepsilon$ [40,42]

Ce modèle appelé *RNG* $k-\varepsilon$ (Yakhot et Orszag 1986), utilise une théorie différente des techniques statistiques classiques. La taille des échelles turbulentes est prise en compte pour déterminer la part de l'énergie qui sera transportée et celle qui sera dissipée. Les petites échelles de turbulence qui dissipent toute leur énergie sont modélisées alors que les grandes échelles de turbulence sont étudiées précisément. Cette modélisation aboutit à des équations très proches de celles du modèle $k-\varepsilon$ standard. La principale différence vient des constantes qui ne sont plus déterminées expérimentalement mais calculées théoriquement.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\varepsilon}) = & - \left(\frac{2}{3} c_{\varepsilon 2} - c_{\varepsilon 3} - \frac{2}{3} c_{\mu} c_{\eta} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \nabla \tilde{u} \right) \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \cdot \nabla \tilde{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{Pr_{\varepsilon}} \right) \nabla \tilde{\varepsilon} \right] \\ & + \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \left[(c_{\varepsilon 1} - c_{\eta}) \sigma : \nabla \tilde{u} - c_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} + c_s \bar{W}^s \right] \end{aligned} \quad (2.29)$$

Avec:

$$c_{\eta} = \frac{\eta(1 - \eta/\eta_0)}{1 + \beta\eta^3} \quad (2.30) \quad \eta = \frac{Sk}{\varepsilon} \quad (2.31)$$

$$S = (2S_{ij}S_{ij})^{1/2} \quad (2.32) \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.33)$$

Les valeurs standards des constantes utilisées dans les calculs des moteurs sont données sur le tableau suivant:

Constante		$c_{\varepsilon 2}$	$c_{\varepsilon 3}$	c_s	Pr_k	Pr_{ε}	η_0	β	c_{μ}
Standard $k-\varepsilon$	1.44	1.92	-1.0	1.5	1.0	1.3	-	-	0.09
RGN $k-\varepsilon$	1.42	1.68	-	1.5	0.719	0.719	4.38	0.012	0.0845

Tableau 2.1 : Valeurs des constantes utilisées dans les modèles de turbulence $k-\varepsilon$ et *RNG* $k-\varepsilon$

2.4.1.3 Le Modèle *SGS*

Le modèle *SGS* est le modèle initial de KIVA [32]. Il s'inspire du fait que la turbulence à petite échelle a un caractère beaucoup plus universel que les mouvements à grande échelle. Dans ces conditions, l'idée est de calculer les mouvements à grande échelle et de recourir à la modélisation pour évaluer l'effet des petites échelles sur les grandes. Lorsque le modèle de turbulence *SGS* (subgrid scale) est utilisé, la valeur de ε doit satisfaire l'équation suivante [41] :

$$\varepsilon \geq \left[\frac{c_{\mu}}{Pr_{\varepsilon}(c_{\varepsilon 2} - c_{\varepsilon 1})} \right]^{1/3} \frac{k^{3/2}}{L_{SGS}} \quad (2.34)$$

L_{SGS} est une longueur *SGS* donnée, et dont la valeur typique est prise égale à $4\delta x$, où δx est une dimension représentative calculée de la cellule.

2.4.2 Transfert thermique

Le mécanisme du transfert de chaleur dans des moteurs diesel suit un mode triple, à savoir : la conduction dans le film proche de la paroi, la convection dans la phase gazeuse et le rayonnement dans des régions à hautes températures et aux zones riches en suie. La compréhension de ces modes est très importante vu qu'ils influent sur le rendement et les émissions. Dans ce qui suit, on n'expose que le transfert de chaleur à travers la paroi, le mode principal de transfert thermique dans les moteurs.

2.4.2.1 Loi de paroi [32,43]

Une manière traditionnelle pour traiter le transfert de chaleur à travers la paroi est basée sur l'analogie de Reynolds. Une mise à jour a été implantée dans KIVA-3V, conforme étroitement à l'expression d'origine proposée par Launder et Spalding, est donnée dans la section suivante:

$$Q_w = \frac{\rho v_l c_p}{Pr_l} \frac{u^*}{y} (T - T_w) \quad (2.35)$$

$$u^* = \begin{cases} \frac{y^* Pr_l^* RPR}{1/k \ln y^* + B + 11.05(Pr_l^* RPR - 1)} & y^* > 11.05 \\ 1.0 & y^* < 11.05 \end{cases} \quad (2.36)$$

Et

$$y^* = \frac{c_\mu^{1/4} K^{1/2} y}{v_l} \quad (2.37)$$

Dans ces équations, v_l est la viscosité cinématique laminaire de l'air, Pr_l est le nombre de Prandtl laminaire, K est le constante de Von Karman, RPR est le réciproque du nombre de Prandtl turbulent, T_w est la température de paroi, T étant la température de gaz, et k est l'énergie cinétique turbulente.

2.5 Les Modèles chimiques

Plusieurs décennies de recherche ont apporté des méthodes mathématiques et numériques pour le traitement de la nature complexe des réactions chimiques. Celles-ci incluent la modélisation de la cinétique chimique détaillée, le calcul d'équilibre et la solution des équations de bilan des espèces chimiques dans les écoulements à géométries relativement simples.

Les réactions de combustion provoquent plusieurs polluants tels que les suies, les NOx et HC. La prédiction précise de ces polluants exige que tout le détail des réactions chimiques soit comporté dans la simulation de l'écoulement. Ceci devient très pénalisant pour les cas des écoulements turbulents. L'utilisation d'une approche simpliste pour la simulation des réactions peut donner de bons résultats en ce qui concerne la configuration de l'écoulement, le taux de dégagement et de chaleur et en fournissant des résultats acceptables pour les phénomènes complexes tels que le délai d'allumage et la formation des polluants.

2.5.1 Mécanismes réactionnels détaillés

Un mécanisme réactionnel est une collection de réactions élémentaires. Une réaction élémentaire est une réaction qui se produit exactement comme elle est représentée par une équation, tout différemment des réactions globales ou complexes, et elle ne peut pas être encore décomposée en réactions constitutives.

Les mécanismes réactionnels décrivent comment toute réaction a lieu à un niveau moléculaire, quelles liaisons seront cassés ou formés et dans quel ordre, quel est le taux de progression des chaque étape. Par conséquent, la connaissance des propriétés des réactifs et des produits est exigée [42]. Chaque étape du mécanisme comporte une combinaison d'espèces. La dépendance de ces étapes aboutit à l'équilibre stœchiométrique de l'équation de la réaction chimique globale. Pour qu'un mécanisme réactionnel soit considéré valide, il faut qu'il satisfasse le caractère précédent, et il faut encore que ses prévisions intermédiaires (espèces et taux de progressions des réactions élémentaires) ne fassent pas contradiction aux observations expérimentales.

D'une manière générale une réaction peut être représentée avec :



où x_m représente une mole de l'espèce m , et $a_{m,r}$ et $b_{m,r}$ sont les coefficients stœchiométriques intégraux de la réaction r

La réaction r progress à un taux de réaction $\dot{\omega}_r$ donné par :

$$\dot{\omega}_r = k_{fr} \prod_m (\rho_m / M_m)^{a_{mr}} - k_{br} \prod_m (\rho_m / M_m)^{b_{mr}} \quad (2.39)$$

Avec k_{fr} et le k_{br} les taux de réaction, respectivement vers l'avant et vers arrière, ils sont de la forme généralisée d'Arrhenius.

$$k_{fr} = A_{fr} T^{n_{fr}} \exp\left(-\frac{E_{fr}}{RT}\right) \quad (2.40)$$

$$k_{br} = A_{br} T^{n_{br}} \exp\left(-\frac{E_{br}}{RT}\right) \quad (2.41)$$

là où A est le facteur pré-exponentiel, n est l'exposant de la température et E est l'énergie d'activation. Les termes sources dans l'équation de conservation de l'espèce (équation 2.2) et dans l'équation d'énergie (équation 2.6) peuvent être maintenant définis comme :

$$\dot{\rho}_m^c = M_m \sum (b_{mr} - a_{mr}) \dot{\omega}_r \quad (2.42)$$

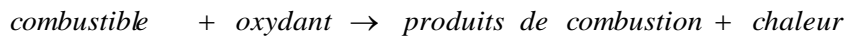
$$\dot{Q}^c = \sum_r \dot{\omega}_r \sum_m (b_{mr} - a_{mr}) (\Delta h_f^0)_m \quad (2.43)$$

où $(\Delta h_f^0)_m$ est la chaleur de formation standard de l'espèce m . Les paramètres, tels que A , n et E sont obtenus à partir des données expérimentales [37.42].

2.5.2 Mécanismes réactionnels globaux

Les mécanismes réactionnels globaux simplifient un mécanisme chimique détaillé en un mécanisme contenant quelques étapes non-élémentaires.

L'approche la plus commune est de supposer le processus de la combustion en une simple réaction de la forme :



Qui peut être représentée par un simple taux de la réaction d'une forme d'Arrhenius :

$$\frac{d[\text{Fuel}]}{dt} = AT^n [\text{fuel}]^a [\text{oxydant}]^b \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \quad (2.44)$$

$[\text{fuel}]$ et $[\text{oxydant}]$ dénotent respectivement les fractions massiques du carburant et de l'oxydant, A est le facteur pré-exponentiel, n est l'exposant de la température et E_A est l'énergie d'activation. Puisque la réaction ci-dessus est non-élémentaire, ces constantes n'ont aucune signification physique évidente et sont généralement obtenues à partir des résultats expérimentaux.

Cette approche a quelques problèmes majeurs [40]:

- La supposition que le processus complexe d'oxydation des hydrocarbures peut être représenté par une réaction globale simple ne fournit aucune information sur les produits intermédiaires tels que les précurseurs de polluants.
- les paramètres de l'équation (2.44) doivent être ajustés pour chaque configuration où la réaction aura lieu, paramètres liés au moteur ou autres systèmes de combustion.

Au lieu d'une seule réaction globale, plusieurs réactions (non-élémentaires) globales peuvent être employées. Ceci signifie que plusieurs ensembles de valeurs de A , de n et E_A (dont la plupart du temps sont empiriques) doivent être spécifiés.

Les termes sources dans les équations d'espèce et d'énergie demeurent les mêmes et ont été définies dans la section précédente.

2.5.3 Chimie d'équilibre

La chimie peut être considérablement simplifiée si on suppose que les espèces réagissent à l'équilibre dès qu'elles se mélangent. Dans cette condition, tout ce qui reste à décrire c'est comment le carburant se mélange avec l'oxydant. Le problème de mélange est simplifié par l'hypothèse que les diffusivités de toutes les grandeurs scalaires est la même (les espèces consommées ou produites ; inchangées à l'échelle globale).

Par conséquent, une fraction de mélange ξ peut être définie comme :

$$\xi = -\frac{Z_m - Z_{m,fuel}}{Z_{m,oxydant} - Z_{m,fuel}} \quad (2.45)$$

où Z_m dénote la fraction massique de l'élément m , $Z_{m,fuel}$ et $Z_{m,oxydant}$ étant respectivement les fractions massiques de l'élément m dans le fuel et dans l'oxydant.

Une équation de conservation pour ξ peut être écrite semblable à l'équation (2.1) et après l'établissement d'une moyenne de Favre, on obtient :

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{\xi}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{u} \tilde{\xi}}) = \nabla \cdot [\rho D_T \nabla \tilde{\xi}] + \overline{\rho \dot{\xi}^s} \quad (2.46)$$

où $\overline{\rho \dot{\xi}^s}$ est le terme source de la fraction de mélange due au spray.

L'équation (2.46) n'a aucun terme source chimique car ξ est une grandeur scalaire conservée.

Si on défini ξ avec l'équation (2.45) en utilisant un élément C comme élément m , la source due au spray peut être déterminée comme :

$$\overline{\rho \dot{\xi}^s} = \overline{\rho \dot{\xi}^s Z_{C,fuel}} \quad (2.47)$$

$Z_{C,fuel}$ est la fraction massique de l'élément C dans le carburant. Pour un mélange adiabatique, l'enthalpie h est également une grandeur conservée et elle est déterminée uniquement à partir de ξ . Dans un cas non-adiabatique (le cas d'un moteur), toutes les variables scalaires sont exclusivement des fonctions de la fraction de mélange et de l'enthalpie, définie par le rapport à l'équilibre [37]. Les termes de source chimique dans les équations (2.2) et (2.6), sont calculés comme suit:

$$\dot{\rho}_m^c = (\rho_m^{eq} - \rho_m^{old}) / \Delta t \quad (2.48)$$

$$\dot{Q}^c = -\sum_m \dot{\rho}_m^c (\Delta h_f^0)_m \quad (2.49)$$

ρ_m^{eq} est la densité de l'espèce à l'équilibre, ρ_m^{old} la densité de l'espèce avant la chimie, et Δt est le pas de temps dans le CFD.

Dans la littérature scientifique on trouve beaucoup de modèles fondés sur l'un des mécanismes évoqués précédemment. Pour la combustion non pré-mélangée, on cite le modèle de Magnussen et Hjertager (1976) [32], pour lequel le taux de réaction d'une quantité de la masse de l'espèce m , due à la conversion d'une espèce chimique en une autre, est donné par la relation (2.50).

$$\dot{\omega}_r = \frac{d\xi_m}{dt} = -\frac{\xi_m - \xi_m^{eq}}{\tau_c} \quad (2.50)$$

ξ_m Représente la fraction de masse de l'espèce m , ξ_m^{eq} est la valeur de cette fraction à l'équilibre thermodynamique, et τ_c est le temps caractéristique de l'achèvement de l'équilibre. Il est donné par la relation :

$$\tau_c = \tau_l + f\tau_t \quad (2.51)$$

Où $f = (1 - e^{-r})/0.632$. Ce dernier paramètre simule l'influence décroissante de la turbulence sur le processus de combustion.

$$\tau_l = A^{-1} [fuel]^{0.75} [O_2]^{-1.5} \exp\left(\frac{E}{RT}\right) \quad (2.52)$$

$$\tau_t = C_2 \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.53)$$

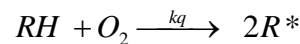
Où $C_2 = 0.1$, $E = 77.3 \text{ kJ / mol}$; représente l'énergie d'activation et $A = 7.68 \times 10^8$ constante pré-exponentielle.

2.5.4 Modèle d'Allumage

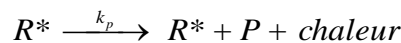
La cinétique de l'allumage est un processus à basse température de réactions en chaîne. Nous avons choisi un modèle global, le modèle Shell, puisque ce modèle représente bien les étapes de base du phénomène d'allumage. Le modèle d'allumage Shell a été développé par Halstead [32]. C'est un modèle thermocinétique basé sur un mécanisme réduit pour l'oxydation d'un hydrocarbure. Il a été testé qualitativement en confrontation à des résultats expérimentaux.

Le modèle Shell de base comprend huit réactions cinétiques [44] :

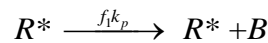
(1) Une réaction d'initialisation de type Arrhenius :



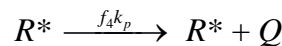
(2) Une première réaction de propagation formant les produits :



(3) Une deuxième réaction de propagation formant B :

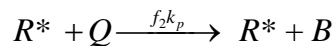


(4) Une troisième réaction de propagation formant Q :

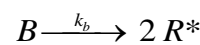


(2.54)

(5) Une quatrième réaction de propagation formant B :



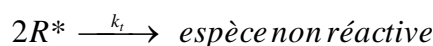
(6) Une réaction d'embranchement :



(7) Une réaction de désactivation :



(8) Une réaction de désactivation :



RH est l'hydrocarbure introduit, R^* radical composé à partir de l'hydrocarbure, B agent de branchement, Q espèce intermédiaire, et P est un produit d'oxydation constitué de CO , de CO_2 et de H_2O . Les termes de vitesse de réaction f_i sont exprimés en fonction des concentrations en fuel et en oxygène de la manière suivante :

$$f_i = A_{f_i} \exp(-E_{f_i} / RT) [O_2]^{x_i} [RH]^{y_i} \quad (2.55)$$

Il est à noter que l'indice de cétane (CN) influe sur la valeur de l'énergie d'activation de l'inflammation. Dans la littérature on trouve plusieurs suggestions estimant l'influence de ce dernier. Heywood [1] par exemple suggère la relation suivante :

$$E_A = \frac{618840}{CN + 25} \quad (2.56)$$

Les paramètres cinétiques k_i de ces équations sont sous la forme d'Arrhenius :

$$k_i = A_i \exp(-E_i / RT) \quad \text{pour } i = 1, 2, 3, 4, q, b, t \quad (2.57)$$

$$k_p = \frac{1}{1/k_{p1}[O_2] + 1/k_{p2} + 1/k_{p3}[RH]} \quad (2.58)$$

Où k_{p1} , k_{p2} et k_{p3} sont les coefficients de vitesse pour les réactions de propagation.

Les concentrations des différentes espèces peuvent être calculées à partir des relations:

$$\begin{aligned} \frac{d[R^*]}{dt} &= 2k_q[RH][O_2] + 2k_b[B] - f_3k_p[R^*] - k_t[R^*]^2 \\ \frac{d[B]}{dt} &= f_1k_p[R^*] + f_2k_p[R^*][Q] - k_b[B] \\ \frac{d[Q]}{dt} &= f_4k_p[R^*] - f_2k_p[R^*][Q] \\ \frac{d[O_2]}{dt} &= -pk_p[R^*] \\ \frac{d[RH]}{dt} &= \frac{[O_2] - [O_2]_{(t=0)}}{p.m} + [RH]_{(t=0)} \end{aligned} \quad (2.59)$$

m est une quantité qui dépend du nombre d'atomes hydrogène. Dans une molécule de carburant C_nH_{2m} , $p = (n(2-\gamma) + m) / 2m$, et $\gamma \approx 0,67$.

2.5.5 Formations des polluants [22.32.45]

2.5.5.1 Formation de NOx

Ces émissions de NOx, groupant le dioxyde d'azote NO_2 et l'oxyde nitrique NO , qui est prédominant dans les moteurs diesel. L'approche adoptée pour la modélisation du monoxyde d'azote consiste à ne tenir compte que du NO formé par voie thermique.

La cinétique de la formation de l'oxyde nitrique est prise en compte par le mécanisme de Zeldovich étendu, constitué des trois réactions suivantes:



Avec les valeurs des constantes $k_{1f} - k_{1b}$, $k_{2f} - k_{2b}$ et $k_{3f} - k_{3b}$ en avant et en arrière des trois réactions respectivement, sont données par les relations :

$$\begin{aligned}
 k_{1f} &= 7.6 * 10^{13} \exp[-38000/T] & k_{1b} &= 1.6 * 10^{13} \\
 k_{2f} &= 6.4 * 10^9 T * \exp[-3150/T] & k_{2b} &= 1.5 * 10^9 T * \exp[-19500/T] \\
 k_{3f} &= 4.1 * 10^{13} & k_{3b} &= 2.0 * 10^{14} * \exp[-23650/T]
 \end{aligned} \tag{2.61}$$

Le champ de température dans la chambre de combustion et les propriétés thermochimiques des gaz sont supposés indépendants de la formation du NO-thermique, en raison de sa faible concentration. En considérant, par ailleurs, que les radicaux participant aux réactions de formation du NO par ce mécanisme sont à l'état d'équilibre partiel par rapport aux espèces majoritaires telles que N₂ et O₂, la concentration en NO est calculée de manière découplée par rapport au phénomène de combustion, c'est à dire par une procédure de post-traitement, par la relation (2.62), établie à partir des réactions réversibles du mécanisme de Zeldovich :

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = \frac{2R_1 \left\{ 1 - ([\text{NO}]/[\text{NO}]_e)^2 \right\}}{1 + ([\text{NO}]/[\text{NO}]_e) R_1 / (R_2 + R_3)} \tag{2.62}$$

[]_e désigne la concentrations à l'équilibre :

$$\begin{aligned}
 R_1 &= K_1^f [\text{O}]_e [\text{N}_2]_e = K_1^r [\text{NO}]_e [\text{N}]_e \\
 R_2 &= K_2^f [\text{N}]_e [\text{O}_2]_e = K_2^r [\text{NO}]_e [\text{O}]_e \\
 R_3 &= K_3^f [\text{NO}]_e [\text{H}]_e = K_3^r [\text{OH}]_e [\text{N}]_e
 \end{aligned} \tag{2.63}$$

La fraction massique de NO dans l'équation (2.62) peut être écrite :

$$\frac{dX_{\text{NO}}}{dt} = \frac{2(M_{\text{NO}}/\rho_{C.V.}) R_1 \left\{ 1 - ([\text{NO}]/[\text{NO}]_e)^2 \right\}}{1 + ([\text{NO}]/[\text{NO}]_e) R_1 / (R_2 + R_3)} \tag{2.64}$$

Où X_{NO} est la fraction massique de NO; M_{NO} est la masse moléculaire de NO; et $\rho_{C.V.}$ est la densité du volume de contrôle.

L'effet d'entraînement de l'air devrait être considéré. En conséquence, la fraction massique de NO de chaque zone ne peut pas être calculée en utilisant simplement le mécanisme de Zeldovich étendu, équation (2.64).

La dérivée de la fraction massique du NO dans une zone par rapport au temps est:

$$\frac{DX_{\text{NO}}}{Dt} = \frac{D}{Dt} \left(\frac{m_{\text{NO}}}{m_{\text{tot}}} \right) = \frac{dX_{\text{NO}}}{dt} - \frac{X_{\text{NO}}}{m_{\text{tot}}} \cdot \frac{dm_{\text{tot}}}{dt} \tag{2.65}$$

Selon le principe de conservation de la quantité de mouvement au début et en fin d'injection du fuel:

$$m_f u_i = (m_f + m_a) \frac{dS}{dt} \tag{2.66}$$

m_f : Masse du fuel dans la zone considérée

m_a : Masse d'air dans cette zone.

S : Pénétration du jet.

u_i : Vitesse d'injection du carburant.

En réarrangeant l'équation (2.66) on obtient la relation qui relie la masse de l'air d'entraînement à celle du fuel:

$$m_a = m_f \left(u_i \frac{dt}{dS} - 1 \right) \quad (2.67)$$

Par dérivation de cette équation on abouti à la relation du taux d'entraînement de l'air :

$$\dot{m}_a = - \frac{m_f \cdot u_i \cdot d^2 S}{(dS/dt)^2 \cdot dt^2} \quad (2.68)$$

Le dernier terme de l'équation (2.65) représente le taux d'entraînement de l'air \dot{m}_a du fait que la masse totale d'une zone ne change que par l'entraînement de l'air ($\dot{m}_a \gg \dot{m}_f$)

$$\dot{m}_a = \frac{dm_{tot}}{dt} \quad (2.69)$$

L'équation (2.65) devient:

$$\frac{DX_{NO}}{Dt} = \frac{dX_{NO}}{dt} - \frac{\dot{m}_a}{m_{tot}} X_{NO} \quad (2.70)$$

En substituant l'équation (2.64) dans équation (2.70), la variation de la fraction massique de *NO* par apport au temps, est obtenue alors par :

$$\frac{DX_{NO}}{Dt} = \frac{2(M_{NO}/\rho_{C.V})R_1 \{1 - ([NO]/[NO]_e)^2\}}{1 + ([NO]/[NO]_e)R_1/(R_2 + R_3)} - \frac{\dot{m}_a}{m_{tot}} X_{NO} \quad (2.71)$$

2.5.5.2 Formation de suie

La détermination des taux de formation des suies à été l'objet de plusieurs travaux de modélisations. La concentration des suies à l'échappement est gouvernée par la quantité des suies formées et celles oxydées, selon la formule suivante :

$$\frac{dm_s}{dt} = \frac{dm_{sf}}{dt} - \frac{dm_{so}}{dt} \quad (2.72)$$

Les indices s, sf, so , dénotent respectivement les suies émises, formées, et oxydées.

- **Le modèle de Hiroyasu** : est très utilisé dans les modélisations multi-zones. Il exprime ces taux précités sous la forme :

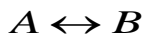
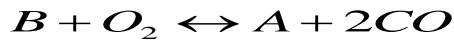
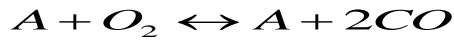
$$\frac{dm_{sf}}{dt} = A_f m_{fg} P^{0.5} \exp\left(\frac{-E_{sf}}{RT}\right) \quad (2.73)$$

$$\frac{dm_{so}}{dt} = A_o m_s \frac{P_{ox}}{p} p^{1.8} \exp\left(\frac{-E_{so}}{RT}\right) \quad (2.74)$$

$E_{sf} = 1.25 \times 10^4 \text{ Kcal / Kmol}$, $E_{so} = 1.40 \times 10^4 \text{ Kcal / Kmol}$, sont des énergies d'activation, A_f et A_o des constantes déterminées expérimentalement, m_{fg} et

m_s représentent respectivement, la masse du fuel vaporisé et la masse des suies émises à l'échappement.

- **Le modèle de l'oxydation de Nagle et Strickland-Constable (NSC)** : Ce modèle d'oxydation est basé sur des expériences d'oxydation de carbone dans un environnement O₂ sur une gamme de pression partielle. Dans ce modèle, l'oxydation de carbone se produit par deux mécanismes dont les taux dépendent de la chimie extérieure impliquant des emplacements plus réactifs *A* et des emplacements moins réactifs *B* [22].



Le taux d'oxydation de suie de NSC mis en application dans l'équation (2.72) est donné par:

$$\frac{dm_{so}}{dt} = \frac{M_c}{\rho_s d_s} m_s w \quad (2.75)$$

M_c : Le poids moléculaire de carbone (12 g/mole),

ρ_s : La densité de suie (2.0 g/cm³)

d_s : Le diamètre de suie (4.5*10⁻⁹ m).

La vitesse de réaction est définie par : $w = \left(\frac{K_A P_{ox}}{1 + K_Z P_{ox}} \right) x + K_B P_{ox} (1 - x)$ (2.76)

$$x = \frac{P_{ox}}{P_{ox} + (K_T / K_B)} \quad (2.77)$$

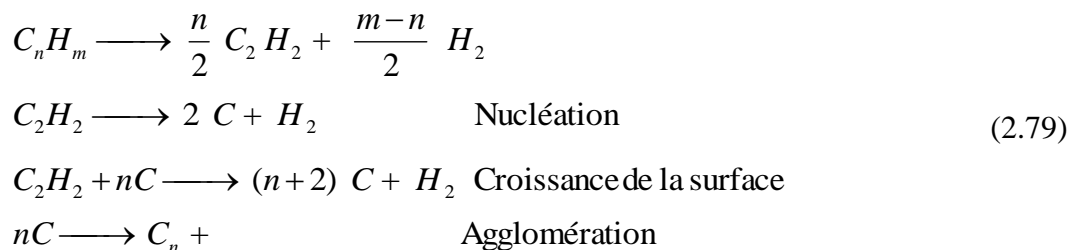
P_{ox} : est la pression partielle de l'oxygène.

Les constantes du modèle d'oxydation NSC sont :

$$K_A = 20 \exp(-15100/T) \quad K_B = 4.46 \exp(-76400/T) \quad (2.78)$$

$$K_Z = 20 \exp(-15100/T) \quad K_T = 1.51 \exp(-48800/T)$$

- **Leung, Fairweather et autres** [45] ont proposé un modèle de suie chimique. Dans ce modèle l'acétylène est assumé comme une espèce pyrolytique cruciale pour les processus de la nucléation et de croissance de la surface des suies.



Belardini et autres [45], ont effectué une amélioration de ce modèle en ajoutant un mécanisme couplé pour fournir la chaleur de combustion non seulement due au carburant injecté mais également due à la combustion de l'acétylène formé. La formulation globale du modèle donne un bon compromis entre une description réussie du mécanisme de formation des suies dans le cylindre et le coût de calcul pour un moteur diesel.

2.6 Interactions Chimie-turbulence

La section précédente 2.5 décrit les modèles chimiques qui donnent les taux de réaction et les termes source pour les équations générales de bilan décrites dans la section 2.1 (équations gouvernantes de la phase gazeuse). Or, l'écoulement turbulent est caractérisé par de fortes fluctuations dans les concentrations d'espèce, de la température, de la densité, etc... Par conséquent, la solution des équations moyennées (section 2.2) requiert la connaissance des moyennes des termes sources calculées à partir des taux de réaction moyens. Ces derniers peuvent être obtenus de plusieurs manières.

2.6.1 Taux moyen de réaction en utilisant des valeurs moyennes

Cette approche employée dans le code KIVA, calcule aisément le taux de réaction moyen en utilisant les valeurs moyennes des concentrations et des températures. Cette approche est valide si les termes source sont des fonctions linéaires des concentrations et des températures. Cependant, la non-linéarité inhérente de la chimie mène à des erreurs considérables avec cette hypothèse et l'existence d'une dépendance non linéaire entre la constante de vitesse k_c et la température par la loi d'Arrhenius (équation 2.40) pousse les fluctuations de la température à jouer un rôle très important, ainsi $\overline{k_c(T)}$ ne peut pas être approximé par $k_c(\overline{T})$.

2.6.2 Taux moyen de réaction en utilisant des pdf

Une approche très commune pour obtenir les taux moyens de réaction est l'approche statistique. Ici, les fluctuations liées à la turbulence sont quantifiées en termes de fonction de la densité de probabilité (pdf). Généralement, le taux de réaction est une fonction fortement non linéaire de la température et des concentrations, dans un écoulement turbulent, la température et les concentrations sont des fonctions aléatoires dans l'espace et le temps.

L'évaluation des moments (par exemple, le taux moyen d'une réaction) d'une fonction non linéaire de plusieurs variables aléatoires exige la connaissance des pdfs jointes de ces variables [40,46]. Il y a principalement deux approches pour obtenir ces pdfs jointes :

- La pleine méthode de pdf implique de résoudre soit une équation de transport pour la pdf jointe vitesse-composition, soit juste la pdf jointe de la composition.

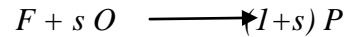
L'algorithme de Monte Carlo est habituellement employé pour résoudre cette équation de transport due à la grande taille du pdf jointe[40]. Ces méthodes exigent des ressources informatiques consistantes et l'effort exigé pour résoudre l'équation de transport est habituellement énorme par rapport à l'information recherchée.

- Beaucoup de calculs de combustion adoptent une approche plus simple et moins chère. La forme fonctionnelle du pdf est assumée a priori et les paramètres d'une telle pdf présumée sont déterminés en utilisant les moments calculés à partir de leurs équations de transport respectifs.

2.6.3 Taux moyen de réaction en utilisant des modèles CTS

Les modèles à échelles caractéristiques de temps dits algébriques utilisés pour l'évaluation des taux de production moyens sont similaires aux modèles *EBU*, sauf qu'ils prennent en considération le rapport de mélange des réactifs frais.

Pour une réaction chimique simple de type :



Où s représente le coefficient stœchiométrique. Le taux moyen de réaction selon le modèle de Magnussen s'écrit :

$$\bar{\omega}_r = \alpha \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\bar{Y}_F, \frac{\bar{Y}_O}{s}, \beta \frac{\bar{Y}_P}{1+s} \right) \quad (2.80)$$

k, ε désignent respectivement l'énergie cinétique turbulente et son taux de dissipation et α, β sont les constantes du modèle de Magnussen.

En conclusion de ce chapitre il faut enregistrer que :

Les modèles de turbulence exposés dans cette section s'appuient sur la procédure de modélisation des écoulements non réactifs. Ils sont fortement discutés même pour ces applications parce qu'ils se fondent sur l'empirisme et un certain genre d'intuition complétés par des arguments physiques. Il apparaîtra clairement qu'avec la combustion, l'empirisme et le nombre de simplifications nécessaires augmentent. Ceci est reflété par la grande variété de différents modèles de combustion qui ont été formulés et qui sont poursuivis et sans interruption améliorés par différents groupes dans la communauté des chercheurs en combustion [38].

Dans certains cas, les modèles sont basés sur les mêmes concepts physiques, avec différentes stratégies de modélisation menant à différentes formulations. Dans d'autres cas, les concepts sont fondamentalement différents. Par exemple, les modèles lagrangiens comme ceux utilisés dans le modèle d'équation de transport de la PDF diffèrent dans leur formulation physique et mathématique des modèles classiques de flammelettes formulés dans le cadre eulérien. Par conséquent, si on doit résoudre numériquement un problème de combustion, on doit faire le choix du modèle à employer. C'est regrettable, puisqu'aucun modèle n'est exact et certainement aucune approche n'apportera des réponses précises à la grande variété de problèmes de la combustion turbulente.

Chapitre 3

Code de calcul et démarches numériques

La CFD (Computational Fluid Dynamics) est simplement le calcul numérique appliqué à la mécanique des fluides. Cela consiste à résoudre dans une géométrie donnée les équations fondamentales de la mécanique des fluides, que l'on peut éventuellement coupler aux équations de transfert thermique ou de réaction chimique. Historiquement, la CFD a commencé à se développer en génie mécanique, pour étudier les écoulements autour d'un objet afin de mieux le profiler (ailes d'avions, automobiles) [47].

Dans la simulation des moteurs diesel, les problèmes sont, en général, beaucoup plus complexes de part, en particulier, le caractère multiphasique des écoulements, les réactions chimiques et le comportement turbulent des fluides.

L'augmentation de la puissance des ordinateurs a autorisé la prise en compte de plusieurs paramètres dans des conditions plus complexes. Cette tendance continuera certainement et les modèles proposés dans les codes de calcul seront de plus en plus complets et de mieux en mieux validés; ils devraient déboucher sur la possibilité de mieux traiter les interactions entre la turbulence et la chimie.

3.1 Code de calcul

3.1.1 Description générale du code de simulation KIVA 3v

Le code multidimensionnel KIVA, développé au laboratoire national de Los Alamos (Etats Unis d'Amérique), résout les équations de conservation des espèces, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour des écoulements turbulents et réactifs. Il suit une méthode de volume fini et peut gérer un maillage mobile structuré. De cette façon il est capable de reproduire le mouvement réel du piston et des soupapes. La différenciation temporelle et spatiale est réalisée en employant des schémas semi-implicites avec un algorithme Eulérien Lagrangien arbitraire. La caractéristique importante de KIVA est que c'est un code «de sources ouvertes», qui peut être modifié selon les demandes de l'utilisateur.

L'équipe de Los Alamos et d'autres usagers dans le monde entier ont testé KIVA dans une grande variété d'applications. Avec le temps un nombre significatif de publications ont été présentées, chacune s'orientant sur un certain aspect de la modélisation et souvent offre des améliorations. Le code lui-même est rendu plus efficace et réaliste, après le relâchement public, en 1989, de la version améliorée précédemment, appelé KIVA-II [41]. Pour la résolution des équations moyennes instationnaires du mélange gazeux réactif turbulent, couplées à l'équation du spray se vaporisant, le code emploie la méthodologie ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian) [48] et discrétise l'espace en utilisant une technique de volume fini. La gamme de validité du code s'étend des basses vitesses aux écoulements supersoniques pour des régimes laminaires et turbulents. Le nombre des espèces et des réactions chimiques est libre. Le code emploie la méthode stochastique de particules afin de modéliser la dynamique des sprays liquides se vaporisant. Les gouttes et la phase gazeuse interagissent en échangeant de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Le modèle du spray inclut également la coalescence des gouttes [49] et leur pulvérisation secondaire.

KIVA-3 (1993) [50], KIVA-3V (1997) [51] et KIVA-3V Rel-2 (1999) [52] ont offert les options de faire un maillage structuré par blocs, d'ajouter des soupapes verticales ou obliques et des outils de visualisation « post-processeur ».

KIVA-3V a été employé intensivement par des laboratoires universitaires et industriels pour effectuer des simulations de la combustion dans les moteurs et pour faire des développements de sous-modèles physiques. Une nouvelle version du code KIVA (KIVA-4) a été développée pour résoudre le même système d'équations mais avec des possibilités de maillage non structuré.

3.1.2 Structure standard de KIVA-3V [51]

Il est composé, comme tout code de type CFD, de trois modules qui sont : le pré-processeur "**K3prep**", le solveur "**Kiva3v**" et le post-processeur "**K3post**".

K3prep : " pré-processeur" génération de maillage : Il permet de construire la géométrie du domaine de calcul et de subdiviser ce dernier en petits volumes ou cellules de calcul. L'ensemble de ces volumes élémentaires constitue le maillage.

KIVA 3v : programme principal de calcul. L'ensemble des équations sont discrétisées et résolues.

K3post : " post-processor " produit les fichiers de résultats. Le Post-processeur permet de visualiser les différents résultats (champs de vitesse, lignes de courant, contours de la surface, etc.).

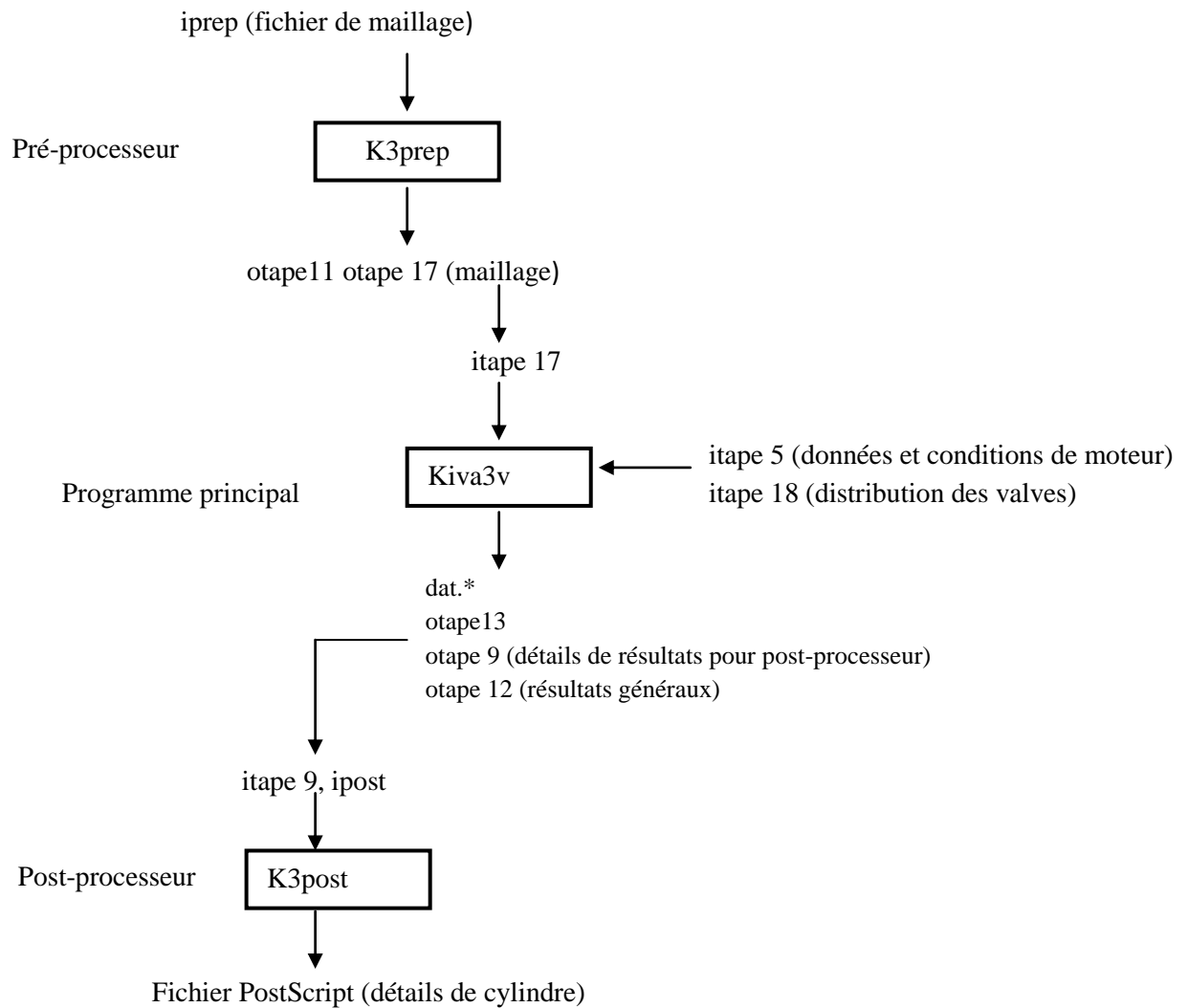


Figure 3.1: Structure standard de KIVA3V.

3.2 Démarches numériques

La discrétisation des équations qui gouvernent la combustion dans le code KIVA retient une combinaison de la méthode ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) pour la discrétisation spatiale et une méthode implicite pour la discrétisation temporelle.

3.2.1 Discrétisation spatiale

Les équations du mouvement sont formulées avec une vitesse \mathbf{U} de la grille mobile, changeant entre $\mathbf{0}$ et \mathbf{U} . Ainsi la formulation peut varier régulièrement entre Eulérienne ($\mathbf{U} = \mathbf{0}$) et Lagrangien ($\mathbf{U} = \mathbf{u}$) ou une description mixte.

Les équations moyennées de l'écoulement (2.18 à 2.20) sont reformulées sous une forme intégrale avec l'introduction du paramètre \mathbf{U} .

Le maillage peut se conformer aux frontières courbées et peut se déplacer pour suivre les changements de géométrie de la chambre de combustion [40]. Les équations de conservation différenciées dans l'espace suivent des volumes de contrôle.

Une cellule typique est représentée sur la figure 3.2, ses sommets sont par convention numérotés comme montré et elle est repérée par des nombres entiers (i,j,k) , qui sont ses coordonnées dans un espace logique. Les index (i,j,k) marquent également les sommets.

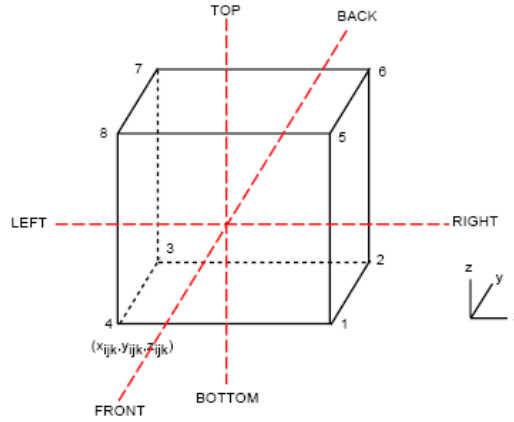


Figure 3.2: Une maille typique de KIVA

On définit également des cellules auxiliaires qui sont centrées aux sommets. Ces cellules auxiliaires sont utilisées principalement dans la différenciation de l'équation de la quantité de mouvement. Le centre d'une cellule est calculé comme suit :

$$x_{ijk}^c = \frac{1}{8} \sum_{\alpha}^8 x_{\alpha} \quad y_{ijk}^c = \frac{1}{8} \sum_{\alpha}^8 y_{\alpha} \quad z_{ijk}^c = \frac{1}{8} \sum_{\alpha}^8 z_{\alpha} \quad (3.1)$$

Où α s'étend sur les huit sommets de la cellule.

Dans la méthode ALE, les vitesses sont localisées aux sommets des cellules, ce qui est commode car aucune interpolation n'est exigée en déterminant le mouvement de sommet dans la phase lagrangienne du calcul. Les quantités thermodynamiques telles que la température, concentrations d'espèce, etc. sont localisées aux centres de cellules.

L'équation générale de transport (dans l'espace) s'écrit:

$$\nabla(\rho \bar{u} \phi) = \nabla(\Gamma_{\phi} \text{grad} \phi) + S_{\phi} \quad (3.2)$$

Qui peut être intégrée sur le volume de contrôle,

$$\int_{\mathcal{V}} \text{div}(\rho \bar{u} \phi) dV = \int_{\mathcal{V}} \text{div}(\Gamma_{\phi} \text{grad} \phi) dV + \int_{\mathcal{V}} S_{\phi} dV \quad (3.3)$$

En utilisant le théorème de Gauss-Ostrogradsky, l'intégrale de volume peut être convertie en une intégrale de surface pour obtenir

$$\int_{\mathcal{V}} \text{div}(\rho \bar{u} \phi) dV = \int_A \rho \phi (\vec{V}_r \cdot \vec{n}) dA \quad (3.4)$$

$$\text{Alors} \quad \int_A \rho \phi (\vec{V}_r \cdot \vec{n}) dA = \int_A \Gamma_{\phi} (\text{grad} \phi) dA + \int_{\mathcal{V}} S_{\phi} dV \quad (3.5)$$

En supposant que ρ , Γ , u et ϕ sont homogènes sur les surfaces, l'intégrale peut être convertie en une somme sur les faces A_j de la cellule :

$$\sum_j [(\rho \phi)_j \cdot (u_j A_j)] = \sum_j [\Gamma_{\phi} ((\text{grad} \phi)_j A_j)] + \int_{\mathcal{V}} S_{\phi} dV \quad (3.6)$$

où u_j sont les composantes de la vitesse qui sont perpendiculaires aux surfaces A_j .

3.2.2 Discrétisation Temporelle [32.53]

Toutes les dérivées temporelles sont rapprochées avec une différence de premier ordre

$$\frac{\partial Q}{\partial t} \approx \frac{Q^{n+1} - Q^n}{\Delta t^n} \quad (3.7)$$

Chaque fois le calcul est exécuté en trois phases. Les résultats de la phase *A* sont désignés par Q^A et employés dans la phase *B* produisant les résultats Q^B . On obtient la relation de l'avancement de temps suivante :

$$Q^n \rightarrow Q^A \rightarrow Q^B \rightarrow Q^{n+1} \quad (3.8)$$

La troisième phase *C* est phase de reconstruction : calcul des termes dus à la convection aux frontières des cellules du maillage.

2.2.3 Techniques de solution numérique

2.2.3.1 Technique ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian)

La résolution des équations de conservation des espèces, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour des écoulements turbulents et réactifs avec la méthode ALE comporte trois phases :

- **Un calcul Lagrangien**

Les nœuds du maillage se déplacent en suivant le mouvement du fluide. Ce calcul est accompli en deux phases :

Une première phase A : calcul du spray (fractionnement, collision,...), les termes source de masse et d'énergie dus au spray et à la chimie.

Une seconde phase B : calcul selon un schéma implicite similaire à l'algorithme SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations) les équations implicites de la pression, de la quantité de mouvement et de l'énergie. En un premier pas une prédiction de la pression est prise comme point de départ pour le calcul et la résolution des termes de diffusion des autres quantités (vitesse, température..). En suite, les valeurs obtenues dans la première étape sont utilisées pour la résolution de la pression.

- **Calcul Eulérien**

Une troisième Phase C : phase de reconstruction, les nœuds sont transportés vers leurs positions initiales, et l'écoulement est reconstruit sur ce maillage. Cette reconstruction est accomplie par la convection aux frontières des cellules du maillage. La convection est résolue par une méthode explicite avec un éventuel découpage en sous-cycles.

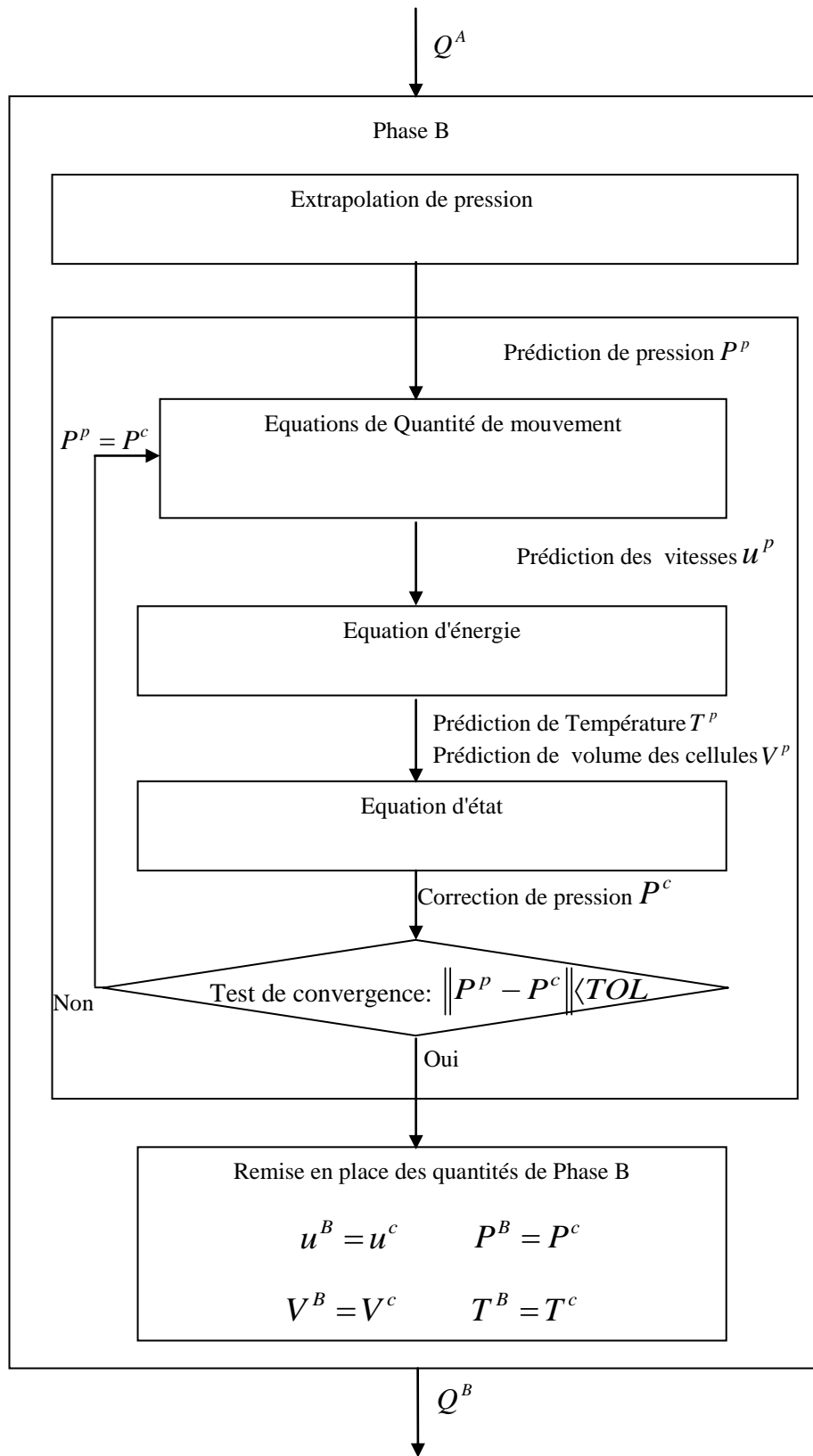


Figure 3.3: Organigramme de résolution [42]

2.2.3.2 Convergence

La résolution d'un système d'équations (équations Lagrangiennes) par la méthode des résidus conjugués, se fait en deux étapes. Dans un premier temps, on initialise les variables ; ensuite, on fait un calcul itératif jusqu'à la convergence [53].

Le critère de Stabilité CFL (*Courant-Friedrichs-Lewy*)

Pour la stabilité du calcul, le pas de temps Δt ne doit pas être arbitraire. Dans le cas d'un schéma d'intégration temporelle, le pas de temps Δt est limité par la condition de stabilité CFL qui s'exprime par la relation (3.9) [32,55].

$$(u + c) \frac{\Delta t}{\Delta x} = CFL = 0.2 \quad (3.9)$$

Où Δx représente le pas de discrétisation spatiale, u est la norme de la vitesse maximale et c la vitesse du son dans le fluide. CFL est une constante qui représente le rapport de la distance parcourue par l'onde la plus rapide de l'écoulement, durant le pas de temps Δt , sur la taille caractéristique Δx d'une maille représentative dont la valeur dépend du type de schéma numérique utilisé (0,2 pour notre cas) [32].

2.2.4 Conditions aux limites

Les conditions aux limites sont nécessaires pour la solution de n'importe quel système d'équations aux dérivées partielles. On retrouve des conditions d'entrée, de sortie et des conditions aux limites périodiques. En plus de ces conditions on trouve les conditions de paroi [41].

2.2.4.1 Conditions aux limites sur la vitesse

Pour le cas des parois fixes, la vitesse des gaz est prise égale à celle de la paroi :

$$u = w_{wall} k \quad (3.10)$$

Pour le cas des parois mobiles, la vitesse des gaz prend la forme suivante :

$$u \cdot n = w_{wall} k \cdot n \quad (3.11)$$

avec n : la normale à la surface de la paroi.

Pour les lois de turbulence les deux composantes tangentielles de la contrainte

$\bar{\sigma}_w$ prennent une forme logarithmique :

$$\frac{v}{u^*} = \begin{cases} 1/k \ln(c_{lw} \zeta^{7/8}) + B & \zeta > Rc \\ \zeta^{1/2} & \zeta < Rc \end{cases} \quad (3.12)$$

Où $\zeta = \frac{\rho y v}{\mu_{air}(T)}$ est le nombre de Reynolds basé sur la vitesse des gaz relative à la paroi,

$v = |u - w_{wall} k|$ qui est évaluée à une distance y de la paroi, u^* représente la vitesse de cisaillement et B une constante. la vitesse de cisaillement reliée aux deux composantes de la contrainte par la relation suivante :

$$\bar{\sigma}_w - (\bar{\sigma}_w \cdot n)n = \rho (u^*)^2 \frac{\bar{v}}{v} \quad (3.13)$$

Où $\bar{v} = \vec{u} - \vec{w}_{wall} k$.

Dans les équations (3.12) et (3.13) la longueur y est supposée petite de sorte qu'elle soit dans la zone logarithmique ou dans la sous couche laminaire. Le nombre de Reynolds critique R_c sépare ces deux zones [41]. Les constantes de l'équation (3.12) sont reliées à celle du modèle $k-\varepsilon$ par les relations :

$$k = \sqrt{c_\mu^{1/2} (c_{\varepsilon_2} - c_{\varepsilon_1}) Pr_\varepsilon} \quad (3.14)$$

et

$$B = r_c^{1/2} - 1 / k \ln(c_{\ell w} R_c^{7/8}) \quad (3.15)$$

les valeurs communément utilisées des constantes $k-\varepsilon$, tel que $B = 5.5$ et $c_{\ell w} = 0.15$ donnent $k = 0.4327$ et $R_c = 114$.

2.2.4.2 Conditions aux limites thermiques

Les conditions aux limites thermiques sont introduites sous forme d'un flux $J_w = -k \nabla T n$. Pour les cas des parois adiabatiques J_w est nul. Dans le cas où la température des parois est fixe, J_w est déterminé à partir de l'équation (2.7). Cependant dans le cas d'application d'une loi de turbulence J_w est déterminé à partir de la formule analogique modifiée de Reynolds :

$$\frac{J_w}{\rho u^* c_p (T - T_w)} = \begin{cases} 1 / (Pr_\ell \frac{v}{u^*}) & \zeta \leq Rc \\ 1 / \left\{ Pr \left[\frac{v}{u^*} + \left(\frac{Pr_\ell}{Pr} - 1 \right) R_c^{1/2} \right] \right\} & \zeta > Rc \end{cases} \quad (3.16)$$

En plus des pertes thermiques des parois, une autre source de chaleur est introduite, c'est celle des frottements internes qui est toujours présente dans le cas d'application des lois de turbulence et qui prend la forme :

$$f_w = \sigma_w \cdot v = \rho (u^*)^2 \nu \quad (3.17)$$

Où f_w est le taux de chaleur par unité de surface de la paroi.

Dans le calcul des écoulements turbulents, la prise en compte des conditions aux limites est essentielle que ce soit pour la détermination de l'énergie cinétique turbulente k ou pour le taux de dissipation ε . Ces dernières prennent les formes suivantes :

$$\nabla k \cdot n = 0 \quad (3.18)$$

et

$$\varepsilon = c_{\mu \varepsilon} \frac{k^{3/2}}{y} \quad (3.19)$$

où k et ε sont évalués à une distance y de la paroi :

$$c_{\mu \varepsilon} = \left[\frac{c_\mu}{Pr_\varepsilon (c_{\varepsilon_2} - c_{\varepsilon_1})} \right]^{1/2} \quad (2.20)$$

Chapitre 4

Résultats et Discussions

Les résultats de n'importe quelle simulation de la combustion dans un moteur diesel seront d'autant précis que si les modèles utilisés peuvent effectivement décrire les différents phénomènes qui auront lieu dans le processus de combustion. Une comparaison avec les données expérimentales des résultats de la simulation est donc très nécessaire peut indiquer l'exactitude et la validité des modèles utilisés.

Un ensemble de données expérimentales pour un moteur Diesel 06 cylindres à injection directe est disponible [56] à cette fin. Les caractéristiques de ce moteur sont fournies en annexe [B]. Les quantités mesurées incluent la pression moyenne, Les NOx et Les concentrations en suie. La figure 4.1 représente une photographie du banc d'essai.

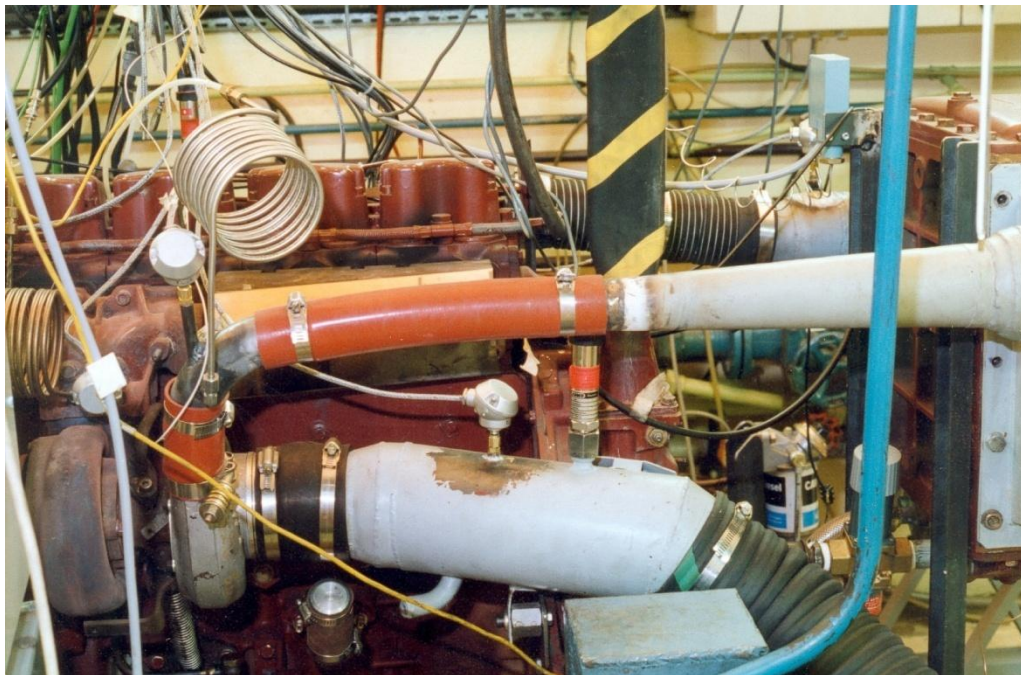


Figure 4.1: Banc d'essais du moteur considéré

La figure 4.2 représente la pression moyenne dans le cylindre, relevée à l'aide d'un capteur de pression en quartz dans les conditions suivantes :

- Régime du moteur 1400 tr/min.
- Charge du moteur : 7 daN.m

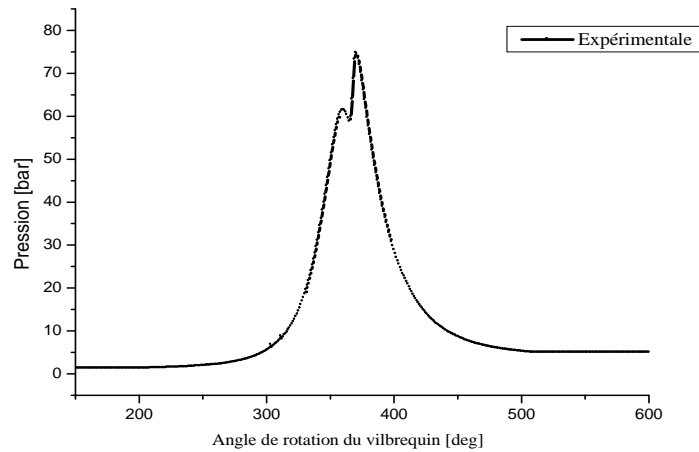


Figure 4.2: Pression moyenne dans le cylindre à 1400tr/min [56]

Cette courbe servira comme moyen de calage du code. En fait, on se satisfait de la courbe de pression car la fluctuation des cycles dans un moteur Diesel est négligeable et nous n'aurons pas recours à la courbe de taux de production de chaleur.

4.1 Maillage

Pour les calculs des écoulements dans des géométries complexes, les maillages non orthogonaux adaptés sont le plus souvent utilisés (la plupart des codes commerciaux utilisent ce genre de maillage). Leur avantage c'est qu'ils peuvent s'adapter à n'importe quelle géométrie et que l'on peut mieux atteindre les propriétés optimales que les maillages orthogonaux. Puisque les lignes du maillage suivent les lignes des frontières, l'implémentation des conditions aux limites serait plus facile. En plus, l'espacement (taille de la maille) pourrait se réduire dans les régions à fortes variations, spécialement quand les maillages multi-blocs sont utilisés [C].

Une analyse de la sensibilité de la zone de combustion au maillage pour un nombre de cellules variant entre 23000 et 40000 cellules est montrée sur la figure 4.3, on constate que le calcul devient quasi-indépendant du maillage à partir de 35000 cellules.

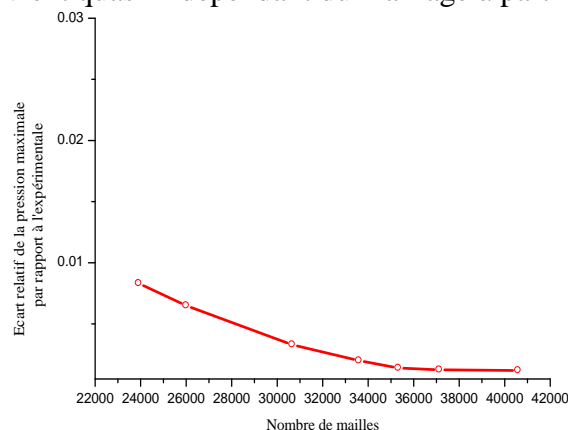


Figure 4.3: Analyse du maillage

Le maillage utilisé pour notre simulation est représenté sur la figure 4.4, il contient 35000 cellules. Il a été créé avec le préprocesseur de Kiva K3-prep, conçu spécialement pour les géométries des moteurs à combustion interne.

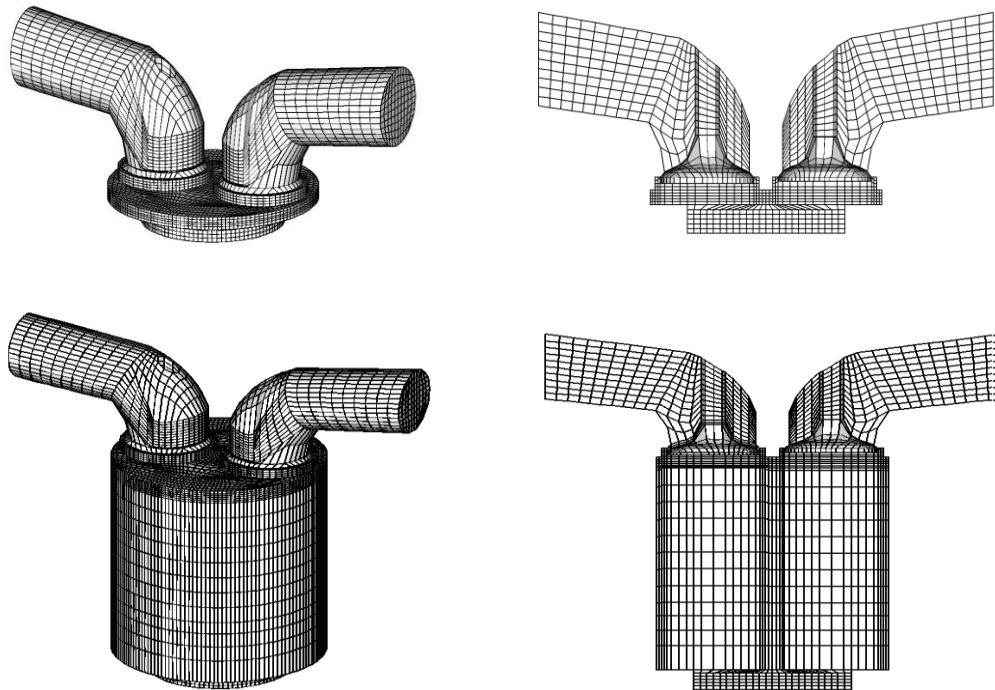


Figure 4.4: Maillage du moteur étudié bowl cylindrique

4.2 Calage du code

La validité des modèles adoptés pour notre cas de figure est vérifiée dans cette étude et dans une étude préalable [32] réalisée au laboratoire LTE. Les résultats de simulation présentent une bonne concordance avec les données expérimentales.

	Processus	Modèle
1	Combustion	CTS-Shell / Meintjes-Morgan
2	Turbulence	RNG $k-\epsilon$
3	Suies	Hiroyaso et NSC
4	NOx	Zeldovich
5	Atomisation	TAB-WAVE
6	Break-up	KH-RT
7	Allumage	Shell
8	Transfert de la chaleur	Loi de paroi

Tableau 4.1: Modèles adoptés pour la simulation

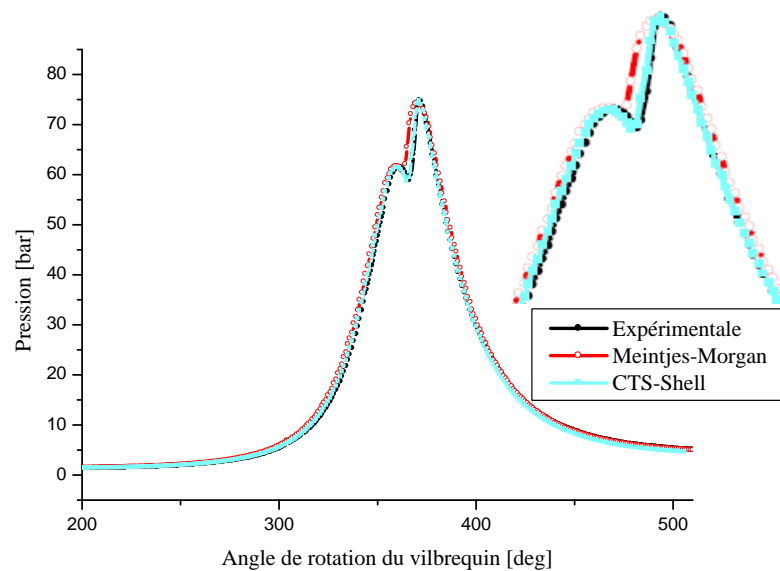


Figure 4.5: Comparaison des valeurs de la pression calculée et mesurée

Comme on peut le constater, il y a une excellente concordance entre l'expérimental et les résultats de la simulation. À partir du PMB, l'accord est presque parfait, indiquant l'aptitude de KIVA pour faire des simulations de la combustion dans les moteurs diesel avec une grande exactitude. De petits écarts sont aperçus, particulièrement près du PMH et après l'injection. Ceci est peut être dû à de légers défauts dans les valeurs des constantes du taux de réaction (de forme Arrhenius) qui doivent être ajustées pour chaque configuration pour rattraper les données expérimentales. Cependant, dans les simulations montrées ici, tous les paramètres étaient maintenus constants. La robustesse des modèles utilisés pour simuler le jet est claire.

4.3 Écoulement à froid

La simulation de l'écoulement à froid dans un moteur concerne l'écoulement du fluide depuis le point mort bas jusqu'au début de l'allumage sans spray et sans les modèles de chimie. Ceci signifie que la résolution des équations (de la conservation des espèces, de la quantité de mouvement, et de l'énergie) se fait en additionnant seulement un modèle de turbulence. Dans notre cas, le modèle $k-\varepsilon$ a été employé dans la simulation,

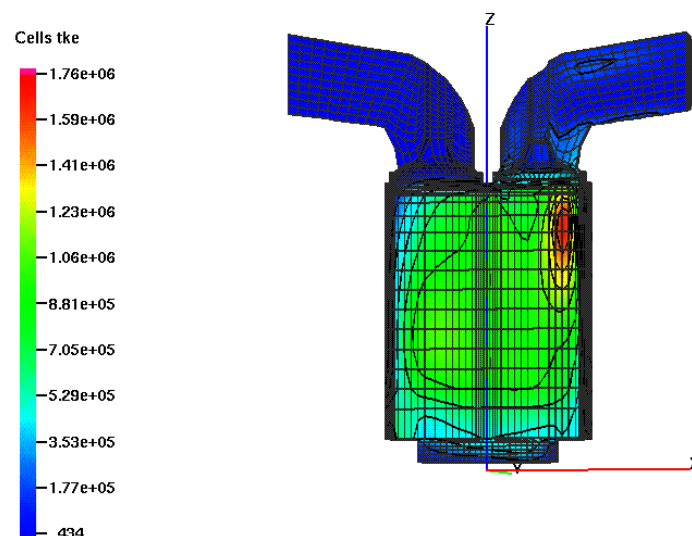


Figure 4.6: Distribution de l'énergie cinétique turbulente à 180° avant le PMH

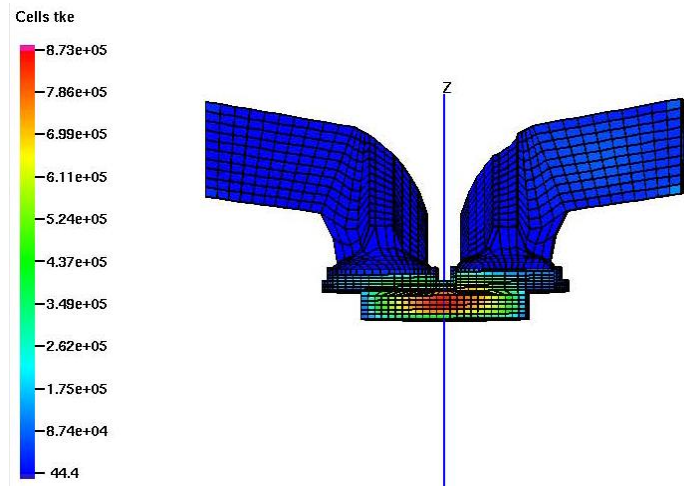


Figure 4.7: Distribution de l'énergie cinétique turbulente à 15° avant le PMH

Les figures 4.6 et 4.7 montrent la distribution de l'énergie cinétique turbulente. On peut remarquer une diminution du nombre de cellules due au mouvement du maillage indiquant la compression. L'énergie cinétique turbulente est maximale dans la région de la soupape d'admission juste avant sa fermeture due au rétrécissement de la section de passage de l'air comprimé.

Dans la figure 4.7, à la fin de la phase de compression, on remarque que la turbulence prend globalement des valeurs plus élevées dues au mouvement ascendant du piston et le rapport des intensités de turbulence entre les angles -15° et -180° avant le PMH est d'environ 2.

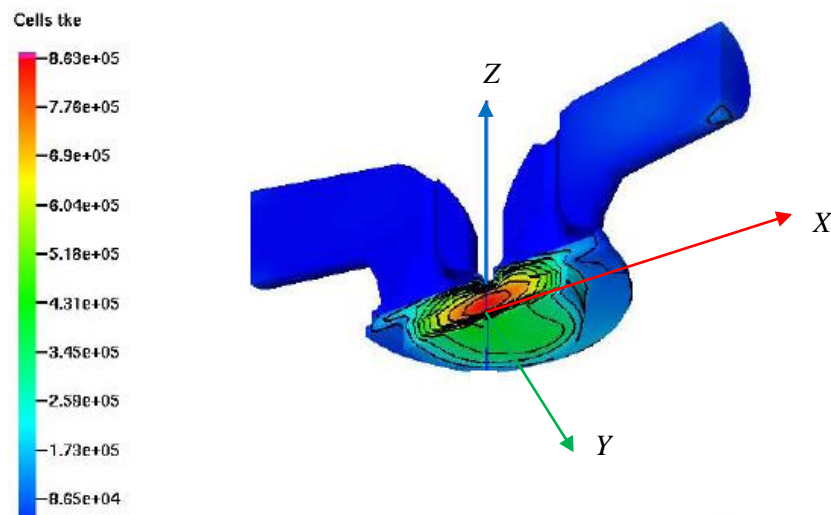


Figure 4.8: Mouvement de Squish

Quand le piston s'approche du PMH les gaz occupant le volume aux rayons externes du cylindre sont forcés à s'écouler radialement vers l'intérieur pendant que ce volume externe est réduit pour s'approcher de zéro. Ce mouvement centripète des gaz augmente les niveaux de turbulence vers des valeurs plus élevées, comme on peut le constater sur la figure 4.8.

Parallèlement au mouvement de Squish, quand le piston s'approche du PMH, il produit un écoulement de rotation secondaire appelé le "Tumble". Cette rotation se produit autour des axes perpendiculaires à celui du cylindre. Ce mouvement s'amplifie quand on s'approche du PMH et il est plus dominant à l'intérieur du bowl cylindrique figure 4.8.

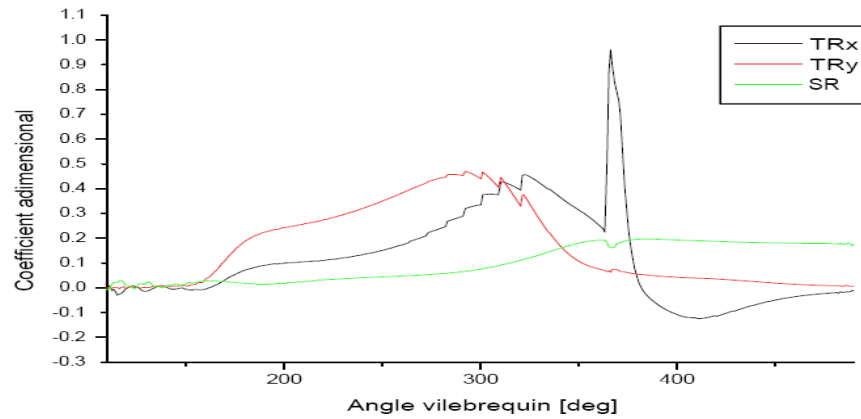


Figure 4.9: Tumble et swirl en régime d'écoulement à froid

La figure 4.9 exprime à l'aide de coefficients adimensionnels l'intensité des mouvements de Tumble TRx et TRy autour des deux axes horizontaux et SR pour le mouvement de Swirl autour de l'axe du cylindre.

Ces mouvements de masse dans le cylindre sont d'un intérêt majeur car ils favorisent le mélange air-carburant et permettent d'écarter rapidement le front de flamme pendant la course de détente [57].

4.4 Allumage

La simulation peut nous préciser le moment de l'allumage, ceci est possible grâce à la poursuite des premières traces des produits de combustion. Dans cette section nous présentons des résultats concernant l'allumage. On prend les résultats concernant la simulation du moteur avec un angle de début d'injection de 8 degrés vilebrequin avant le PMH.

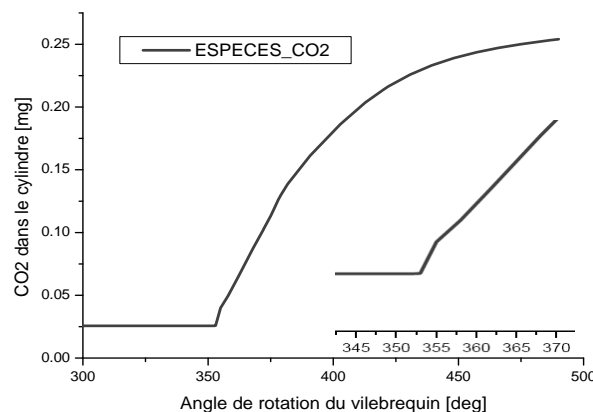


Figure 4.10: Masse de CO2 en fonction de l'angle vilebrequin

La figure 4.10 montre la variation de la masse du CO₂ en fonction de l'angle vilebrequin. Au début de l'injection (dans ce cas, 8° vilebrequin avant le PMH), une fraction de CO₂ était présente dans le cylindre due aux gaz résiduels. Pendant le délai d'auto inflammation (3.5°), cette fraction massique reste presque constante et juste avant l'allumage, le taux de réaction monte rapidement et on aura une augmentation raide de la masse de CO₂.

Il faut noter que la capture du délai d'auto inflammation est très délicate et nécessite l'utilisation d'une chimie détaillée, la valeur de 3.5° n'est donnée qu'à titre indicatif. Ce délai d'allumage peut être détecté grossièrement par l'analyse des courbes de pression ou du taux de dégagement de chaleur comme suggéré par Heywood [1].

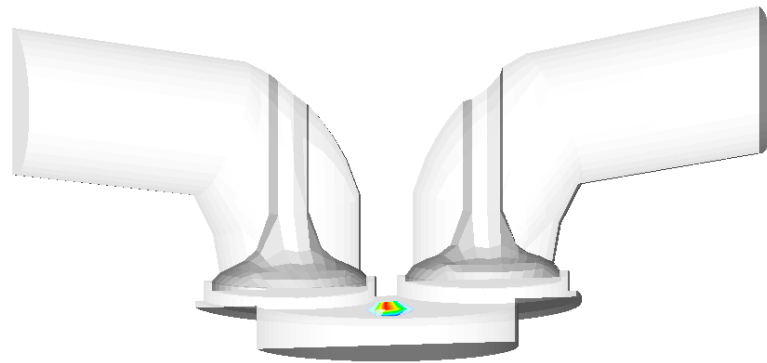


Figure 4.11: Premières cellules d'allumage

La figure 4.11 montre l'emplacement des premières cellules d'allumage. Ces cellules correspondent à une densité de carburant d'environ 0.046.

L'évaporation des gouttelettes de spray nécessite l'absorption d'une certaine quantité de chaleur de l'air comprimé. la figure 4.12 illustre cet aspect.

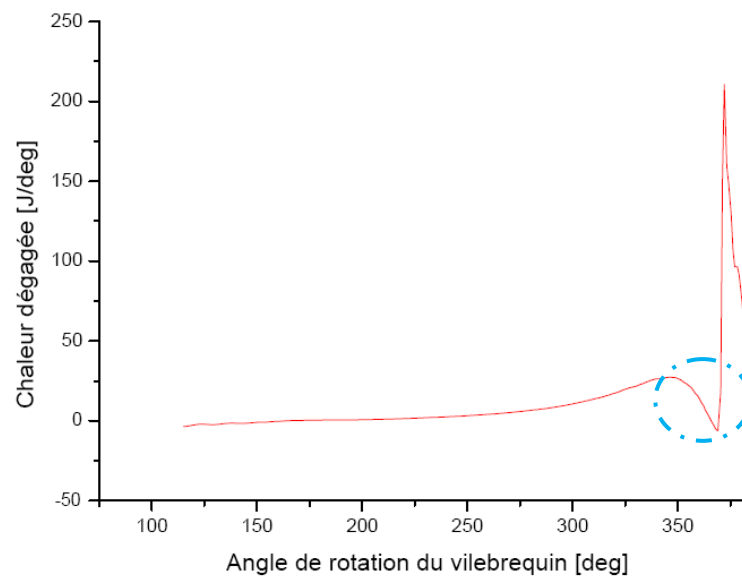


Figure 4.12: Taux de dégagement de chaleur

En outre, on peut voir sur la figure 4.13 que la température du cœur du jet est basse du fait que le carburant est injecté à une température plus basse que celle de l'air qui environne le jet. Les températures dans les régions riches en carburant sont plus basses que dans les régions où le carburant se penche loin de l'injecteur. Par conséquent, l'allumage se produit dans ces dernières régions.

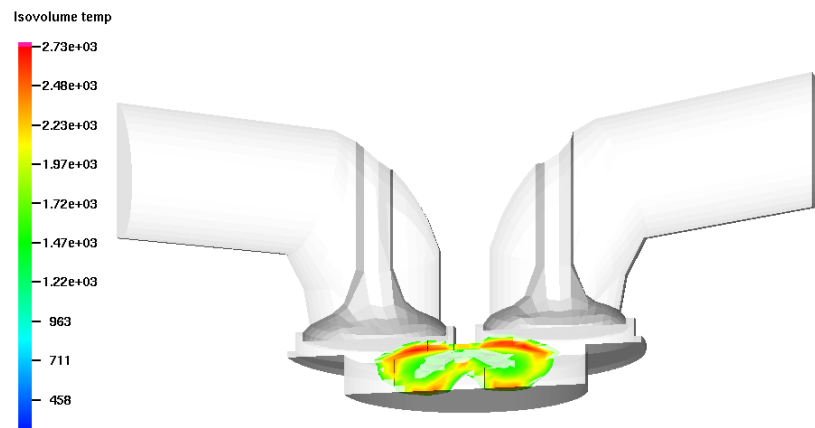


Figure 4.13: Distribution de la température pendant l'injection

4.5 Evolution de la flamme

L'étude de l'évolution de la flamme a été basée sur la combinaison des modèles de turbulence et de chimie. Les figures 4.14 à 4.16 montrent le développement de la flamme à différents emplacements du vilebrequin.

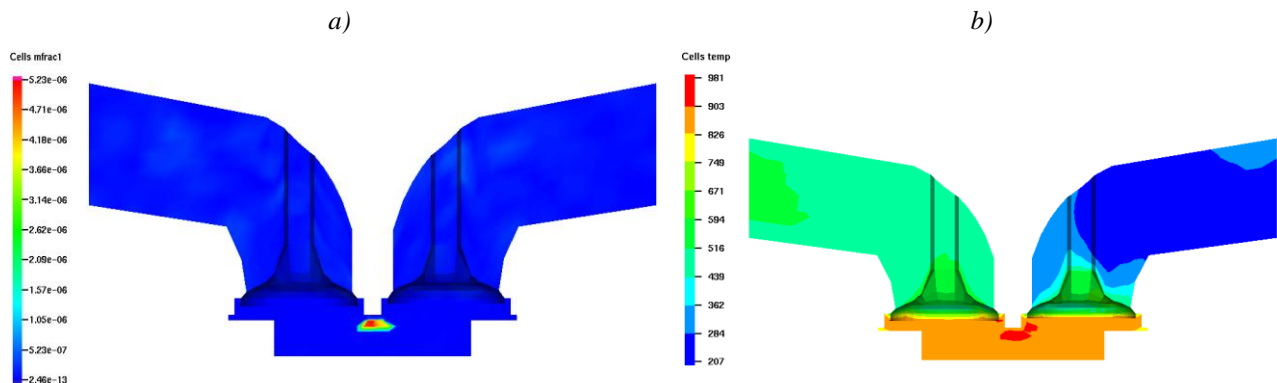


Figure 4.14: Evolution de la flamme à 4.5 degrés avant le PMH

La figure 4.14 est prise à 4.5 degrés avant le PMH c'est à dire juste au moment d'allumage. La figure 4.14 (a) montre le champ de la fraction massique de fuel, tandis que la figure 4.14 (b) montre le champ de la température. L'allumage se produit vers l'amont de l'injecteur à l'extrémité du jet (la première zone du jet qui se mélange avec de l'air) et la flamme vient juste de commencer son évolution.

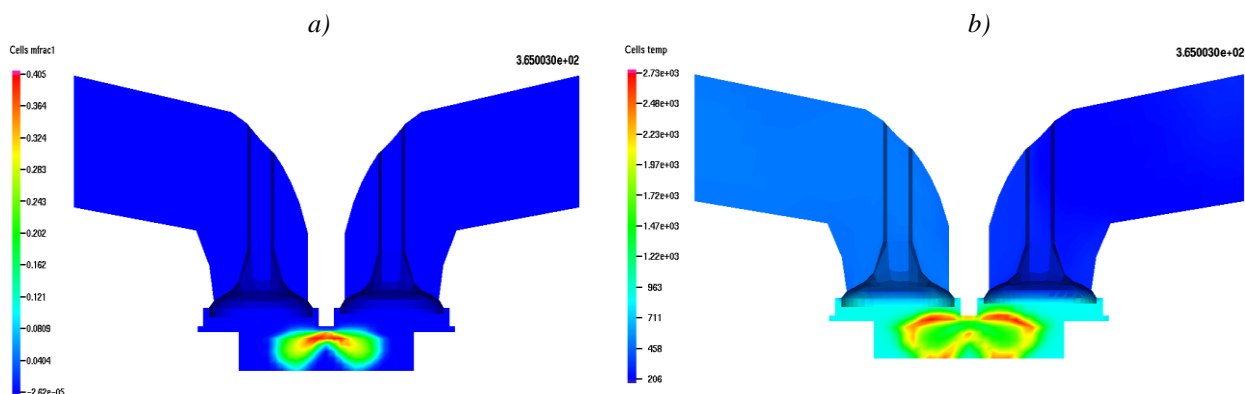


Figure 4.15: Evolution de la flamme à 5 degrés après le PMH

Après environ 5 degrés vilebrequin après le PMH, le champ de la fraction massique représenté sur la figure 4.15 (a) expose davantage la diffusion de la flamme vers l'extérieur du jet. C'est non seulement parce que plus de carburant a été injecté, mais également parce que les températures de la flamme font évaporer le carburant plus rapidement. Le champ de la température représenté sur la figure 4.15 (b) montre clairement la propagation de la flamme qui s'éloigne dans les régions pauvres et riches en carburant. La partie très riche plus proche de l'injecteur reste froide et les températures les plus élevées sont captées, comme prévu, dans les zones proches de la stœchiométrie.

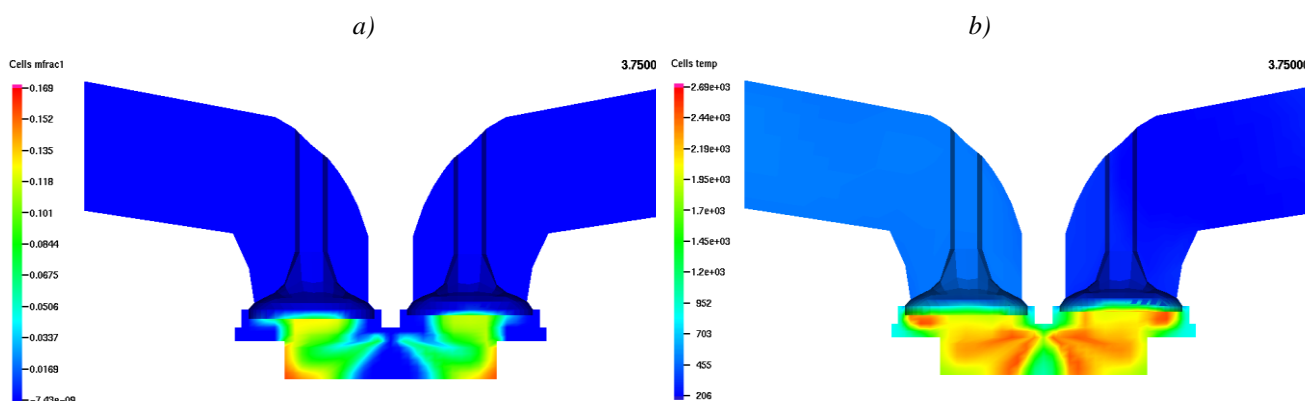


Figure 4.16: Evolution de la flamme à 15 degrés après le PMH

L'avancement de la flamme après 15 degrés vilebrequin après le PMH est montré sur la figure 4.16 (a) et (b). Le champ de concentration en carburant et le champ de la température sont écartés considérablement. On observe des températures maximales d'environ 2500 K. Puisque très peu de régions riches existent à cet angle de vilebrequin, les températures plus élevées sont observées presque partout à l'exception des sections où aucun carburant n'existe, comme indiqué par les sections vertes dans le champ de température et bleues dans le champ de la fraction massique.

4.6 Formation de polluant

En simulant le processus de combustion dans un moteur, non seulement les champs de la température et de la propagation de la flamme sont calculés, mais la formation des polluants peut être également prévue.

L'un des principaux polluants dans le moteur diesel est les NOx (paragraphes 1.3.3 et 1.4). Dans cette étude le NO thermique a été prévu en utilisant le mécanisme de Zeldovich présenté dans la section (2.5.5.1).

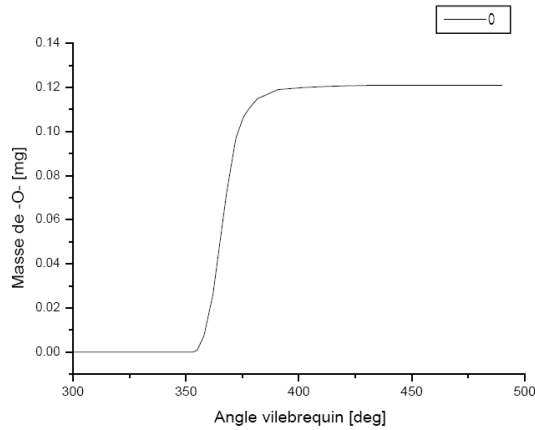


Figure 4.17: Masse des atomes de O

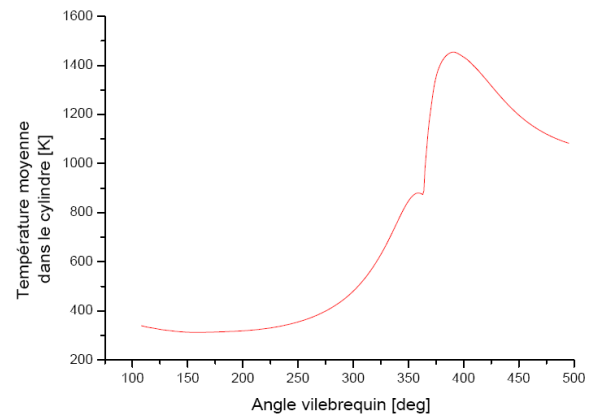


Figure 4.18: Température moyenne dans le cylindre

La formation de NO est régie par deux facteurs principaux : la concentration en O et la température. La formation de NO est extrêmement sensible à la température due à la grande énergie d'activation de la réaction.

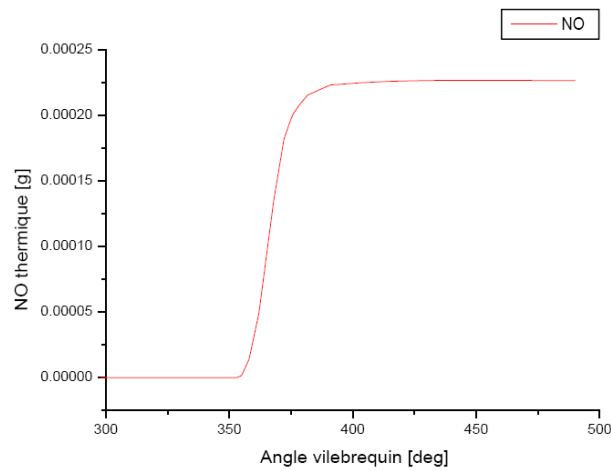


Figure 4.19: Masse du NO thermique.

La figure 4.19 montre la concentration moyenne de NO. L'élévation de cette concentration en NO se manifeste d'une manière rapide juste après le début de la combustion. La formation de NO augmente avec l'avance de la combustion et l'augmentation de la pression moyenne dans le cylindre. Après le pic de la pression, les températures des gaz brûlés diminuent en raison de leur détente et à cause des transferts de chaleur à travers les parois du cylindre. Cet abaissement de température amorti la chimie de NO et sa concentration demeure relativement constante [1].

4.7 Champs dynamique et scalaire

4.7.1 Champ de vitesse

La figure 4.20 illustre la distribution des vitesses pour différents angles pendant les phases d'admission d'air et d'échappement des gaz brûlés. On remarque une augmentation de la magnitude de la vitesse d'écoulement à la fin de la phase d'admission par le fait de la fermeture de la soupape d'admission et inversement une diminution de sa magnitude vers la fin de la phase d'échappement.

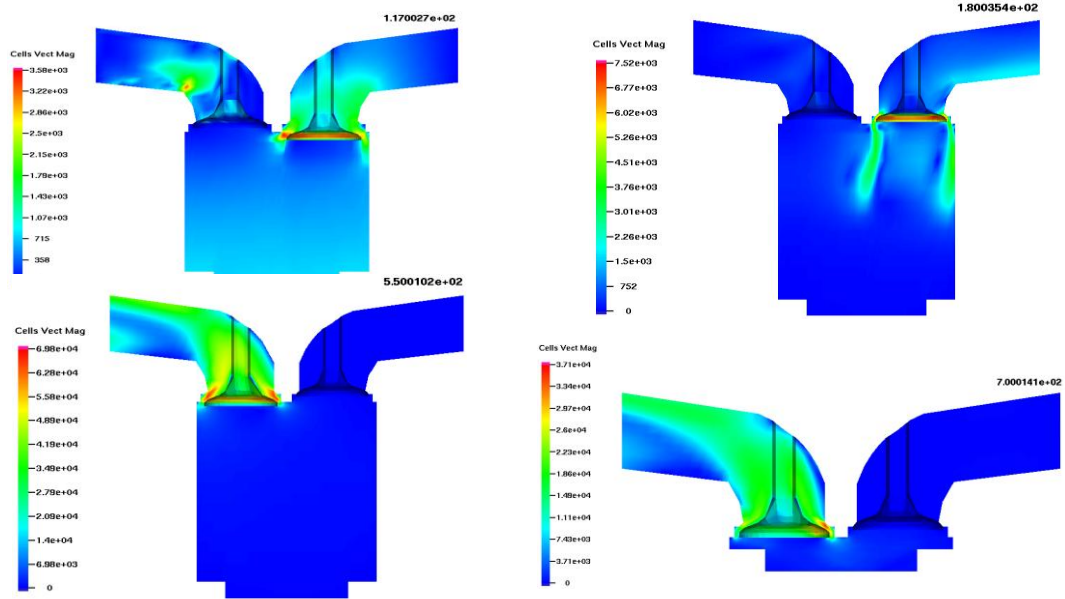
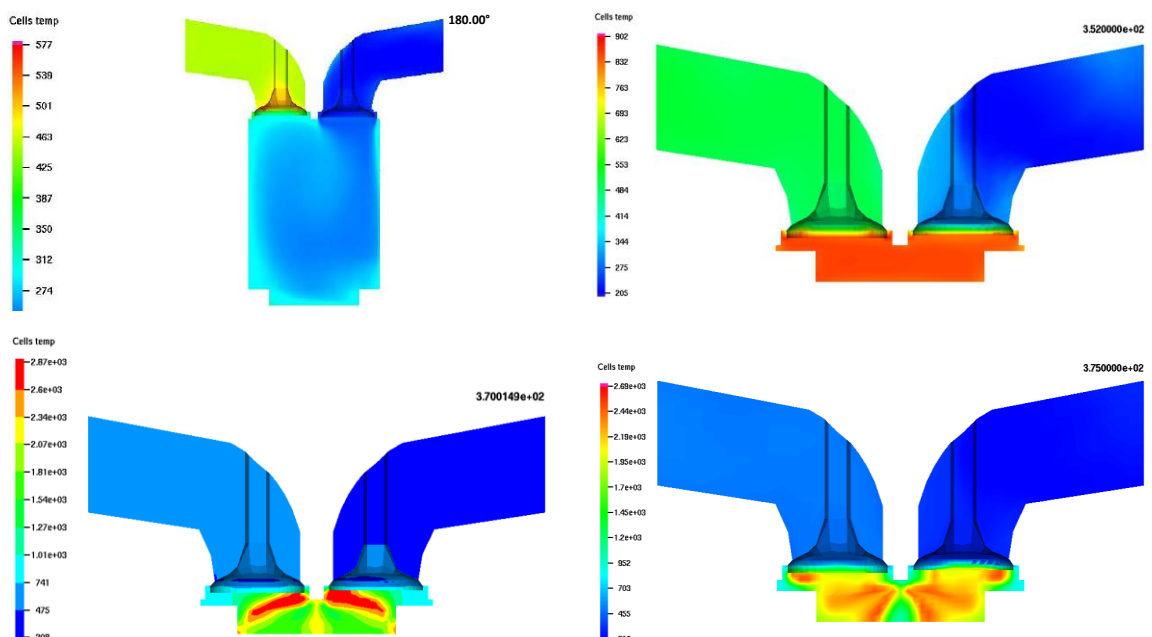


Figure 4.20: Champ de vitesse pendant l'admission et l'échappement

4.7.2 Champ de la température

La figure 4.21 représente l'évolution des champs de la température dans l'espace de calcul pour différents angles de rotation du vilebrequin.



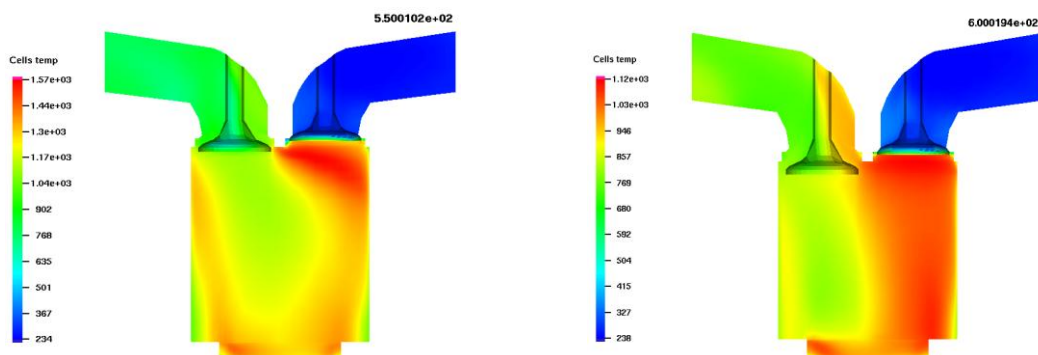


Figure 4.21: Champs de la température pendant différents angles de vilebrequin

4.7.3 Fraction massique de CO2

La figure 4.22 montre l'évolution de la fraction massique du dioxyde de carbone CO₂. Pour différents angles de vilebrequin, on remarque que cette fraction augmente lors de la phase de combustion en vertu de l'équation globale de la réaction présentée dans le deuxième chapitre.

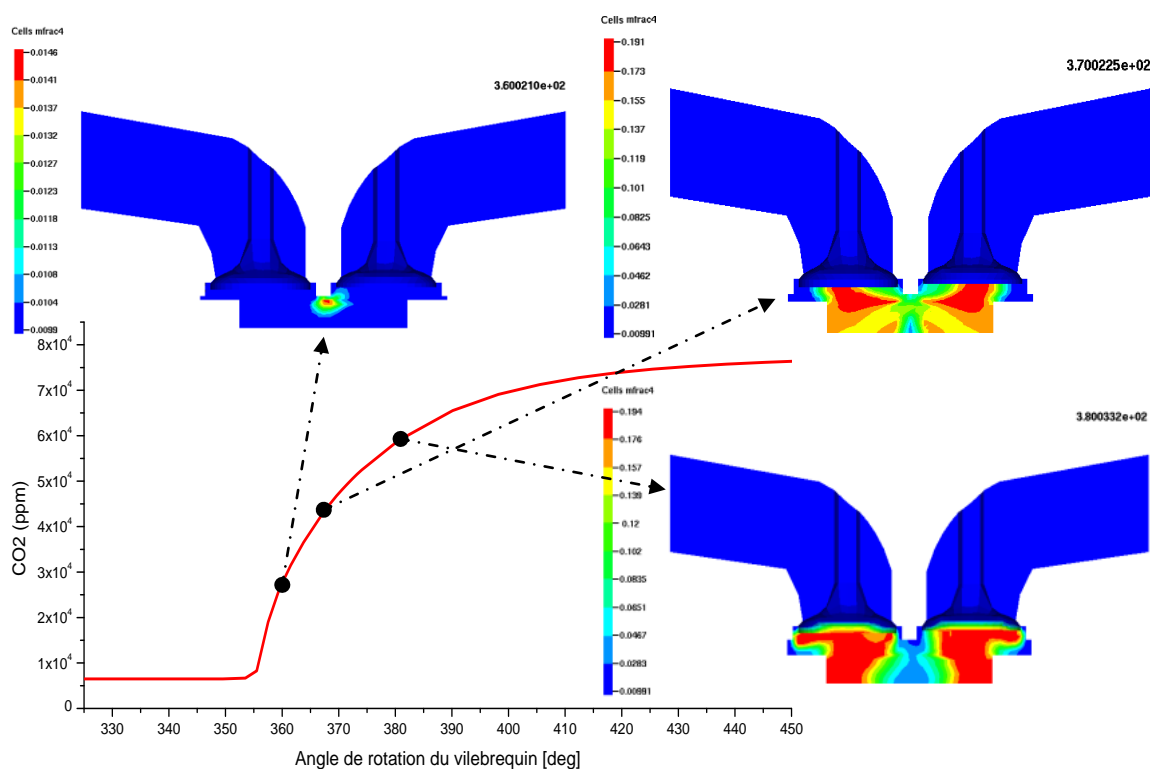


Figure 4.22: Champ de la fraction massique de co2

4.7.4 Evolution du spray

L'évolution du spray est représentée sur les champs iso-volume de la fraction massique de carburant et de la température sur la figure 4.23. Ces champs montrent que la combustion ne se produit pas dans le cœur du jet trop riche en carburant mais dans les zones proches de la stœchiométrie.

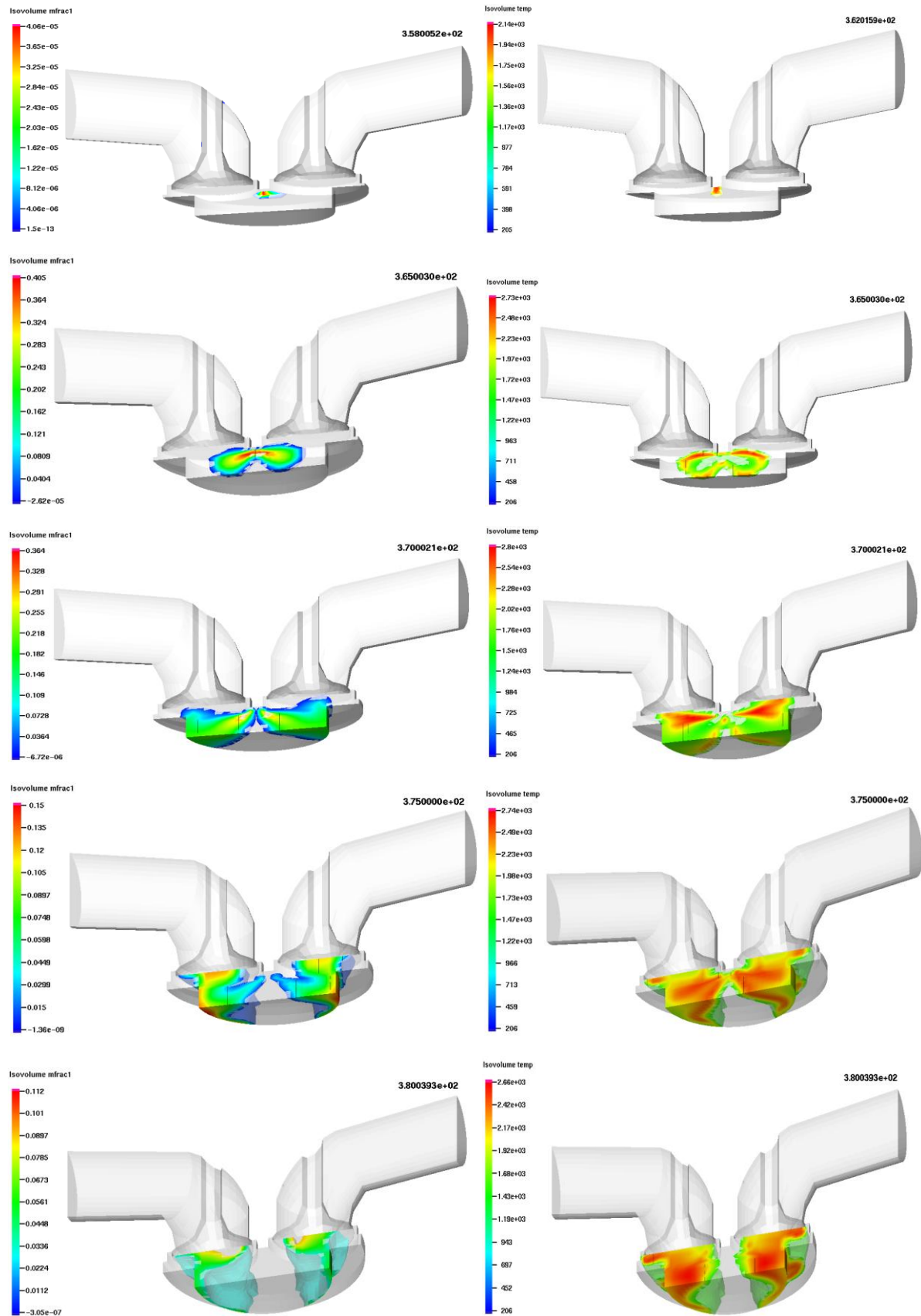


Figure 4.23: Champs iso-volume du spray et de la température

4.8 Etude paramétrique du jet

Cette partie est consacrée à l'étude du comportement du spray dans une chambre de combustion d'un moteur Diesel à injection directe en utilisant le code KIVA 3v lors de l'injection et la combustion. L'étude est réalisée sur un maillage symétrique conçu par bloc. Le spray injecté est un cône axisymétrique, figure 4.24

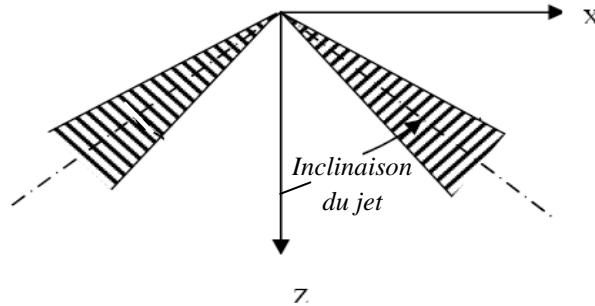


Figure 4.24: Forme du jet

Pour la comparaison des résultats de la simulation, on a exploité la pression moyenne dans le cylindre rapporté par la référence [56]. Les conditions initiales prises en compte dans les calculs numériques sont :

- Température d'admission d'air : 320 K
- Température d'échappement des gaz brûlés 650 K
- Température de chambre : 329 K
- Température des soupapes : 523 K
- Température de carburant : 344 K

4.8.1 Effet de l'inclinaison du jet

Les figures 4.25 et 4.26 montrent une légère variation de la pression et de la température maximales dans le cylindre en fonction de l'angle d'inclinaison du jet.

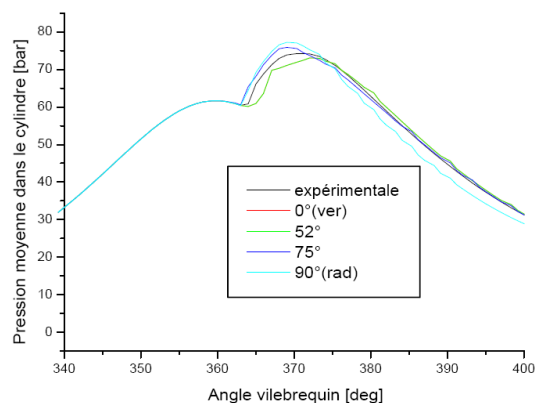


Figure 4.25: Evolution de la pression moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes inclinaisons de jet.

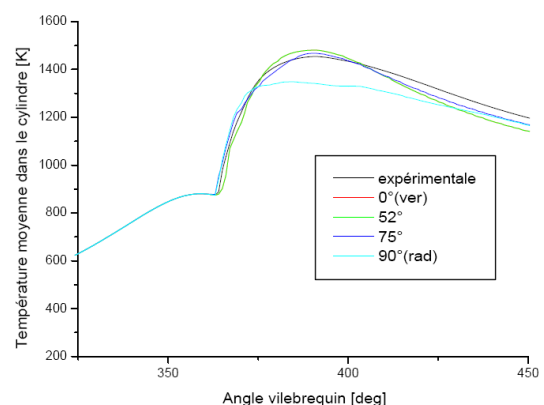


Figure 4.26: Evolution de la température moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes inclinaisons de jet

4.8.2 Effet du diamètre du jet

Les figures 4.27 et 4.28 représentent l'évolution de la pression moyenne et de la température moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin en variant le diamètre du jet. Ces figures illustrent le grand effet de la variation du diamètre sur la pression et sur la température maximales. On remarque qu'au fur et à mesure que le diamètre diminue, la pression maximale devient de plus en plus importante ce qui engendre une température maximale élevée et donc des contraintes thermiques et mécaniques plus importantes sur les éléments du moteur (piston, culasse, bielle...).

Le déplacement de la position du pic de pression par rapport au PMH en fonction de la valeur du diamètre du jet, indique que la taille de ce dernier influe sur la vitesse de consommation du combustible

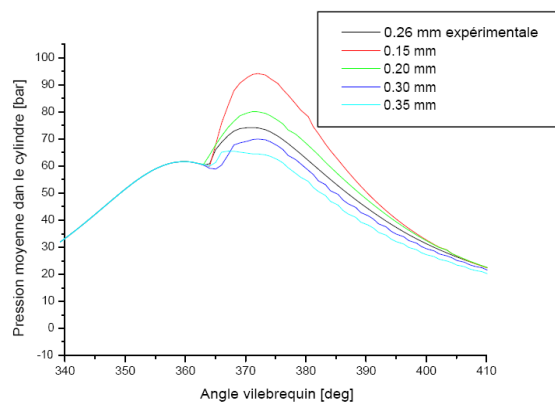


Figure 4. 27: Evolution de la pression moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents diamètres de jet.

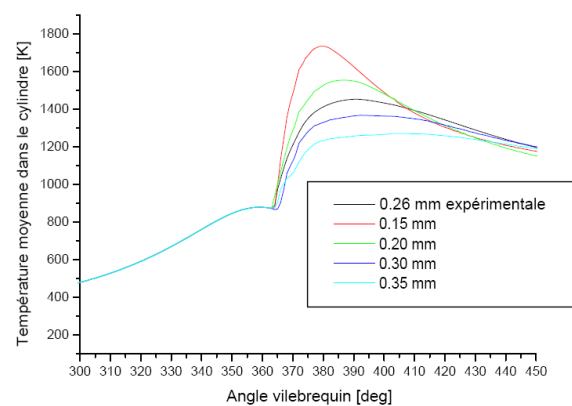


Figure 4.28: Evolution de la température moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents diamètres de jet.

4.8.3 Effet de l'instant d'injection

L'angle du début d'injection a une grande influence sur la pression et la température moyennes dans le cylindre. Cela est tout à fait logique car l'avance à l'injection conduit à avancer toutes les phases de combustion, c'est à dire au déplacement de tous les points qui marquent les débuts et les fins de ces phases.

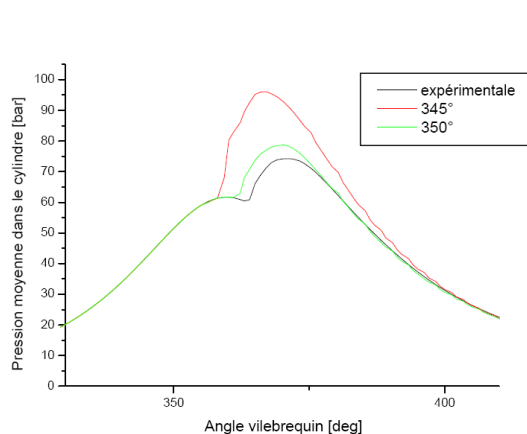


Figure 4.29 : Evolution de la pression moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents angles d'injection.

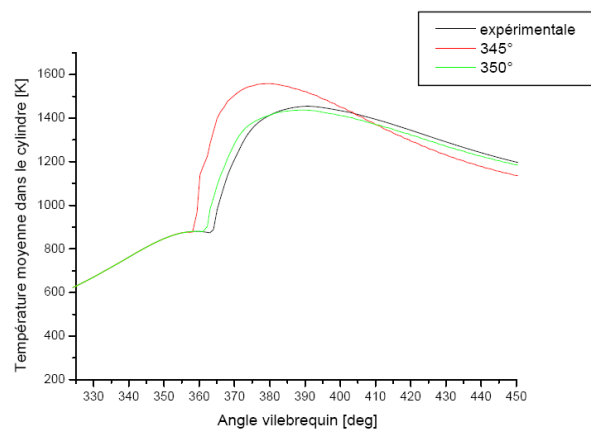


Figure 4.30: Evolution de la température moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents angles d'injection.

4.8.4 Effet de la vitesse d'injection

Les figures 4.31 et 4.32 montrent l'effet important de la vitesse d'injection sur la pression et la température moyennes, ceci est justifié par son influence sur le taux d'évaporation du combustible [20]. En ce qui concerne la vitesse de 200m/s, on a un taux d'évaporation très élevé et par conséquent un maximum plus élevé de la pression moyenne. Cependant, pour la vitesse 250m/s la pression moyenne a chuté, d'où l'existence d'un optimum.

La chute de pression pour des valeurs plus élevées de la vitesse d'injection est due au fait que les particules à grande vitesse adhèrent à la paroi du piston avant qu'elles n'aient le temps de s'évaporer.

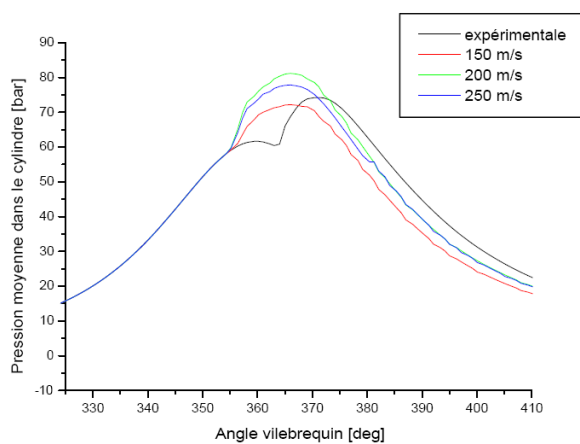


Figure 4.31 : Evolution de pression moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes vitesses d'injection.

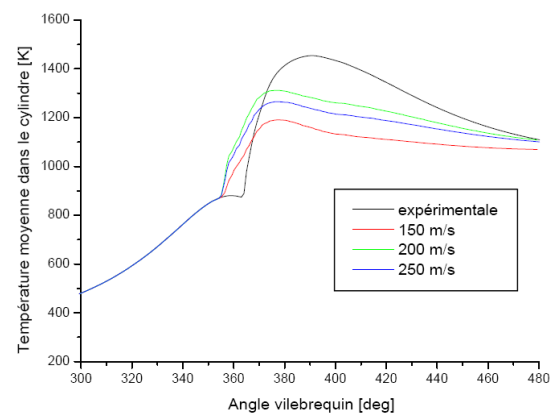


Figure 4.32 : Evolution de la température moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes vitesses d'injection.

L'avance à l'injection, la variation du diamètre des injecteurs et l'injection à grande vitesse jouent un rôle décisif sur les performances du moteur diesel, car elles marquent le début et la fin des phases de la combustion Diesel (pré-mélange et turbulente) [1], d'où l'importance de leur influence sur la qualité de la pulvérisation du carburant et de son mélange avec l'air et leur incidence directe sur les performances du moteur Diesel.

Conclusion et perspectives

Ce travail de simulation des écoulements réactifs avec la présence d'un spray dans les moteurs diesel a été tracé pour un objectif double ; d'une part la nécessité, de comprendre les mécanismes qui régissent ces écoulements, et d'autre part, la maîtrise d'un puissant code de calcul en l'occurrence le code "KIVA" qui peut simuler ces écoulements. L'étape d'apprentissage du code de calcul m'avait pris un temps considérable vu la multitude des réglages disponibles sous le code ainsi que la compréhension des différents modules utilisés et des différents paramètres à ajuster.

Dans cette étude, nous avons mené une investigation numérique concernant le processus de combustion dans un moteur Diesel suralimenté par turbocompresseur à géométrie variable. Les simulations numériques montrent à la fois une simplicité, une économie et une performance, pour étudier et comprendre le processus de combustion qui est en fait l'ensemble de trois phénomènes complexes : l'écoulement diphasique, la combustion et la turbulence.

La reproduction des résultats expérimentaux a été accomplie avec succès en utilisant les modèles physique et chimique adoptés. Un examen détaillé a été fait sur les caractéristiques de l'écoulement à froid, sur l'allumage, sur l'évolution de la flamme et sur la formation de NO thermique. Les résultats préliminaires obtenus dans l'étude paramétrique du jet et les tests effectués sur différentes configurations de jet ont montré les potentialités qu'offre le code KIVA pour envisager des simulations de systèmes dans des configurations inhabituelles. En outre, la modélisation permet d'avoir accès à des variables qui se révèlent parfois difficiles, voir impossible à appréhender directement sur le moteur. La simulation numérique permet de tester différentes possibilités envisageables pour ne retenir que la plus pertinente, ce qui réduit énormément les efforts de conception et d'expérimentation des prototypes de moteur à allumage par compression. En résumé, la simulation est une source assez flexible d'informations utiles et peu coûteuse.

La fonction du système d'injection qui consiste à doser et à injecter le carburant dans la chambre de combustion occupe une place centrale dans les moteur Diesel, du fait que la puissance délivrée par le moteur et ses émissions sont liées directement à la masse de carburant injectée, à sa pression d'injection, à la durée d'injection et à l'angle du début d'injection. Donc le système d'injection joue le rôle principal dans toute procédure concernant l'optimisation des performances du moteur.

Ce travail préparé au Laboratoire de Recherche en Technologie de l'Environnement LTE m'a permis de franchir le domaine de la simulation numérique à l'aide du code de calcul KIVA-3V qui traite les écoulements turbulents réactifs avec spray. Il m'a permis d'atteindre les objectifs du stage :

- ✓ la connaissance approfondie des phénomènes de mélange et de combustion dans un moteur à allumage par compression à injection directe, l'évolution du processus de combustion et les mécanismes de formation des émissions des NOx.
- ✓ Cerner les éléments fondamentaux pour la simulation numérique de la combustion, notamment les équations qui régissent les écoulements réactifs, les modèles utilisés et la formulation mathématique nécessaire, en vu de l'optimisation des performances énergétiques et environnementales.
- ✓ Prise en main du code de calcul : Maîtriser le paramétrage des fichiers d'entrée du code de calcul, l'exploitation des fichiers de résultats à l'aide du post-processeur qui permet la valorisation des différents résultats à travers l'analyse des champ dynamiques et scalaires dans le but d'une meilleure compréhension des phénomènes liés à la combustion turbulente dans des géométries complexes telle que le moteur Diesel. Il faut noter ici la caractéristique importante de KIVA qui est un code « avec sources ouvertes » ceci permet l'accès aux divers modules existant et qui peuvent être modifiés selon les demandes de l'utilisateur.

Comme perspectives, plusieurs voies peuvent être considérées à l'aide du code KIVA. Après approfondissement de sa maîtrise, il s'agira de mener des travaux d'optimisation des performances du moteur Diesel en étudiant plusieurs aspects (carburants alternatifs, nouveaux modes de combustion, géométrie de la chambre de combustion, régimes singuliers...). Aussi, le développement de sous-modèles qui traitent le spray reste un objectif intéressant.

Bibliographie

- [1] Heywood J. B: Internal Combustion Engine Fundamentals, McGraw-Hill, New York, 1988.
- [2] Grondin. O : Modélisation du Moteur à Allumage par Compression dans la Perspective du Contrôle et Diagnostic, Thèse de doctorat Université de ROUEN-2004.
- [3] Laguitton. O: Advanced Diesel combustion for Ultra-Low Emissions, Doctorate of philosophy thesis, University of Brighton-School of Engineering- in collaboration with Ricardo UK, October 2005.
- [4] Bencherif. M, Liazid. A, Taserout. M : Pollution Duality in Turbocharged Heavy Duty Diesel Engine, International Journal Vehicle Design, Vol.50.Nos.1/2/3/4, pp182-195. 2009.
- [5] Henein. N.A, Singh.I.P, Zhong.L, Lai.M.-C., Bryzik, W: New Integrated Strategies for Low Emissions in HSDI Diesel Engines, SAE Paper 2003-01-0261.
- [6] Wuensche. P, Moser. F. X, Dreisbach. R, Sams. T : Can the Technology for Heavy Duty Diesel Engines be Common for Future Emission Regulations in USA, Japan and Europe? SAE Paper 2003-01-0344.
- [7] Henein N.A, Lai. M.C, Singh. I, Wang. D, Liu. L : Emissions Trade-Off and Combustion Characteristics of a High-Speed Direct Injection Diesel Engine,SAE Paper 2001-01-0197.
- [8] Zheng. M, Reader. G. T and Hawley. J.G : Diesel engine exhaust gas recirculation - a review on Advanced and novel concepts, Energy Conversion & Management 45 (2004), no 6883_900.
- [9] Abd Allah. G. H : Using exhaust gas recirculation in internal combustion engines: a review, Energy Conversion & Management 43 (2002), no. 8, 1027_1042.
- [10] Arcoumanis. C, Bae. C, Nagwaney. A and Whitelaw. J. H : Effect of EGR on combustion development in a 1.9L DI Diesel optical engine, SAE Paper (1995), no. 950850.
- [11] Payri, F, Benajes, J, Molina. S, Manuel Rieso J : Reduction of Pollutant Emissions in a HD Diesel Engine by Adjustment of Injection Parameters, Boost Pressure and EGR, SAE Paper 2003-01-0343.
- [12] Chi. Y, Cheong. J, Kim. C, Choi. K : Effects of VGT and Injection Parameters on Performance of HSDI Diesel Engine with Common Rail FIE System, SAE Paper 2002- 01-0504.
- [13] Kawashima. J.I, Ogawa. H, Tsuru. Y: Research on a Variable Swirl Intake Port for 4-Valve High-Speed DI Diesel Engines, SAE Paper 982680.
- [14] Browne. K. R, Partridge. I. M, Greeves. G : Fuel Property Effects on Fuel/Air Mixing in an Experimental Diesel Engine, SAE Paper 860223.
- [15] Whelan. S : Down-Sizing Diesel Powertrain for Use in Fuel Efficient Mild Hybrid Vehicles J, SAE Paper 20015343.
- [16] Pierpont. D, Montgomery. D, Reitz. R : Reducing Particulate and NOx Using Multiple Injections and EGR in a DI Diesel, SAE Technical Paper 950217.

- [17] Arjan Helmantel : Reducing Diesel Engine Emissions An Experimental Investigation thesis for the degree of licentiate in engineering Department of Thermo and Fluid Dynamics CHALMERS UNIVERSITY OF TECHNOLOGY Göteborg, Sweden, 2004.
- [18] Bakenhus. M, Reitz.R .D : Two-Color Combustion Visualization of Single and Split Injections in a Single-Cylinder Heavy-Duty DI Diesel Engine Using an Endoscope- Based Imaging System, SAE Technical Paper 1999-01-1112.
- [19] Reitz R.D and C.J Rutland : Development and Testing Of Diesel Engine CFD Models, Sri Vol.21,pp 173-196.1995.
- [20] Haddad. F, Nemouchi. Z, Boulahbib. M. S : Influence des paramètres du jet sur la formation du spray dans une chambre de combustion d'un moteur diesel,revues LEAE université Mentouri-Constantine
- [21] Ramadan Bassem : A study of Swirl Generation in DI engines Using KIVA3v,Kettering University. Engine Research Center 2000.
- [22] Dohoy Jung and Dennis N.Assanis : Multi zone diesel spray combustion model for cycle Simulations studies of performance and emissions, SAE paper 2001-01-1246.
- [23] Alberto Broatch, Xandra Margot, Antonio Gil, Christian Donayre : Influence of the injection conditions and load on the combustion chamber resonance in DI Automotive Diesel Engines, CMT-Motores Termicos, Universidad Politécnica de Valencia.Camino de vera s/n. 46022Valencia.Spain, 2004.
- [24] Way Lee Cheng, Robert Wang, Jared Zhao and Chia-fon F.Lee: A comparaison of Numerical Results for an Optically Accessible HSDI Diesel Engine with Experimental Data, University of Illinois at Urbana-champaign, 2005.
- [25] Christos A.Chryssakis, Deniss N. Assanis: Effect of Multiple Injection On Fuel-Air Mixing And Soot Formation In Diesel Combustion Using Direct Flame Visualization And CFd Techniques, ASME Internal Combustion Division, Spring Technical Conference April 5-7, 2005,Chicago, IL, USA.
- [26]. Han. Z. Uludogan, A, Hampson G.J, Reitz. R.D : Mechanism of Soot and NOX Emission Reduction Using Multiple-Injection in a Diesel Engine, SAE Technical Paper Series, 960633, 1996.
- [27] Timothy J. Jacobs, Stanislav V.Bohac, Deniss N. Assanis, Patrick G. Szmkowicz: Lean and Rich Premixed Compression Ignition Combustion in a Light-duty Diesel Engine SAE paper2005-01-0166.
- [28] Haiyong Peng, Yi Cui, Lei Shi, Kangyao: Effects of Exhaust Gas Recirculation (EGR) on combustion and emissions during cold start of direct injection diesel engine, J Energy 2006.10.014.
- [29] Cenk Sayin Kadir Uslu, Mustafa Canakci : Influence of injection timing on the exhaust emissions of a dual-fuel CI engine, Renewable Energy 33 (2007)1314-1323.
- [30] Hountalas D.T, Mavropoulos G.C, Binder K.B : Effect of exhaust gas recirculation (EGR) Temperature for various EGR rates on heavy duty DI diesel engine performance and emissions, Energy 33 (2008) 272-283.

- [31] Alain maiboom, Xavier Tauzia, Jean-Francois Hetet: Experimental study of various effects of exhaust gas recirculation (EGR) on combustion and emissions of an automotive direct injection diesel engine, *Energy* 33(2008) 22-34.
- [32] Bousbaa. H : Etude de Combustion Turbulente Dans un Moteur Diesel Turbocompressé, Mémoire de Magister, LTE–ENSET-Oran 2008.
- [33] Coppo M, Dongiovanni. C and Negri. C : Effects of multi-injection Mode on diesel homogenous charge compression ignition J. Eng. Gas Turbines Power, Volume 126, Issue 4, 874 DOI:10.1115/1.1787502 - October 2004 .
- [34] Hanho Yun Rolf D. Reitz : An experimental investigation on the effect of post-injection strategies on combustion and emission, J. Eng. Gas Turbines Power Volume 129, Issue 1, 279 (8 pages) DOI:10.1115/1.2180812- January 2007.
- [35] Joan Boulanger, Fengshan Liu, W. Stuart Neill, and Gregory J. Smallwood : An improved phenomenological soot formation sub model J. Eng. Gas Turbines Power Volume 129, Issue 3, 877 (8 pages) DOI:10.1115/1.2718234- July 2007.
- [36] Dohoy Jung and Dennis N. Assanis : Quasidimensional Modeling of direct injection diesel Engine Nitric Oxide, soot and unburned hydrocarbon emissions J. Eng. Gas Turbines Power Volume 128, Issue 2, 388 (9 pages) DOI:10.1115/1.2056027- April 2006.
- [37] Warnatz. J, Mass. U and Dibble R.W : combustion Physical and chemical fundamentals, Modeling and Simulation, Expérimentais, Polluant Formation », 3rd Editions. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2000.
- [38] Notbert Peters : Turbulent combustion. published by the press syndicate of the university of cambridge the pitt building, trumpington street, cambridge, united kingdom Cambridge University Press 2000.
- [39] Carsten, Baumgarten : Mixture Formation in Internai Combustion Engines, ISBN-10-3-540- 30835- Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2006.
- [40] Chrys Correa : Combustion Simulations in Diesel Engines using Reduced Reaction Mechanism)), Thèse de Doctorat, University of Heidelberg 2000.
- [41] Amsden A. A, O'Rourke P. J, Butler T. D : KIVA-II A computer program for chemically reactive flows with sprays, Los Alamos National Laboratory Report LA-115600-MS, 1989.
- [42] Ravindra Aglave : CFD Simulation of Combustion Using Automatically Reduced Reaction Mechanisms: A Case for Diesel Engine, Thèse de Doctorat, University of Heidelberg 2007.
- [43] Anthony A. Amsden : KIVA-3V A Block-Structured KIVA Program for Engines with Vertical or Canted Valves, Los Alamos National Laboratory Report LA-13313-MS, 1997
- [44] Nicolas Baricault : Modélisation de la combustion des sprays par une approche de type RANS/PDF calculée. Prise en compte de l'intermittence aux petites échelles, Thèse de Doctorat. Université de Rouen Juin 2005
- [45] Belardini. P and Sertoli. C : Multi-Dimensional Modeling of Combustion and Pollutants Formation of New Technology Light Duty Diesel Engines, Rev. IFP, Vol. 54 (1999), No. 2, pp. 251-257.

- [46] Roland Borghi, Michel Champion : Modélisation et Théorie des Flammes », Editions TECHNIP, Paris, 2000.
- [47] David Frederick Fletcher Catherine Xuereb : Mécanique des fluides numérique Techniques de l'Ingénieur J 1 050.
- [48] Hirt. C. W, Amsden. A. A. and Cook J. L : An Arbitrary Lagrangian–Eulerian computing method for all flow speeds, Journal of Computational Physics, vol. 14 -3, pp. 227-253, 1974.
- [49] P. J. O'Rourke : Collective drop effects in vaporizing liquid sprays, Thèse de Doctorat 1532-T à l'Université de Princeton, 1981.
- [50] Amsden A. A : KIVA-3 A KIVA Program with Block-Structured Mesh for Complex Geometries, Los Alamos National Laboratory report LA-12503-MS, 1993.
- [51] Amsden A. A : KIVA-3V: A Block-Structured KIVA Program for Engines with Vertical or Canted Valves”, Los Alamos National Laboratory report LA-13313-MS, 1997.
- [52] Amsden A. A : KIVA-3V release 2, improvements to KIVA-3V, Los Alamos National Laboratory report LA-13608-MS 1999.
- [53] Michael J. Holst : Notes on the Kiva-lite Software and Chemically Reactive Fluid Mechanics, Numerical Mathematics Group Computing & Mathematics Research Division Lawrence Livermore National Laboratory, August 1, 1992.
- [54] David J. Torres A, Mario F. Trujillo : KIVA-4 An unstructured ALE code for compressible gas flow with sprays, Journal of Computational Physics 219 (2006) 943-975
- [55] Moreau Jean-Babiston : Modélisation de l'Écoulement Polyphasique à l'Intérieur et en sortie des Injecteurs Diesel – Thèse de Doctorat, INP TOULOUSE-2005.
- [56] Liazid Abdelkrim : Identification du moteur Diesel en régime transitoire, Thèse de doctorat, LMT-Ecole Centrale de Lyon, 1993.
- [57] Willard W. Pulkrabek : Engineering Fundamentals of the Internal Combustion Engine Second Edition Pearson Education Internatinal, 2004-USA.

ANNEXES

A-1 Atomisation

Modèle TAB

O'Rourke et Amsden ont implanté le modèle TAB dans KIVA en 1987. Il est fondé sur une analogie proposée par Taylor entre l'oscillation d'une gouttelette et l'oscillation d'un système {masse + ressort} de masse m et de raideur k . La tension de surface est assimilée à la force de rappel du ressort, la force aérodynamique du gaz à la force extérieure F et les efforts visqueux à l'amortissement b [32.55]. L'oscillateur harmonique forcé et amorti est modélisé :

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F - cx - b \frac{dx}{dt} \quad (\text{A.1})$$

Le fractionnement se produit quand $x > a/2$, où a est le rayon de la gouttelette, qui correspond à $We > We_{\text{crit}} = 6$.

Afin de prédire la taille des gouttelettes après le breakup (fractionnement), on utilise une méthode basée sur la conservation d'énergie. Dans cette analyse on égalise l'énergie de la gouttelette avant le breakup aux énergies combinées des gouttelettes après le breakup. Même si ce modèle traite principalement le fractionnement secondaire des gouttelettes, il a été utilisé dans KIVA pour l'atomisation primaire du jet.

Modèle Wave

Reitz, dans son modèle *Wave*, prend une approche différente en considérant la croissance des instabilités de Kelvin-Helmholtz à la surface d'un jet de diamètre a et de vitesse relative gaz-liquide (figure A.1).

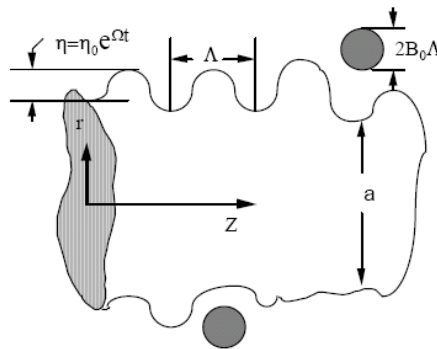


Figure A.1 Schéma de principe du modèle de Reitz

La physique de l'atomisation à grand nombre de Weber est très complexe. Reitz, dans son modèle *Wave* (d'atomisation à grand nombre de Weber). Suppose que l'atomisation se produit du fait du développement d'instabilités de surface de type Kelvin Helmholtz à la sortie de l'injecteur. En s'appuyant sur la théorie linéaire des instabilités, Reitz obtient la longueur d'onde Λ_{KH} et le taux d'accroissement de l'onde Ω_{KH} qui croît le plus rapidement. En fonction des nombres adimensionnels du problème, Reitz obtient les corrélations suivantes :

$$\Lambda_{KH} = \frac{9.02r(1+0.45\sqrt{Z})(1+0.4T^{0.7})}{(1+0.865We^{1.67})^{0.7}} \quad (A.2)$$

$$\Omega_{KH} = \frac{0.34+0.38We^{1.5}}{(1+Z)(1+1.4T^{0.6})} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_L r^3}} \quad (A.3)$$

Où We et Z sont définis avec le rayon du jet et $T_a = Z We^{0.5}$
 Reitz utilise ces résultats pour calculer le *breakup* des gouttelettes, de diamètre a , modélisant le cœur liquide. Le rayon de ces gouttelettes décroît linéairement, pour donner naissance à des gouttelettes fines de rayon r défini comme suit :

$$r_c = B_0 \Lambda_{KH} \quad (A.4)$$

Où B_0 est une constante prise égale à 0, 61. Avec :

$$We = \frac{\rho_s u_r^2 r}{\sigma} \quad \text{Nombre de Weber} \quad Z = \frac{\sqrt{We_L}}{Re_L} \quad \text{Nombre de Ohnesorge}$$

$$Ta = Z\sqrt{We} \quad \text{Nombre de Taylor} \quad We_L = \frac{\rho_L u_r^2 r}{\sigma} \quad \text{Nombre de Weber liquide}$$

$$Re_L = \frac{u_r r \rho_L}{\mu_L} \quad \text{Nombre de Reynolds}$$

Le terme source de destruction \dot{f}_{bu} prend la forme suivante :

$$\dot{f}_{bu} = \int f(\vec{x}, \vec{v}_1, r_1, T_{d1}, \dot{y}_1, t) \dot{y}_1 B(\vec{v}_1, r, T_d, \dot{y}_1, \vec{x}, t) d\vec{v}_1 dr_1 dT_{d1} d\dot{y}_1 \quad (A.5)$$

A-2 Collision [32.40.42]

On distingue deux types de collisions:

- Pour donner une gouttelette simple. Dans ce cas-ci, la température et la vitesse de la nouvelle gouttelette est calculée en utilisant un procédé faisant la moyenne de masse. La nouvelle taille de gouttelette peut être calculée à partir du volume de gouttelette.

-Les deux gouttelettes peuvent entrer en collision, mais sans aucun transfert de masse et d'énergie entre les deux gouttelettes. Elles maintiennent leurs tailles et leurs températures, mais subissent des changements de vitesse.

Pour distinguer quel type de collision, un paramètre d'impact de collision, b est comparé au paramètre critique d'impact, le b_{cr} qui est donné par :

$$b_{cr} = \frac{1}{We} \left[\left(\frac{r_2}{r_1} \right)^3 - 2.4 \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^2 + 2.7 \left(\frac{r_2}{r_1} \right) \right] \quad (A.6)$$

Le nombre de Weber s'écrit de la manière suivante :

$$We = \frac{\rho_d |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| r_1}{\alpha_d (\bar{T}_d)} \quad (\text{A.7})$$

Avec :

$$\bar{T}_d = \frac{r_1^3 T_{d1} + r_2^3 T_{d2}}{r_1^3 + r_2^3} \quad (\text{A.8})$$

Où ρ_d est la densité, α_d coefficient de tension superficielle de liquide.

Si $b < b_{cr}$, alors la collision existe. Ainsi, on peut obtenir une fonction de densité de probabilité de collision σ qui donne le nombre probable de gouttelettes résultant d'une collision entre la gouttelette 1 et 2.

$$\begin{aligned} \sigma = & \frac{b_{cr}^2}{(r_1 + r_2)^2} \delta \left[r - (r_1^3 + r_2^3)^{\frac{1}{3}} \right] \delta \left[\vec{v} - \frac{r_1^3 \vec{v}_1 + r_2^3 \vec{v}_2}{r_1^3 + r_2^3} \right] \delta(T_d - \bar{T}_{d1}) \delta(y - y_2) \delta(\dot{y} - \dot{y}_2) \\ & + \frac{2}{(r_1 + r_2)^2} \int_{b_{cr}}^{\eta_1 + r_2} \delta(r - r_1) \delta(\vec{v} - \vec{v}_1) \delta(T_d - T_{d1}) \delta(y - y_1) \delta(\dot{y} - \dot{y}_1) \\ & + \delta(r - r_2) \delta(\vec{v} - \vec{v}_2) \delta(T_d - T_{d1}) \delta(y - y_2) \delta(\dot{y} - \dot{y}_2)] b db \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Où

$$\vec{v}_1 = \frac{r_1^3 \vec{v}_1 + r_2^3 \vec{v}_2 + r_2^3 (\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \frac{b - b_{cr}}{(r_1 + r_2 - b_{cr})}}{r_1^3 + r_2^3} \quad (\text{A.10})$$

$$\vec{v}_2 = \frac{r_1^3 \vec{v}_1 + r_2^3 \vec{v}_2 + r_2^3 (\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \frac{b - b_{cr}}{(r_1 + r_2 - b_{cr})}}{r_1^3 + r_2^3} \quad (\text{A.11})$$

Le terme source de collision \dot{f}_{coll} est donné par la relation :

$$\begin{aligned} \dot{f}_{coll} = & \frac{1}{2} \iint f(\vec{x}, \vec{v}_1, r_1, T_{d1}, y_1, \dot{y}_1, t) f(\vec{x}, \vec{v}_2, r_2, T_{d2}, y_2, \dot{y}_2, t) \pi (r_1 + r_2)^2 |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \\ & [(\sigma(\vec{v}, r, T_d, y, \dot{y}, \vec{v}_1, r_1, T_{d1}, y_1, \dot{y}_1, \vec{v}_2, r_2, T_{d2}, y_2, \dot{y}_2)) \\ & (- \delta(\vec{v} - \vec{v}_1) \delta(r - r_1) \delta(T_d - T_{d1}) \delta(y - y_1) \delta(\dot{y} - \dot{y}_1)) \\ & - \delta(\vec{v} - \vec{v}_2) \delta(r - r_2) \delta(T_d - T_{d2}) \delta(y - y_2) \delta(\dot{y} - \dot{y}_2)) \\ & \times (d\vec{v}_1 dr_1 dT_{d1} dy_1 d\dot{y}_1 d\vec{v}_2 dr_2 dT_{d2} dy_2 d\dot{y}_2) \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

A-3 Evaporation

Le flux d'énergie sur la surface de la gouttelette avec la température de la gouttelette comme variable peut être écrit comme suit:

$$4\pi r^2 \dot{Q}_d = \rho_d \frac{4}{3} \pi r^3 C_{p,l} \dot{T}_d - \rho_d 4\pi r^2 RL(T_d) \quad (\text{A.13})$$

\dot{Q}_d : Le taux de conduction de la chaleur est donné par la corrélation de Ranz-Marshall

$$\dot{Q}_d = \frac{K_{air}(\hat{T})(T - T_d)}{2r} Nu_d \quad (\text{A.14})$$

Avec :

$$\hat{T} = \frac{2}{3} T_d + \frac{1}{3} T \quad (\text{A.15})$$

Le transfert convectif de la gouttelette est donné par le nombre de Nusselt :

$$Nu_d = \left(2 + 0.6 Re_d^{1/2} Pr_d^{1/3}\right) \frac{\ln(1 + B_d)}{B_d} \quad (\text{A.16})$$

Le nombre de Reynolds et le nombre de Prandtl sont calculés de la manière suivante :

$$Re_d = \frac{2\rho|\vec{u} - \vec{u}'' - \vec{v}|r}{\mu_{air}(\hat{T})} \quad (\text{A.17}) \quad \mu_{air}(\hat{T}) = \frac{A_1 \hat{T}^{3/2}}{\hat{T} + A_2} \quad (\text{A.18})$$

$$A_1 = 1.457 \times 10^{-5} \quad A_2 = 110$$

$$Pr_d = \frac{\mu_{air}(\hat{T}) C_p(\hat{T})}{K_{air}(\hat{T})} \quad (\text{A.19}) \quad K_{air}(\hat{T}) = \frac{K_1 \hat{T}^{3/2}}{\hat{T} + K_2} \quad (\text{A.20})$$

$$K_1 = 252 \quad K_2 = 200$$

Et le nombre de transfert de Spalding est défini comme suit :

$$Br_d = \frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*} \quad (\text{A.21})$$

Le nombre de Spalding représente les gradients sur la surface de la gouttelette. Y_1 est la fraction de masse du carburant dans la phase gazeuse, Y_1^* la fraction de masse sur la surface.

La chaleur latente L dans l'équation (A.13) est donnée par :

$$L(T_d) = E_1(T_d) + \frac{RT_d}{M_1} - E_1(T_d) - \frac{p_v(T_d)}{\rho_d} \quad (\text{A.22})$$

R représente le taux de changement du rayon de la gouttelette et est défini par la corrélation de Frossling :

$$R = -\frac{(\rho D)_{air}(\hat{T})}{2\rho_d r} B_d Sh_d \quad (\text{A.23})$$

$$Sh_d = \left(2 + 0.6 Re_d^{1/2} Sc_d^{1/3}\right) \frac{\ln(1 + B_d)}{B_d} \quad (\text{A.24})$$

Avec: $Sc_d = \frac{\mu_{air}(\hat{T})}{\rho D_{air}(\hat{T})}$

A-4 Accélération de la gouttelette

Le terme d'accélération de la gouttelette F ; contributions dues à la charge aérodynamique et à la force de la gravité :

$$F = \frac{3}{8} \frac{\rho}{\rho_d} \frac{|\bar{u} - \bar{u}'' - \bar{v}|}{r} (\bar{u} - \bar{u}'' - \bar{v}) C_D + \bar{g} \quad (\text{A.25})$$

\bar{u}'' : Vitesse turbulente de gaz

Le coefficient C_D de résistance :

pour $Re_L < 1000$ $C_D = \frac{24}{Re_L} \left(1 + \frac{1}{6} Re_L^{2/3}\right)$

pour $Re_L > 1000$ $C_D = 0.424$

B-1 Caractéristiques du moteur MKDIR 620-145

Type de chambre	Valves Verticales
Nombre de cylindres	06
Diamètre du cylindre	12 cm
Course	14.5 cm
Longueur de bielle	22.7 cm
Squish	0.17 cm
Taux de compression	17
Régime de moteur	1400 tr/min
Couple maximal	158 m daN
Turbocompresseur	Schwitzer type S2BV
Profil de Swirl	3.11
EGR	0 %
Refroidisseur intermédiaire	CHAUSSON 70CV

Tableau B.1 : Caractéristiques du moteur MKDIR 620-145

B-2 Spécifications du système d'injection

Combustible	Diesel #2 "DF2"
Pompe d'injection	Bosch type P.7100
Mode d'injection	profil
Température du combustible	344 K
Angle entre les jets	125°
Début d'injection	8 deg vilebrequin APMH
Durée d'injection	23 deg vilebrequin
Diamètre du trou d'injecteur	2.59E-01 mm
Nombre de Becs d'injection	02

Tableau B.2 : Spécifications du système d'injection

C. Maillage par bloc du moteur étudié

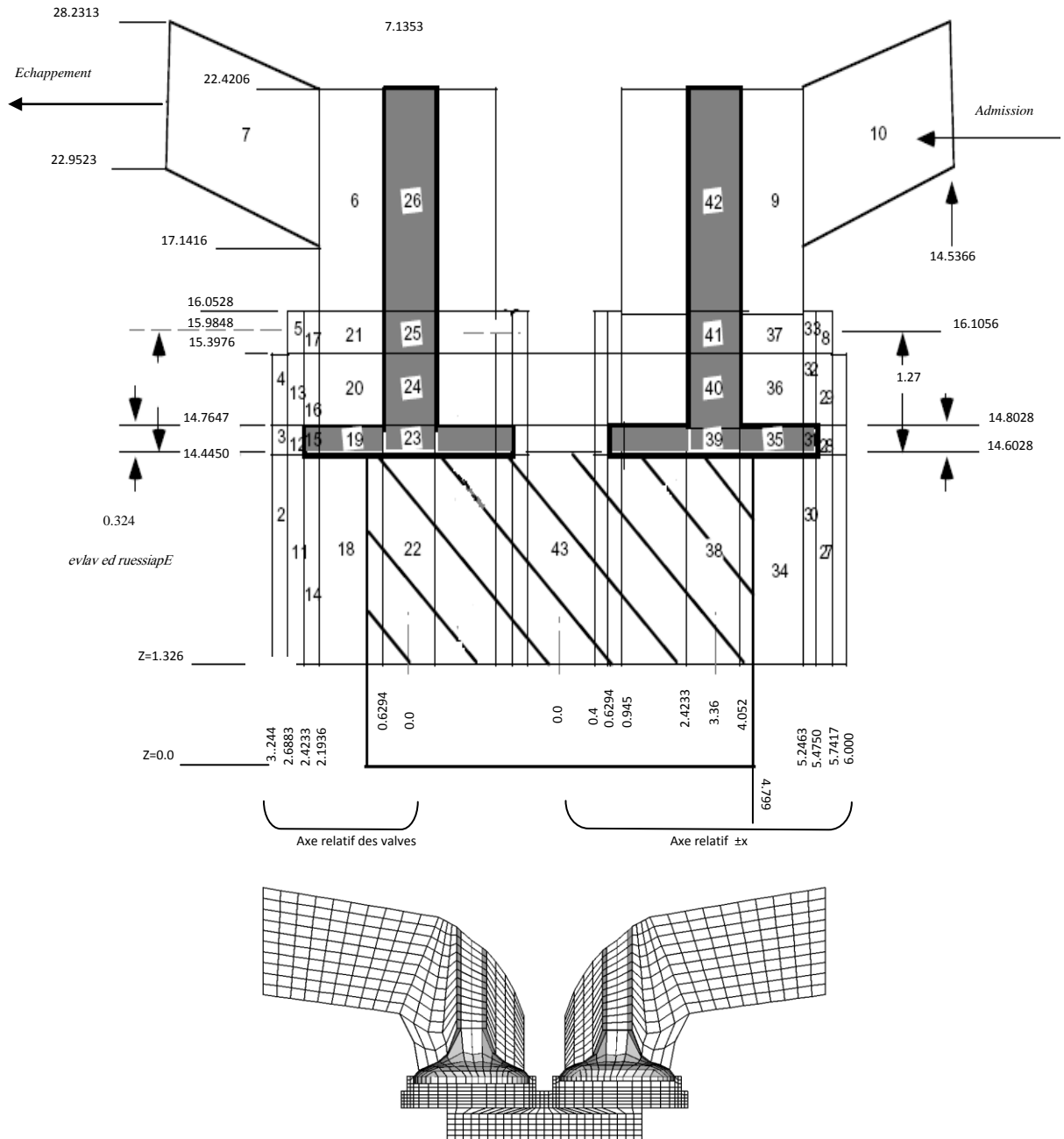


Figure C.1 : Maillage par bloc du moteur étudié

ABSTRACT

Now days the economic and the ecological rules require important reductions in fuel consumption and pollutants emissions of the internal combustion engines. Diesel engine numerical simulation is a very interesting way to optimize at a low cost the combustion characteristics and also to predict pollutants formation. Successful simulation of Diesel combustion requires accurate modeling for the various processes, such as spray behavior, ignition, chemistry, turbulence, etc... as well as the interactions between them.

Numerical investigation of the diesel combustion process at a specific injection conditions was performed in this work using the KIVA-3v code. The numerical prediction shows that the current approach is capable of capturing the essential features of the diesel combustion process such as spray evolution, flame progression and NO_x formation.

Keywords: Diesel engine, modeling, combustion, pollutants, numerical simulation.

RESUME

Le développement actuel des moteurs à combustion interne doit répondre à une volonté persistante de réduction de la consommation et au respect des normes anti-pollution de plus en plus sévères. La simulation de la combustion dans les moteurs diesel est un outil très important car elle permet à un moindre coût une compréhension approfondie des caractéristiques de la combustion et prévoit également la formation de polluants. Une simulation numérique réussie de la combustion diesel exige la modélisation des divers processus, tels que le comportement du jet de carburant, le délai d'allumage, la chimie, la turbulence, etc.... aussi bien que les interactions entre elles.

L'investigation numérique du processus de combustion diesel à différentes conditions d'injection a été effectuée dans ce travail en utilisant le code de KIVA-3v. La simulation numérique prouve l'aptitude des modèles adoptés à capter les mécanismes essentiels du processus de combustion diesel tels que l'évolution du jet, la progression de la flamme et la formation des NO_x.

Mots-clefs : Moteur Diesel, modélisation, combustion, polluants, simulation numérique.

ملخص

إن تطوير محركات الاحتراق الداخلي يجب أن يستجيب لمتطلبات تخفيض استهلاك الوقود و كذلك مسايرة المقاييس البيئية التي تزداد حدة يوماً بعد يوم. تعتبر المحاكاة الرقمية لمحركات الديزل أداة جد مهمة كونها تسمح بالفهم العميق لخصائص الاحتراق بأقل التكاليف، كما يمكنها الحصول على توقعات في ما يخص البواعث الملوثة للمحرك. إن محاكاة رقمية ناجحة تتطلب نمذجة دقيقة لمختلف ظواهر الحقن، الاشتعال، التفاعلات الكيميائية، الطبيعة المضطرب للجران.... الخ و كذلك التأثيرات فيما بينها.

أنجز في هذا العمل استقصاء رقمي لظاهرة الاحتراق في محرك الديزل تحت ظروف مختلفة للحقن باستعمال البرنامج الرقمي KIVA-3v و قد أبدت المحاكاة الرقمية قدرة كبيرة للنماذج المستخدمة على إظهار الخصائص الأساسية للاحتراق كتطور الحقن، تدرج اللهب و تشكل أكاسيد النيتروجين NO_x.

كلمات مفتاحيه : محرك الديزل، نمذجة، احتراق، ملوثات، محاكاة رقمية.