

ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À
L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

COMME EXIGENCE PARTIELLE
À L'OBTENTION DE LA
MAÎTRISE EN GÉNIE MÉCANIQUE
MGM

PAR
LANDRY, Xavier

ÉTUDE SUR UN MODÈLE D'ÉVAPORATION MULTICOMPOSANTS APPLIQUÉ
AUX GOUTTELETTES DE CARBURANT DANS DES CONDITIONS DE MOTEUR
DIESEL

MONTRÉAL, LE 14 JUIN 2007

© Xavier Landry, 2007

CE MÉMOIRE A ÉTÉ ÉVALUÉ

PAR UN JURY COMPOSÉ DE :

M. Patrice Seers, directeur de mémoire
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. François Morency, président du jury
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Stéphane Hallé, membre du jury
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

IL A FAIT L'OBJET D'UNE SOUTENANCE DEVANT JURY ET PUBLIC

LE 12 JUIN 2007

À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

ÉTUDE SUR UN MODÈLE D'ÉVAPORATION MULTICOMPOSANTS APPLIQUÉ AUX GOUTTELETTES DE CARBURANT DANS DES CONDITIONS DE MOTEUR DIESEL

LANDRY, Xavier

RÉSUMÉ

Cette recherche vise à améliorer nos connaissances sur l'évaporation des gouttelettes de carburant dans les simulations de moteur diesel. Plus particulièrement, le but de cette recherche est de déterminer si l'effet multicomposants des carburants, comme le diesel, est pertinent à modéliser dans les simulations de moteur. Un modèle simple est retenu pour inclure l'effet multicomposants. Ce dernier se nomme « Distillation Curve model » ou modèle DC. Plusieurs corrélations pour quantifier le taux de transfert de chaleur et de masse sont étudiées avec le modèle DC. Une procédure de calculs est définie afin de valider le modèle DC et pour déterminer quelles corrélations quantifiant le taux de transfert de chaleur et de masse reproduisent mieux les résultats. Les résultats calculés obtenus en premier lieu ne reproduisent pas bien les résultats expérimentaux. Un facteur de correction est proposé pour améliorer les résultats des calculs. Ce dernier est le ratio entre la masse molaire de la vapeur de carburant et la masse molaire du mélange de référence. Avec ce facteur de correction, les résultats des calculs sont en bonne concordance avec les résultats expérimentaux trouvés. Aucune corrélations quantifiant le taux de transfert de chaleur et de masse ne semblent supérieures aux autres. Pour cette raison, les plus simples sont retenues. Ces dernières sont celles proposées par Ranz et Marshall. Par la suite, le modèle DC est employé dans des conditions ambiantes se rapprochant de celles retrouvées dans un moteur diesel. Pour y arriver, une simulation numérique est effectuée. Cette dernière permet d'obtenir une distribution de température, de pression, du champ de vitesse et de fraction molaire de vapeur de carburant présente sur le parcours des gouttelettes de carburant. Ces conditions ambiantes sont intégrées à la procédure de calcul afin d'évaluer si l'utilisation du modèle DC influence l'évaporation des gouttelettes de carburant. Sur trois des quatre temps moteur étudiés, on peut noter une influence du modèle DC. Les gouttelettes débutent leur évaporation plus rapidement (effet des éléments plus volatils du carburant) et l'évaporation dure plus longtemps (effet des éléments moins volatils du carburant). Cette dernière constatation laisse croire que l'intégration du modèle DC dans une simulation moteur viendrait influencer les distributions spatiales de la température mais surtout de la fraction massique de vapeur de carburant. Ceci laisse croire aussi que l'intégration du modèle DC pourrait influencer les résultats des modèles de combustion volumétrique car ces derniers sont fonction entre autres, de la température et de la fraction molaire de vapeur de carburant se trouvant dans les cellules du maillage.

Mots clés : évaporation, gouttelette de carburant, effet multicomposants, moteur diesel

A STUDY ON THE EFFECTS OF A MULTICOMPONENT MODEL APPLIED TO FUEL DROPLETS IN DIESEL ENGINE CONDITIONS

LANDRY, Xavier

ABSTRACT

The goal of this research is to improve our understanding of the evaporation of fuel droplets in diesel engine simulations. Particularly, the goal of this research is to determine if the multicomponent nature of diesel fuels should be accounted for in diesel engine simulations. A simple model is used to incorporate the multicomponent effect. This model is named the Distillation Curve model or DC model. A few correlations are studied to evaluate the heat and mass transfer with the DC model. A calculation procedure is defined to validate the DC model and to determine which of the correlations that evaluates the heat and mass transfer best fits the experimental results. At first, the results are not in good agreement with the experimental results. A correction factor is proposed to ameliorate the results of the calculation procedures. The factor is the ratio of fuel vapour molar mass to the reference mixture molar mass. With this factor, the calculation results are in good agreement with the experimental results found in the literature. No correlation that evaluates the heat and mass transfer seemed superior to the others. For this reason, the simplest one is retained and was proposed by Ranz & Marshall. The DC model is then used in conditions similar to those found in a diesel engine. To obtain those conditions, a numerical simulation of a diesel engine is realised. Distribution of temperature, pressure, air speed and fuel vapour molar fraction on the droplets path are obtained from the simulation. These conditions are then integrated in the calculation procedures to evaluate if the DC model influences the evaporation rates of a fuel droplet. In three of the four engine time studied, a notable influence of the DC model is observed. The evaporation starts earlier (effect of the highly volatile components) and the evaporation last longer (effect of the less volatile components). This observation let us believe that the integration of the DC model in a numerical simulation of a diesel engine would influence the spatial distribution of temperature but more importantly the spatial distribution of fuel vapour molar fraction. This would in the end influence the results of the volumetric combustion models that are function of the temperature and the fuel vapour molar fraction found in cells of the grid.

Keywords: evaporation, fuel droplet, multicomponent, diesel engine

TABLE DES MATIÈRES

	Page
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 REVUE DE LA LITTÉRATURE	2
1.1 Introduction.....	2
1.2 Les premiers modèles	2
1.3 Discrétisation de la gouttelette.....	5
1.4 Étude multicomposants.....	7
1.5 Effet de la radiation	9
1.6 Effet de la pression	9
1.7 Conclusion du chapitre	10
CHAPITRE 2 MODÈLE DC	12
2.1 But.....	12
2.2 Principe.....	12
2.3 Interface liquide/vapeur	17
2.4 Discussion sur l'effet multicomposants du modèle DC	20
2.5 Conclusion du chapitre	21
CHAPITRE 3 PROPRIÉTÉS.....	23
3.1 Introduction.....	23
3.2 Propriétés de référence	24
3.3 Propriétés du milieu gazeux.....	27
3.3.1 État de référence	28
3.3.2 Viscosité d'un mélange gazeux	29
3.3.3 Conductivité thermique	33
3.3.4 Chaleur spécifique	36
3.3.5 Coefficient de diffusion binaire.....	40
3.4 Propriétés du liquide	44
3.4.1 Viscosité	44
3.4.2 Coefficient de diffusion binaire.....	45
3.4.3 Chaleur spécifique	46
3.4.4 Enthalpie d'évaporation.....	48
3.4.5 Masse volumique.....	49

3.5	Équilibre liquide/vapeur	51
3.6	Conclusion du chapitre	56
CHAPITRE 4	VALIDATION DU MODÈLE DC	57
4.1	Introduction.....	57
4.2	Procédure générale de calcul	57
4.2.1	Conditions initiales et ambiantes (bloc 1 et 2)	58
4.2.2	Solveur numérique (bloc 6).....	58
4.2.3	Calculs des paramètres de base du modèle DC (bloc 3).....	60
4.2.4	Boucle pour déterminer le débit massique (bloc 4).....	60
4.2.5	Calculs des nombres adimensionnels de référence (bloc 4).....	61
4.3	Corrélations étudiées	61
4.3.1	Ranz & Marshall.....	62
4.3.2	Le modèle « film de gaz »	63
4.3.3	Chiang et al.....	64
4.4	Validation numérique	65
4.5	Validation avec résultats expérimentaux.....	67
4.5.1	Gouttelette de kérosène avec vent relatif.....	67
4.5.2	Facteur de correction	69
4.5.3	Gouttelette de kérosène avec convection naturelle.....	73
4.6	Conclusion du chapitre	76
CHAPITRE 5	APPLICATION DU MODÈLE DC DANS DES CONDITIONS DE MOTEURS DIESEL	78
5.1	Introduction.....	78
5.2	Simulation de moteur diesel avec un logiciel CFD	79
5.2.1	Choix du moteur à modéliser.....	79
5.2.2	Simulation du moteur avec Fluent 6.2.....	82
5.3	Adaptation de la procédure de calcul dans Matlab 7.....	84
5.3.1	Simplification du problème	84
5.3.2	Détermination des conditions ambiantes.....	87
5.3.3	Modifications apportées à la procédure de calcul	91
5.3.4	Détermination des conditions initiales	94
5.3.5	Modèles étudiés	96
5.4	Résultats des calculs	100
5.4.1	Cas 1 : Injection à APMH = -7	101
5.4.2	Cas 2 : Injection à APMH = -5	103
5.4.3	Cas 3 : Injection à APMH = 0	107
5.4.4	Cas 4 : Injection à APMH = 5	109
5.5	Discussion sur le modèle DC.....	111
5.6	Conclusion du chapitre	113

CONCLUSION.....	115
RECOMMANDATIONS	117
ANNEXE I LISTE DES PROPRIÉTÉS DE RÉFÉRENCE DES N-ALCANES DE 2 À 20 CARBONES.....	118
ANNEXE II VALIDATION DES CORRÉLATIONS DE PROPRIÉTÉ.....	120
ANNEXE III EFFET DU MÉLANGE ET DE LA PRESSION SUR LA CONDUCTIVITÉ DU MÉLANGE GAZEUX.....	122
ANNEXE IV TABLE DE LEE ET KESLER POUR CALCULS DE LA CHALEUR SPÉCIFIQUE DES GAZ.....	124
BIBLIOGRAPHIE.....	128

LISTE DES TABLEAUX

	Page
Tableau 2.1 Coefficients du polynôme de Legendre utilisés dans le modèle DC.....	15
Tableau 3.1 Propriétés de référence utilisées dans les corrélations pour évaluer les propriétés.....	24
Tableau 3.2 Coefficients des polynômes de lissage.....	27
Tableau 3.3 Liste des propriétés du milieu gazeux étudiées.....	27
Tableau 3.4 Comparaison entre les valeurs calculées et expérimentales de viscosité.....	31
Tableau 3.5 Contribution des différents atomes pour la corrélation de Fuller et al.....	40
Tableau 3.6 Liste des propriétés étudiées pour la phase liquide.....	44
Tableau 3.7 Coefficient binaire empirique.....	54
Tableau 4.1 Conditions ambiantes et initiales de la validation numérique.....	65
Tableau 4.2 Conditions ambiantes et initiales de l'expérimentation 1.....	67

Tableau 4.3	Conditions ambiantes et initiales de l'expérimentation avec convection naturelle	74
Tableau 5.1	Conditions initiales de la gouttelette	95
Tableau 5.2	Propriété du « gasoil » de Fluent.....	98
Tableau 5.3	Résumé des nuances entre les modèles étudiés.....	99

LISTE DES FIGURES

	Page
Figure 1.1	Représentation des courbes isothermes pour (A) une gouttelette dite à diffusion infinie, (B) avec discrétisation radiale et (C) avec une circulation interne suivant la solution des vortex de Hill.....6
Figure 2.1	Représentation graphique des différentes quantités échangées entre la phase gazeuse et la phase liquide à la surface de la gouttelette.18
Figure 4.1	Procédure générale de calcul dans l'intégration du modèle DC sur MatLab 7.59
Figure 5.1	Dimensions et paramètres importants du Caterpillar 340180
Figure 5.2	Schéma de l'injection du Caterpillar 340181
Figure 5.3	Maillage utilisé lors de la simulation du Caterpillar 3401.82
Figure 5.4	Vue de coupe du maillage permettant de voir la délimitation entre les deux volumes et le raffinement du maillage pour l'injection.....82
Figure 5.5	Variabes utilisées pour définir le domaine d'un jet axisymétrique.....85
Figure 5.6	Image représentant des injections dans un milieu de plus en plus dense.....86

Figure 5.7	Représentation de l'axe du trou d'injection d'où sont tirées les conditions ambiantes.	87
Figure 5.8	Nouvelle procédure de calcul adaptée pour contenir les vecteurs de conditions ambiantes et la dynamique de la gouttelette.	93
Figure 5.9	Distribution des valeurs des termes sources causés par l'évaporation des gouttelettes près de l'injecteur.	105
Figure 5.10	Distribution de la fraction molaire de carburant près de l'injecteur.	106

LISTE DES GRAPHIQUES

	Page
Graphique 1.1	Distribution continue de n-alcanes modélisant du diesel ainsi que les endroits on l'on retrouve un n-alcane précis.8
Graphique 2.1	Évolution de la température d'ébullition du diesel à la pression atmosphérique.13
Graphique 2.2	Polynôme calculé à partir des équations 2.5 et 2.12 pour le diesel no.2 et le kérosène (Jet-A1).16
Graphique 3.1	Évolution de l'évaporation à pression constante de l'eau sur un diagramme T-V.25
Graphique 3.2	Polynôme de lissage de la température critique des n-alcanes.26
Graphique 3.3	Résultats des calculs de conductivité thermique pour différentes conditions.35
Graphique 3.4	Résultats des calculs de chaleur spécifique pour différentes conditions.38
Graphique 3.5	Chaleur spécifique de l'air en fonction de la température pour différentes pressions.39

Graphique 3.6	Facteur de correction de Takahashi.	42
Graphique 3.7	Coefficient de diffusion binaire calculé avec et sans le facteur de correction de Takahashi entre de l'azote et du n-décane.	42
Graphique 3.8	Coefficient de diffusion binaire calculé avec et sans le facteur de correction de Takahashi à 500 K.	43
Graphique 3.9	Chaleur spécifique du carburant liquide en fonction de la masse molaire du n-alcane équivalent pour différentes températures.	47
Graphique 3.10	Enthalpie d'évaporation en fonction de la température.	48
Graphique 3.11	Masse volumique du diesel et du kérosène en fonction de la température.	51
Graphique 3.12	Fraction molaire de vapeur de décane à la surface d'une gouttelette selon la température de la surface pour différentes pressions.	55
Graphique 4.1	Comparaison entre les résultats obtenus par calcul (bas) et les résultats publiés (haut).	66
Graphique 4.2	Comparaison entre le diamètre obtenu par calculs et le diamètre mesuré expérimentalement par (Runge et Teske, 1998).	68

Graphique 4.3	Évolution de différents nombres adimensionnels lors de l'évaporation de la gouttelette (.... R&M ; --- Film ; ----- Chiang).69
Graphique 4.4	Comparaison entre le diamètre obtenu par calculs avec le facteur de correction et le diamètre mesuré expérimentalement par Runge et al. (1998).71
Graphique 4.5	Évolution de différents nombres adimensionnels lors de l'évaporation de la gouttelette avec facteur de correction (.... R&M ; --- Film ; ----- Chiang).72
Graphique 4.6	Comparaison entre le diamètre obtenu par calculs et le diamètre mesuré expérimentalement (Ghassemi, Baek et Khan, 2006) P = 1 MPa et T = 773 K.75
Graphique 4.7	Comparaison entre le diamètre obtenu par calculs et le diamètre mesuré expérimentalement (Ghassemi, Baek et Khan, 2006) P = 1 MPa et T = 873 K.76
Graphique 5.1	Comparaison entre la distribution de pression du cylindre mesurée expérimentalement (Choi et Reitz, 1999) et les résultats de la simulation.84
Graphique 5.2	Représentations des conditions ambiantes au temps APMH = -5.88
Graphique 5.3	Évolution des conditions ambiantes dans le temps avant le début de la combustion.89

Graphique 5.4 Évolution dans le temps des conditions ambiantes après le début de l'injection.91

Graphique 5.5 Pression de saturation fonction de la température du « gasoil » de Fluent.99

Graphique 5.6 Évolution de la masse de la gouttelette au temps moteur APMH = -7.101

Graphique 5.7 Évolution de la température, de la masse, de la vitesse et de la position de la gouttelette au temps moteur APMH = -7 (— DCP ; --- P ; ... FL).102

Graphique 5.8 Évolution de la température, de la masse, de la vitesse et de la position de la gouttelette au temps moteur APMH = -5 (— DCP ; --- P ; ... FL).104

Graphique 5.9 Évolution de la masse de la gouttelette au temps moteur APMH = -5.107

Graphique 5.10 Évolution de la température, de la masse, de la vitesse et de la position de la gouttelette au temps moteur APMH = 0 (— DCP ; - - P ; ... FL).....108

Graphique 5.11 Évolution de la masse de la gouttelette au temps moteur APMH = 0.....109

Graphique 5.12	Évolution de la température de la gouttelette au temps moteur $APMH = 5$	110
Graphique 5.13	Évolution de la masse de la gouttelette au temps moteur $APMH = 5$	110
Graphique 5.14	Évolution du nombre de Peclet selon la fraction massique évaporée Ω pour les quatre temps moteur étudiés dans ce chapitre (modèle DCP).	111
Graphique 5.15	Évolution de la masse molaire de la vapeur selon la fraction massique évaporée Ω pour les quatre temps moteur étudiés dans ce chapitre (modèle DCP).....	112

LISTE DES ABRÉVIATIONS ET SIGLES

APMH Après le Point Mort Haut

DC Distillation Curve (Courbe de distillation)

PMB Point Mort Bas

PMH Point Mort Haut

LISTE DES SYMBOLES ET UNITÉS DE MESURE

Unité de base

s	Seconde (unité de temps)
m	Mètre (unité de longueur)
K	Kelvin (unité de température)
kg	Kilogramme (unité de masse)
kmol	Kilomole (unité de quantité de matière)

Autres unités utilisées

mol	1e-3·kmol
m ²	Surface
m ³	Volume
L	Litre (1e-3 m ³)
N	Newton (kg·m / s ²)
J	Joule (N·m)
kJ	1e3·J
W	Watt (J/s)
Pa	Pascal (N/m ²)
bar	1e5·Pa
MPa	1e6·Pa
μP	Micro poise (1e-7 N·s/m ²)

Symboles

Pe	Nombre de Peclet ($\dot{m}_s / (2 \cdot \pi d_g \cdot D_{AB} \cdot \rho_{iq})$)
Re	Nombre de Reynolds ($V \cdot \rho d_g / \mu$)
Sh	Nombre de Sherwood ($h_m \cdot d_g / D_{AB}$)
Nu	Nombre de Nusselt ($h_f \cdot d_g / k$)
Pr	Nombre de Prandtl ($C_p \cdot \mu / k$)
Sc	Nombre de Schmidt ($\mu / (\rho D_{AB})$)
Gr	Nombre de Grashof ($d_g^3 \cdot \rho g \cdot (\rho_s - \rho_\infty) / \mu^2$)
B _M	Nombre de transfert de Spalding (masse)
B _T	Nombre de transfert de Spalding (chaleur)
m	Masse (kg)
T	Température (K)
P	Pression (MPa)
h _m	Coefficient de transfert de masse (m/s)

h_t	Coefficient de transfert de chaleur ($W/(m^2 \cdot K)$)
A	Aire (m^2)
d	Diamètre (m)
r	Rayon (m)
\dot{m}	Débit massique (kg/s)
ρ	Masse volumique (kg/m^3)
Y	Fraction massique (sans unité)
X	Fraction molaire (sans unité)
MM	Masse molaire ($kg/kmol$)
Ω	Fraction massique évaporée (sans unité)
q	Débit chaleur (W)
Δh_{evap}	Enthalpie d'évaporation (J/kg)
Z	Facteur de compressibilité (sans unité)
ω	Facteur acentrique de Pitzer (sans unité)
R	Constante universelle des gaz ($83.145 \text{ bar} \cdot \text{cm}^3/(\text{mol} \cdot \text{K})$ ou $8.314 \text{ kJ}/(\text{kmol} \cdot \text{K})$)
V	Volume molaire au chapitre 3 (cm^3/mol)
V	Vitesse au chapitre 4 et 5 (m/s)
T_{evap}	Température normale d'ébullition (K)
$V_{l,\text{ref}}$	Volume molaire à 20°C (cm^3/mol)
nbc	Nombre d'atome de carbone d'un n-alcane
μ	Viscosité ($\text{N} \cdot \text{s}/\text{m}^2$)
ξ	Inverse de la viscosité (μP^{-1})
Z_1	Paramètre pour calculer la viscosité (sans unité)
Z_2	Paramètre pour calculer la viscosité (sans unité)
α	Paramètre pour calculer la viscosité (sans unité)
β	Paramètre pour calculer la viscosité (sans unité)
a	Paramètre pour calculer la viscosité (sans unité)
b	Paramètre pour calculer la viscosité (sans unité)
c	Paramètre pour calculer la viscosité (sans unité)
d	Paramètre pour calculer la viscosité (sans unité)
e	Paramètre pour calculer la viscosité (sans unité)
f	Paramètre pour calculer la viscosité (sans unité)
k	Conductivité thermique ($W/(m \cdot K)$)
Γ	Inverse de la conductivité thermique ($m \cdot K/W$)
$(k \cdot \Gamma)_{\text{tr}}$	Paramètre pour calculer la conductivité thermique (sans unité)
$(k \cdot \Gamma)_{\text{int}}$	Paramètre pour calculer la conductivité thermique (sans unité)
$f(T_r)$	Paramètre pour calculer la conductivité thermique (sans unité)
C	Paramètre pour calculer la conductivité thermique (sans unité)
C	Paramètre pour calculer MM_{vap} (sans unité)
C_p	Chaleur spécifique ($J/(kg \cdot K)$)
C_p°	Chaleur spécifique à l'état de gaz parfait ($J/(\text{mol} \cdot K)$)

CH_3	Paramètre pour calculer la chaleur spécifique (J/(mol·K))
CH_2	Paramètre pour calculer la chaleur spécifique (J/(mol·K))
ΔC_{Pm}	Variation de la chaleur spécifique due à la pression (J/(mol·K))
$(\Delta C_{\text{P}})^{(0)}$	Paramètre pour calculer la chaleur spécifique (J/(mol·K))
$(\Delta C_{\text{P}})^{(1)}$	Paramètre pour calculer la chaleur spécifique (J/(mol·K))
D_{AB}	Coefficient de diffusion binaire (m^2/s)
Σ_{v}	Paramètre pour calculer le coefficient de diffusion binaire (sans unité)
V^*	Paramètre pour calculer la masse volumique liquide (L/mol)
$V^{(0)}$	Paramètre pour calculer la masse volumique liquide (sans unité)
V_r^δ	Paramètre pour calculer la masse volumique liquide (sans unité)
a	Paramètre pour calculer la masse volumique liquide (sans unité)
b	Paramètre pour calculer la masse volumique liquide (sans unité)
c	Paramètre pour calculer la masse volumique liquide (sans unité)
d	Paramètre pour calculer la masse volumique liquide (sans unité)
e	Paramètre pour calculer la masse volumique liquide (sans unité)
f	Paramètre pour calculer la masse volumique liquide (sans unité)
g	Paramètre pour calculer la masse volumique liquide (sans unité)
h	Paramètre pour calculer la masse volumique liquide (sans unité)
f	Fugacité
ϕ	Coefficient de fugacité
g	Accélération gravitationnelle ($9,81 \text{ m/s}^2$)
F_{D}	Force de traînée (N)
C_{D}	Coefficient de traînée (sans unité)

Indices

s	Surface de la gouttelette
∞	Milieu ambiant
g	Gouttelette
liq	Liquide
0	Initial
vap	Vapeur de carburant
rad	Radiatif
conv	Convectif
c	Critique
r	Réduite
m	Mélange
ref	À l'état de référence
sat	Saturation
rel	Relatif
a	Ambiant et relatif à un système inertiel

INTRODUCTION

Les simulations numériques sont des outils de travail de plus en plus utilisés. Ces simulations sont cependant toujours basées sur des modèles simplifiés et leur précision est fonction de la qualité des modèles employés. Les simulations de moteurs diesel sont un bon exemple de la montée fulgurante des simulations numériques. On arrive à reproduire numériquement les distributions de plusieurs grandeurs physiques comme la température et les endroits de formation des polluants nuisibles pour l'homme. Encore une fois, la précision des résultats obtenus dépend, de beaucoup, des modèles employés.

L'objectif de cette recherche est l'étude des modèles d'évaporation des gouttelettes de carburant injectées directement dans le cylindre des moteurs diesel. Plus précisément, cette recherche vise à établir si l'effet multicomposants des carburants grands marchés comme le diesel pourrait avoir une influence notable sur les résultats des simulations. Le diesel est reconnu pour être un mélange de plus de 1000 différents composés chimiques. Cette réalité peut influencer l'évaporation des gouttelettes de carburant comparativement à l'évaporation d'une gouttelette de substance pure qui est pratiquement (pour ne pas dire toujours) employée par les logiciels sur lesquels on peut réaliser les simulations numériques de moteur diesel.

Ce mémoire est divisé en 5 chapitres. Le premier contient une revue de la littérature concernant les différents modèles d'évaporation d'une gouttelette. Le deuxième chapitre présente le modèle choisi pour étudier l'effet multicomposants. Le troisième chapitre présente des corrélations pour l'évaluation des propriétés utilisées avec le modèle multicomposants. Finalement, les quatrième et cinquième chapitres présentent les résultats et analyses sur l'utilisation du modèle multicomposants face à des résultats expérimentaux et dans des conditions de moteur diesel.

CHAPITRE 1

Revue de la littérature

1.1 Introduction

L'étude d'une gouttelette qui s'évapore a fait et fait toujours l'objet de plusieurs recherches. Ceci est dû à la multitude d'applications dans divers domaines tels les moteurs à combustion, les chaudières, l'humidification de l'air, etc. Dans cette section, l'évaporation d'une gouttelette est décrite de façon générale et ne se limite pas qu'à une gouttelette de carburant.

1.2 Les premiers modèles

Dans la plupart des premières recherches, les résultats expérimentaux sont toujours basés sur des tests effectués avec des fluides simples et bien connus comme l'eau, le n-heptane et le benzène. Déjà en 1938, Frösseling présente deux corrélations qui permet de quantifier le transfert de masse et de chaleur d'une gouttelette dans un environnement quelconque. Ces deux corrélations sont encore souvent citées dans des articles écrits par des Allemands et se présentent comme suit (Burger et al., 2003) :

$$\text{Sh} = 2 + 0.552 \cdot \text{Re}^{1/2} \cdot \text{Sc}^{1/3} \quad (1.1)$$

$$\text{Nu} = 2 + 0.552 \cdot \text{Re}^{1/2} \cdot \text{Pr}^{1/3} \quad (1.2)$$

Ces corrélations permettent de calculer les nombres adimensionnels de Sherwood (Sh) et de Nusselt (Nu) moyens de la gouttelette. Les nombres adimensionnels Re, Sc et Pr se calculent à l'aide des équations 1.3 à 1.5.

$$\text{Re} = \frac{d_g \cdot \rho_\infty \cdot V_\infty}{\mu} \quad (1.3)$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho \cdot D_{AB}} \quad (1.4)$$

$$Pr = \frac{C_p \cdot \mu}{k} \quad (1.5)$$

Il est possible par la suite de calculer le débit massique, \dot{m}_s , et la quantité de chaleur échangée, q_s , à la surface de la gouttelette à l'aide des relations suivantes.

$$\dot{m}_s = h_m \cdot A_g \cdot \rho \cdot (Y_\infty - Y_s) \quad (1.6)$$

$$q_s = h_t \cdot A_g \cdot (T_\infty - T_s) \quad (1.7)$$

$$\text{où } h_m = \frac{Sh \cdot D_{AB}}{d_g} \quad (1.8)$$

$$\text{et } h_t = \frac{Nu \cdot k}{d_g} \quad (1.9)$$

Les variables A_g et d_g représentent l'aire de la surface d'échange et le diamètre de la gouttelette; Y_∞ et Y_s représentent la fraction massique de carburant du milieu ambiant et à la surface; T_∞ et T_s représentent la température du milieu ambiant et à la surface; ρ , D_{AB} et k représentent respectivement la masse volumique, le coefficient de diffusion binaire et la conductivité thermique du mélange gazeux. Dans le cas particulier d'une gouttelette qui s'évapore, la quantité de chaleur a un signe positif car la gouttelette absorbe de la chaleur et le débit massique est négatif car la gouttelette perd de la masse.

Ranz et Marshall proposent en 1952 deux corrélations pratiquement identiques basées sur un plus grand nombre de résultats expérimentaux. Contrairement aux corrélations de Frösseling, ces dernières se retrouvent habituellement dans les livres américains et s'écrivent de la forme suivante (Ranz et Marshall, 1952).

$$Sh = 2 + 0.60 \cdot Re^{1/2} \cdot Sc^{1/3} \quad (1.10)$$

$$Nu = 2 + 0.60 \cdot Re^{1/2} \cdot Pr^{1/3} \quad (1.11)$$

Finalement, en 1953, Spalding propose une autre approche totalement différente. Cette dernière n'est pas basée sur une relation empirique mais plutôt sur une solution analytique du bilan énergétique et massique à la surface d'une gouttelette dans un environnement stagnant (sans convection). Les résultats théoriques de Spalding ont donné naissance à deux nombres adimensionnels qui sont encore utilisés de nos jours. La solution qu'il propose se résume dans le cas d'un simple transfert de masse à (Kuo, 1986) :

$$\dot{m}_s = 4 \cdot \pi \cdot r_s \cdot \rho \cdot D_{AB} \cdot \ln(1 + B_M) \quad (1.12)$$

$$\dot{m}_s = 4 \cdot \pi \cdot r_s \cdot \frac{k}{C_p} \cdot \ln(1 + B_T) \quad (1.13)$$

$$\text{où } B_M = \frac{Y_s - Y_\infty}{1 - Y_s} \quad (1.14)$$

$$\text{et } B_T = \frac{C_{p,vap} \cdot (T_\infty - T_s)}{\Delta h_{evap}} \quad (1.15)$$

B_M et B_T sont généralement appelés les nombres de transfert de Spalding. La variable Y représente la fraction massique à la surface ou dans le milieu ambiant selon l'indice. $C_{p,vap}$ est la chaleur spécifique de la vapeur de carburant. La solution du bilan massique et énergétique de Spalding permet de bien voir comment le transfert de masse et le transfert de chaleur sont couplés ensemble dans le cas d'une goutte qui s'évapore. Ce couplage est principalement dû à l'énergie (ou chaleur latente), Δh_{evap} , nécessaire pour évaporer le carburant. Le débit massique est donc proportionnel à la diffusion massique et à la diffusion de la chaleur. Ceci est aussi vrai dans un environnement convectif. La seule différence est que l'un est quantifié par les propriétés de transport naturel du mélange gazeux (D_{AB} et k) et l'autre par les gradients de chaleur et de masse du mélange gazeux à la surface de la gouttelette (respectivement quantifiés par Nu et Sh).

Spécifions que ces trois premiers modèles sont tous basés sur la même hypothèse simplificatrice qui permet d'éliminer plusieurs problèmes de calculs : la gouttelette

s'évapore en régime permanent. Ceci implique en premier lieu que le diamètre ne change pas malgré l'évaporation. Dans le cas des relations empiriques, on alimente directement la gouttelette par un tube capillaire lors des tests. L'hypothèse d'un régime permanent implique aussi que la température à l'intérieur de la gouttelette ne change pas. Dans le cas d'une injection dans un milieu extrêmement chaud, tel que retrouvé dans les moteur diesel, ces hypothèses ne tiennent plus car le diamètre et la température varient tout au long de la vie de la gouttelette.

Le nombre de publication traitant de l'évaporation des gouttelettes est important et peut se résumer ainsi : de façon générale, les études tentent de valider et d'implanter des modèles pouvant s'appliquer à de plus grandes plages de conditions pour les variables telles que la température, le vent relatif et la pression. Les modèles proposés sont très souvent basés sur l'un des premiers modèles déjà présenté et, très souvent, mélangent l'approche empirique et l'approche théorique. À titre d'exemple Yuen et Chen (Yuen et Chen, 1978) ont étudié expérimentalement l'évaporation sur une plage de température allant de 150 à 960 °C avec un vent relatif compris entre 2.1 et 11.4 m/s. Ils remarquent qu'à haute température, dû au transfert de masse qui devient plus important, le transfert de chaleur diminue par rapport à celui calculé à l'aide de l'équation 1.11. Ils proposent plutôt la corrélation suivante :

$$\text{Nu} \cdot (1 + B_T) = 2 + 0.60 \cdot \text{Re}^{1/2} \cdot \text{Pr}^{1/3} \quad (1.16)$$

Les expérimentations de Yuen et Chen sont faites en régime permanent. Ils alimentent directement une sphère poreuse par un tube capillaire lors des tests.

1.3 Discrétisation de la gouttelette

Plusieurs nouvelles approches émergent dans les années 80, mais la plupart des études peuvent être décrites comme des comparaisons numériques de différents modèles (Abramzon et Sirignano, 1989, ; Aggarwal, 1987). La venue des ordinateurs permet une discrétisation plus facile des gouttelettes. Ainsi, on ne considère plus la gouttelette comme

ayant une température uniforme. On considère la distribution radiale de la température et l'on compare le tout au modèle simplifié. Toutefois ces comparaisons se font entre modèles théoriques. Les conclusions sont généralement qualitatives principalement parce que les résultats expérimentaux sont en régime permanent alors que leurs études sont faites sur des gouttelettes qui s'évaporent en régime transitoire. On étudie (Abramzon et Sirignano, 1989, ; Aggarwal, 1987) même l'influence de la circulation interne du liquide avec le modèle nommé vortex. Ce dernier implique non seulement une discrétisation radiale de la gouttelette mais aussi une discrétisation angulaire sur 180 degrés. Il faut noter que cette circulation est définie par une solution nommée vortex de Hill d'où le nom du modèle. La figure 1.1 présente les différents modèles utilisés pour étudier l'intérieur de la gouttelette.

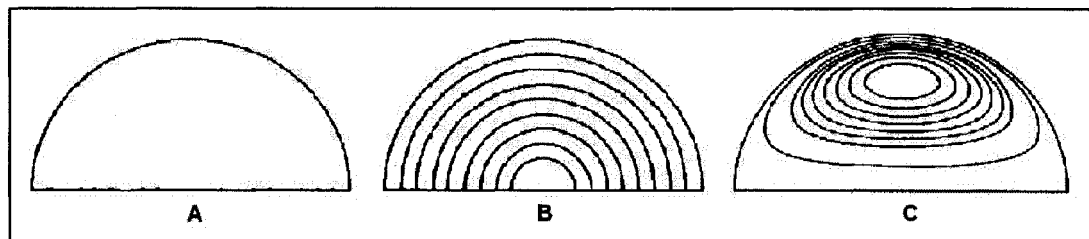


Figure 1.1 *Représentation des courbes isothermes pour (A) une gouttelette dite à diffusion infinie, (B) avec discrétisation radiale et (C) avec une circulation interne suivant la solution des vortex de Hill.*

(Tirée de (Aggarwal, 1987))

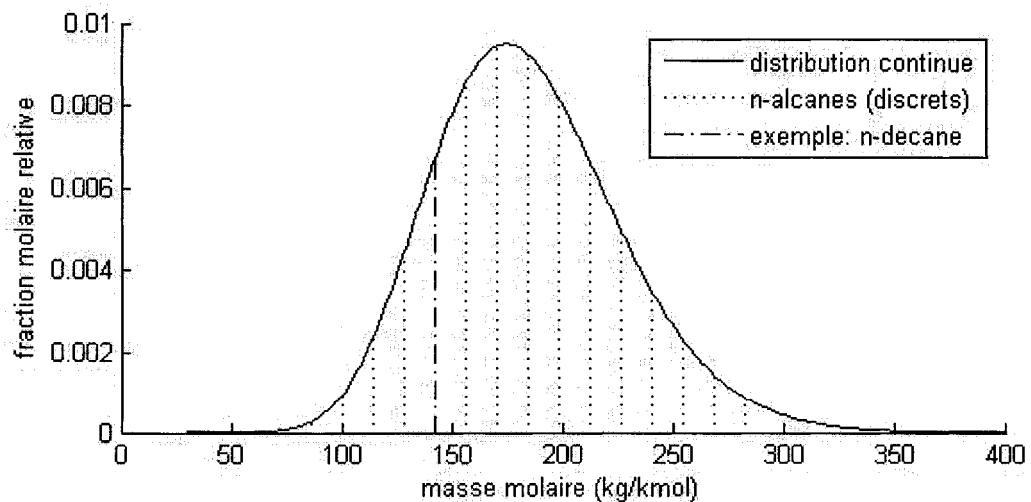
Abramzon et Sirignano (Abramzon et Sirignano, 1989) publient une comparaison des trois cas présentés à la figure 1.1. Ils proposent, entre autre, l'utilisation d'une conductivité thermique effective pour tenir compte de la circulation. De plus, le modèle nommé « film de gaz » est incorporé, à ma connaissance, pour la première fois dans cet article. Ce dernier est plus détaillé au chapitre 4. Leurs propositions sont encore utilisées de nos jours (Sazhin et al., 2004). Ils sont aussi parmi les premiers à tenir compte de la variation (surtout au niveau du mélange gazeux) des propriétés.

1.4 Étude multicomposants

Avec l'avènement de la discrétisation vient aussi l'avènement des études multicomposants. Alors que bien des chercheurs voient la possibilité d'utiliser les modèles d'évaporation de gouttelettes dans des simulations de moteurs, un problème s'impose. Les carburants grands marchés comme l'essence, le diesel et le kérosène ne sont pas des substances pures mais plutôt des mélanges d'une très grande quantité d'hydrocarbures. Ces carburants ne sont pas caractérisés par une température fixe d'ébullition mais plutôt par une courbe de distillation. Cette réalité lance plusieurs études visant à qualifier et quantifier l'effet multicomposants. Dû à la complexité d'évaluer les coefficients de diffusion massique d'une multitude de liquides mélangés, ces études se limitent presque exclusivement au mélange de deux substances (Aggarwal, 1987 ; Burger et al., 2003). La gouttelette est discrétisée radialement et l'on ajoute une équation de conservation des espèces pour chacune des substances. Toutefois, deux autres méthodes sont développées pour représenter une plus grande quantité d'espèces.

La première méthode est proposée par Chin (Chin, 1994). Le principe est assez simple. Se baser sur la courbe de distillation d'un vrai carburant et la faire coïncider avec la pression de vapeur et les propriétés d'évaporation d'un groupe d'hydrocarbures bien connus : les n-alcane. Il y a deux avantages à utiliser cette famille d'hydrocarbures. Premièrement, la quantité d'information et de mesures disponibles sur leurs propriétés et deuxièmement, leurs proportions assez importantes comme composés des principaux carburants grands marchés. Dans le modèle proposé par Chin, une gouttelette possède une certaine masse qui s'évapore, une température qui augmente et une certaine masse molaire moyenne qui augmente. Les propriétés du carburant évoluent donc avec la masse molaire. Il y a interpolation des propriétés car la masse molaire de la gouttelette ne se retrouve pratiquement jamais sur un n-alcane précis.

La deuxième méthode utilisée pour représenter une plus grande quantité d'espèces est publiée par Zhu (Zhu et Reitz, 2002). Cette méthode nommée « thermodynamique continue » est déjà utilisée dans le domaine de l'ingénierie chimique. Elle ressemble beaucoup, à première vue, à celle publiée par Chin. Elle se base sur les propriétés des n-alcanes et il y a évolution de la masse molaire moyenne. Cependant, les modèles sont très différents. Surtout dans la complexité des calculs. Ici, le carburant est considéré comme une distribution continue de substances pouvant être associées à des n-alcanes. Ce ne sont pas directement des n-alcanes car les n-alcanes sont une suite discrète d'espèce. Ainsi, dans l'étude proposée par Zhu, une gouttelette est discrétisée et la moyenne et l'écart type de la distribution continue sont des propriétés qui suivent les équations de transport au même niveau que les espèces, par exemple. Chaque maille possède sa masse molaire moyenne et l'écart type de sa distribution. Le résultat est qu'avec seulement deux paramètres (moyenne et écart type), on peut espérer représenter une infinité de composantes. Une liste des n-alcanes 2 à 20 utilisés est présentée à l'annexe 1. Le graphique 1.1 représente une distribution continue de n-alcanes utilisés par Zhu (Zhu et Reitz, 2002) pour modéliser du diesel.



Graphique 1.1 *Distribution continue de n-alcanes modélisant du diesel ainsi que les endroits où on les retrouve un n-alcane précis.*

Un dernier article important à mentionner sur l'étude multicomposants est celui de Burger (Burger et al., 2003) car cet article est celui qui a initialisé le projet de recherche décrit dans ce mémoire. Il utilise le modèle de Chin pour faire une simulation d'une gouttelette de kérosène dans plusieurs environnements à haute température et à haute pression. Il incorpore les effets de la pression sur l'équilibre liquide/vapeur à la surface de la gouttelette ainsi que l'effet de la pression sur les propriétés du liquide et du milieu gazeux. Une partie du chapitre 3 est basée sur les ajouts qu'il a effectués au modèle de Chin.

1.5 Effet de la radiation

Les effets de la radiation sont rarement considérés dans les études d'évaporation des gouttelettes. Dans la plupart des publications (Abramzon et Sirignano, 1989 ; Aggarwal, 1987 ; Burger et al., 2003 ; Chin, 1994 ; Sirignano, 1993 ; Zhu et Aggarwal, 2000) cet effet est négligé. Toutefois il existe certaines études sur le sujet (Abramzon et Sazhin, 2005 ; Sazhin et al., 2004). Il s'agit plutôt d'études numériques sur l'effet de la température du milieu environnant sur l'évaporation de la gouttelette. Il faut généralement de très hautes températures du milieu environnant (de l'ordre de 1500 K et plus) pour voir une influence significative sur l'évaporation.

1.6 Effet de la pression

L'effet de la pression sur l'évaporation d'un liquide est très important. Comme précisé par plusieurs théories de la thermodynamique, l'état de la matière dépend principalement de trois choses : Sa température, son volume spécifique et la pression ambiante. Comme l'évaporation d'une gouttelette est le passage de l'état liquide à l'état vapeur, la pression devient un élément important qui caractérise l'évolution du changement d'état. Déjà dans les années 50, les chercheurs s'y intéressent, comme Spalding par exemple. La principale raison est que les pressions rencontrées dans les moteurs à combustion lors des injections

peuvent s'élever à plus de 100 atmosphères. À ces pressions, l'évaporation d'une gouttelette peut amener le carburant à des conditions dites supercritiques qui se caractérisent, entre autre, par l'absence de discontinuité du volume spécifique entre les phases liquide et vapeur. Un retour sur cette notion sera fait à la section 3.2.

Des études sont menées encore aujourd'hui pour tenter de quantifier les effets de la pression sur l'évaporation. Le problème est au niveau expérimental. La difficulté est de créer des chambres d'essais pouvant supporter des pressions de 10 MPa et plus. Généralement, on étudie seulement l'évaporation dans des environnements stagnants avec ou sans gravité (avec ou sans convection naturelle). Des études théoriques et/ou expérimentales comme celle de Matlosz (Matlosz, Leipziger et Torda, 1972), Zhu (Zhu et Aggarwal, 2000 ; Zhu, Reitz et Aggarwal, 2001) et Ghassemi (Ghassemi, Baek et Khan, 2006) sont de bons exemples.

1.7 Conclusion du chapitre

Une revue de la littérature concernant l'évaporation des gouttelettes a été présentée. Il existe un très grand nombre d'études mais de façon générale, rares sont celles qui présentent une comparaison entre les résultats théoriques et les résultats expérimentaux. Souvent, les études comparent des modèles théoriques entre eux. Les modèles sont de plus en plus complexes et de plus en plus difficiles à utiliser dans des applications d'ingénierie. Un fossé assez important s'est creusé entre l'étude de l'évaporation d'une gouttelette seule et les applications où sont utilisées les modèles d'évaporation. Un bon exemple de cette réalité est que les corrélations proposées par Ranz et Marshall en 1952 (équations 1.10 et 1.11) sont utilisées dans le modèle d'évaporation des gouttelettes de la phase discrète du logiciel Fluent 6.2.

L'objectif de la présente recherche vise premièrement à déterminer si l'utilisation de corrélations plus complexes est pertinente dans les simulations de moteurs diesel. Plus

précisément, la recherche vise à établir si l'utilisation d'un modèle permettant d'inclure l'effet multicomposants est pertinente dans des conditions ambiantes comparables à celle retrouvées dans les moteurs diesel. Le modèle choisi pour la recherche est celui proposé par Chin nommé « Distillation Curve (DC) model » (Prommersberger, Mairer et Wittig, 1998) car il permet d'inclure un effet multicomposants sans trop complexifier les calculs au niveau de la gouttelette. Ce dernier point est important car advenant qu'il devient pertinent de l'utiliser, il sera plus facile à intégrer dans les simulations de moteurs diesel que les autres modèles multicomposants.

CHAPITRE 2

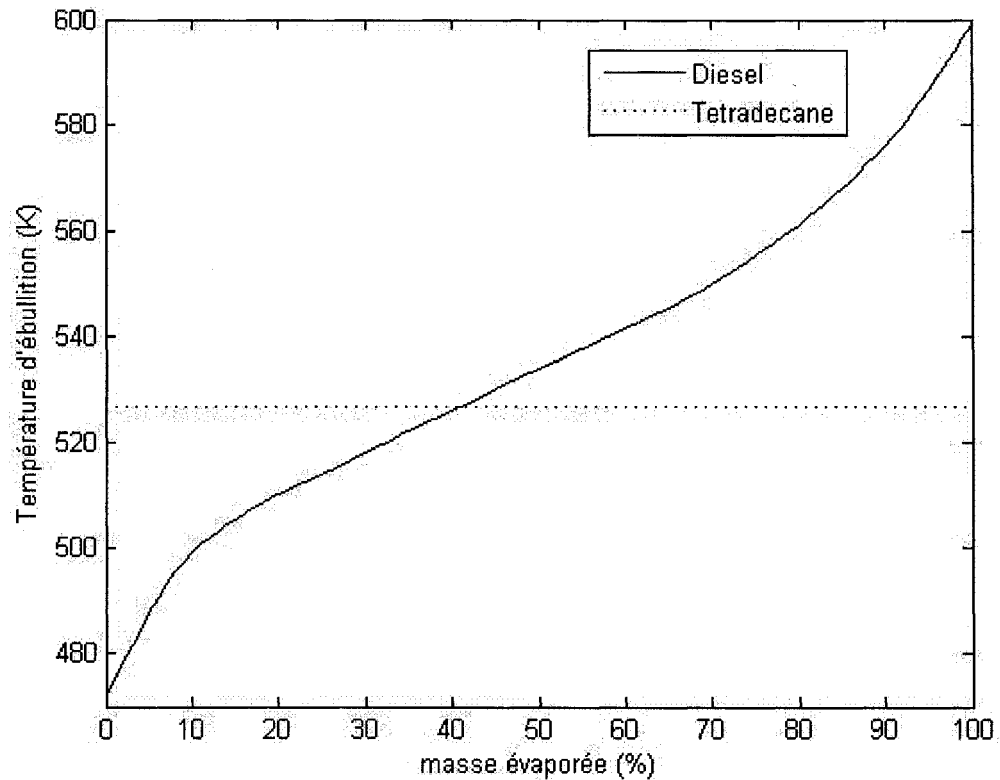
Modèle DC

2.1 But

Le but principal qui a poussé l'élaboration du modèle DC est d'incorporer le caractère multicomposants des différents carburants dans des simulations de moteur à combustion. Cette dernière notion est très importante car des modèles d'évaporation beaucoup plus complexes ont déjà été publiés mais ne sont pratiquement jamais incorporés dans des simulations de moteur pour les raisons suivantes : leur difficulté d'implantation, l'augmentation considérable en temps de calculs et l'augmentation considérable en gestion de mémoire causée par la discrétisation de la gouttelette.

2.2 Principe

Comme stipulé plus tôt, les carburants modernes tels le diesel, le kérosène et l'essence sont des mélanges de plusieurs centaines, voir milliers, d'hydrocarbures. De ce fait, les composés les plus volatils ont tendance à s'évaporer plus rapidement que les composés moins volatils. Leur évaporation est donc caractérisée par une évolution de la température d'ébullition. Cette dernière caractéristique est normalisée par l'ASTM et se définit comme étant la courbe de distillation d'un carburant. A titre d'exemple, la courbe de distillation standard du diesel no.2 est comparée à celle du n-tétradécane au graphique 2.1. On peut voir que pour une substance pure à pression constante comme par exemple du n-tétradécane à la pression atmosphérique, la température d'ébullition est fixe.



Graphique 2.1 *Évolution de la température d'ébullition du diesel à la pression atmosphérique.*

Donc lors de l'évaporation d'une gouttelette de diesel, sa composition change. Les éléments plus volatils s'évaporent plus rapidement. Les éléments moins volatils eux restent sous forme liquide dans la gouttelette. Il arrive cependant des conditions où l'évaporation est si rapide que les différents éléments n'ont pas le temps de diffuser à l'intérieur de la gouttelette. Dans un tel cas, la composition de la gouttelette reste inchangée. Afin de quantifier si l'évaporation suit la courbe de distillation Chin (Chin, 1994) propose d'utiliser le nombre de Peclet. Tel qu'observé par Makino (Makino et Law, 1988), le nombre de Peclet est un paramètre important dans l'étude de l'évaporation des gouttelettes multicomposants. Ce dernier s'évalue avec l'équation 2.1 (Chin, 1994).

$$Pe = \frac{\dot{m}_s}{2 \cdot \pi \cdot d_g \cdot D_{AB} \cdot \rho_{liq}} \quad (2.1)$$

où \dot{m}_s est le débit massique à la surface de la gouttelette (causé par l'évaporation), d_g est le diamètre de la gouttelette, D_{AB} est le coefficient de diffusion binaire et ρ_{liq} est la masse volumique du liquide. Le nombre de Peclet peut être vu comme le ratio entre la rapidité de l'évaporation sur la rapidité de la diffusion interne du carburant. Si $Pe \rightarrow 0$, l'ordre de grandeur de la diffusion est beaucoup plus important que l'ordre de grandeur de la vitesse d'évaporation. Ceci donne une température d'ébullition qui suit la courbe de distillation telle qu'observée sur le graphique 2.1. Dans le cas où $Pe \rightarrow \infty$, la vitesse de diffusion est pratiquement nulle par rapport à la vitesse d'évaporation et donc, la composition de la gouttelette peut être considérée comme inchangée tout au long de l'évaporation.

Pour un nombre de Peclet se situant entre ces deux extrêmes, la masse molaire de la vapeur (MM_{vap}) de carburant peut être calculée à l'aide de l'équation 2.2 (Chin, 1994).

$$MM_{vap} = MM_{vap,Pe=\infty} + (MM_{vap,Pe=0} - MM_{vap,Pe=\infty}) \cdot e^{-C \cdot Pe} \quad (2.2)$$

$$\text{où } C = 0.305 \cdot \Omega - 0.35 \cdot \Omega^2 + 0.14 \cdot \Omega^3 \quad (2.3)$$

$$\text{et } \Omega(t) = 1 - \frac{m_g(t)}{m_{g,0}} \quad (2.4)$$

Ces dernières équations permettent l'introduction d'une variable importante dans l'utilisation du modèle DC soit Ω , la fraction massique évaporée de la gouttelette. $\Omega = 0$ au début de la vie de la gouttelette et $\Omega = 1$ lorsque la totalité de la gouttelette s'est évaporée.

Afin de calculer la masse molaire de la vapeur, il est nécessaire de pouvoir calculer les termes $MM_{vap,Pe=0}$ et $MM_{vap,Pe=\infty}$. $MM_{vap,Pe=0}$ est approximé par un polynôme de Legendre (Gauthier, Bardon et Rao, 1991). Ce polynôme est basé directement sur la courbe de distillation du carburant et est présenté à l'équation 2.5.

$$MM_{\text{vap},Pe=0} = c_1 \cdot P_1 + c_2 \cdot P_2 + c_3 \cdot P_3 + c_4 \cdot P_4 + c_5 \cdot P_5 \quad (2.5)$$

$$P_1 = 1 \quad (2.6)$$

$$P_2 = S \quad (2.7)$$

$$P_3 = \frac{3 \cdot S^2 - 1}{2} \quad (2.8)$$

$$P_4 = \frac{5 \cdot S^3 - 3 \cdot S}{2} \quad (2.9)$$

$$P_5 = \frac{35 \cdot S^4 - 30 \cdot S^2 + 3}{8} \quad (2.10)$$

$$S = 1 - 2 \cdot \Omega \quad (2.11)$$

Les coefficients c_1 à c_5 sont présentés au tableau 2.1 pour du carburant jet A1 (kérosène) et le diesel (Gauthier, Bardon et Rao, 1991).

Tableau 2.1

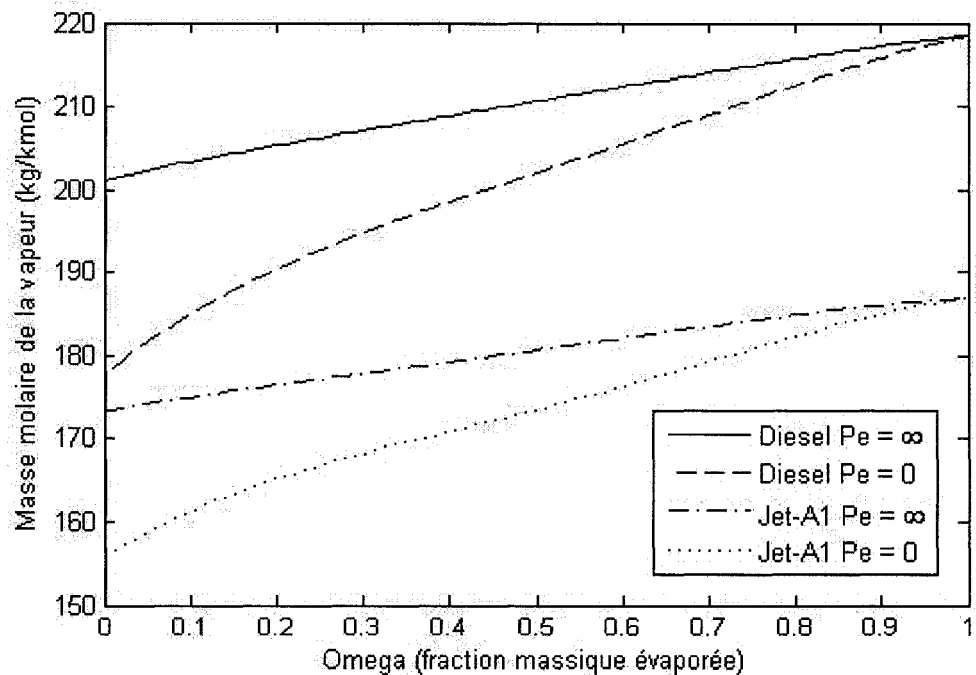
Coefficients du polynôme de Legendre utilisés dans le modèle DC

Carburant	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5
Jet A1	173.37	-14.785	-1.0524	-0.85762	-1.0516
Diesel	201.2	-19.206	-2.2623	-1.1779	-0.8238

Si l'on place l'équation 2.11 dans les équations 2.6 à 2.10 puis le résultat de cette dernière opération dans l'équation 2.5, on obtient un polynôme d'ordre 4 qui est fonction de Ω seulement. Pour calculer $MM_{\text{vap},Pe=\infty}$, Chin propose en fait que la masse molaire moyenne du liquide restant dans la gouttelette $MM_{\text{liq},\text{moy}}$ est équivalente à $MM_{\text{vap},Pe=\infty}$ tel que présenté par l'équation 2.12.

$$MM_{\text{vap}, Pe=\infty} = MM_{\text{liq}, \text{moy}} = \frac{\int_0^1 MM_{\text{vap}, Pe=0} \cdot d\tilde{\Omega}}{1 - \Omega} \quad (2.12)$$

Donc la masse molaire moyenne du liquide est l'intégrale (ou la somme) des masses molaires de la vapeur suivant la courbe de distillation du point actuel Ω jusqu'à la fin de l'évaporation ($\Omega=1$) divisé par la fraction massique restante ($1-\Omega$). L'utilisation du symbole $\tilde{\Omega}$ est seulement due à des raisons de standards mathématiques où une variable se trouvant dans les bornes d'intégration ne devrait pas se trouver à l'intérieure de l'intégrale. Donc le symbole Ω de l'équation 2.11 peut être remplacé directement par $\tilde{\Omega}$ au moment du calcul des l'équation 2.5. Le résultat de l'équation 2.12 est un polynôme d'ordre 4 fonction seulement de Ω au même titre que celui donné par les équations 2.5 à 2.11. Ces polynômes sont illustrés au graphique 2.2 pour le kérosène (Jet-A1) et le diesel no.2.



Graphique 2.2 Polynôme calculé à partir des équations 2.5 et 2.12 pour le diesel no.2 et le kérosène (Jet-A1).

Les courbes présentées au graphique 2.2 représentent les deux extrêmes que peuvent avoir la masse molaire de la phase vapeur. Il est possible de calculer la masse molaire de la vapeur pour une gouttelette de carburant dans un cas quelconque à l'aide de l'équation 2.2 si l'on connaît la fraction massique évaporée, Ω , et le nombre de Peclet. Il est aussi possible de calculer la masse molaire du carburant liquide seulement avec Ω car tel qu'énoncé plutôt, la limite supérieure où le nombre de Peclet tend vers l'infini est égale à la masse molaire moyenne du liquide restant dans la gouttelette (équation 2.12). Ce dernier point est à la fois un avantage et un défaut du modèle DC. Un avantage car il devient très simple de calculer la composition de la gouttelette. Un défaut car la composition du liquide évolue toujours comme si l'évaporation était lente. Pour parer à ce défaut, il serait nécessaire d'ajouter une variable par gouttelette qui évoluerait selon la masse molaire de la vapeur calculée avec l'équation 2.2. Ceci aurait pour effet de complexifier le modèle.

En résumé, le modèle DC propose une méthode pour tenir compte du caractère multicomposants d'un carburant. Il suffit de connaître la fraction massique évaporée, Ω . Avec cette dernière et le nombre de Peclet, il est possible de calculer la masse molaire d'un n-alcane équivalent pour connaître par la suite les propriétés de la phase liquide et de la phase vapeur.

2.3 Interface liquide/vapeur

Tel que spécifié par Burger (Burger et al., 2003), dans le cas où une gouttelette se retrouve dans un environnement de convection forcé, le temps caractéristique de la phase gazeuse est inférieur au temps caractéristique de la diffusion de la masse et de la température à l'intérieur de la gouttelette. Il est donc possible de considérer ces deux processus de transport comme quasi-permanent pour la phase gazeuse. Grâce à cette hypothèse, les calculs de l'évaporation de la gouttelette se résument simplement à un bilan d'énergie et un

bilan de masse à la surface de celle-ci. Kuo (Kuo, 1986) présente le bilan d'énergie tel que vu à l'équation 2.13.

$$q_s'' \Big|_{r_s^+} = \dot{r}_s \cdot \rho_{\text{liq}} \cdot \Delta h_{\text{evap}} + q_s'' \Big|_{r_s^-} \quad (2.13)$$

où \dot{r}_s est la variation du rayon dans le temps et Δh_{evap} est la chaleur latente d'évaporation du liquide. La figure 2.1 présente les différentes quantités échangées à la surface de la gouttelette.

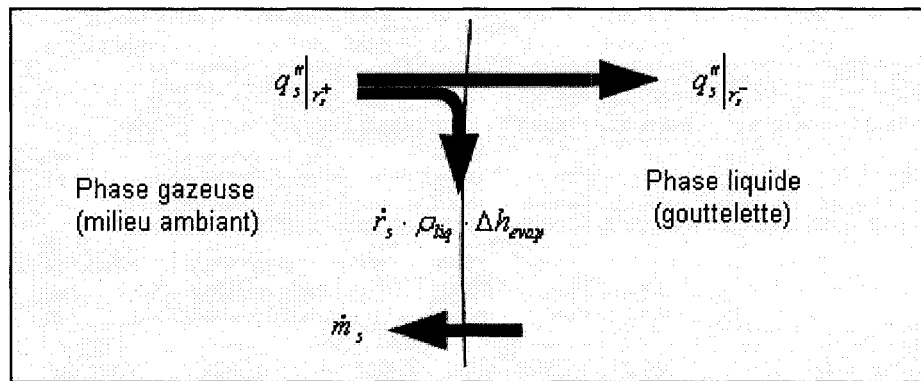


Figure 2.1 Représentation graphique des différentes quantités échangées entre la phase gazeuse et la phase liquide à la surface de la gouttelette.

Le terme du côté gauche de l'équation 2.13 est le flux de chaleur échangé entre la phase gazeuse et la surface de la gouttelette. De façon générale, il est présenté comme la somme des flux de chaleur dus à la convection et à la radiation.

$$q_s'' \Big|_{r_s^+} = q_{\text{conv}}'' + q_{\text{rad}}'' = h_t (T_\infty - T_s) + q_{\text{rad}}'' \quad (2.14)$$

où h_t est le coefficient de transfert de chaleur, T_∞ et T_s sont respectivement la température du milieu ambiant et la température de la surface. Pour des raisons de simplification, le flux de chaleur radiatif est négligé. Il faut dire qu'il n'est pratiquement jamais considéré dans les études mentionnées au chapitre 1 (voir section 1.5).

Le premier terme du côté droit de l'équation 2.13 représente l'énergie absorbée par l'évaporation du liquide et dépend du débit massique. Le second terme, quant à lui, représente l'énergie restante qui réchauffe ou refroidit la gouttelette selon le signe. La variation de la température de la gouttelette, dans le cas où il n'y a aucune discrétisation de la gouttelette (température uniforme dans la gouttelette), peut se résumer à l'équation suivante :

$$\frac{dT}{dt} = \frac{h_t \cdot A_g \cdot (T_\infty - T_s) - \dot{m}_s \cdot \Delta h_{\text{evap}}}{m_g \cdot C_{p,\text{liq}}} \quad (2.15)$$

où A_g est l'aire de la surface d'échange, m_g est la masse de la gouttelette et $C_{p,\text{liq}}$ est la chaleur spécifique du liquide.

Pour le bilan de masse, on considère que les différentes espèces contenues dans l'air (N_2 , O_2 , H_2O ou CO_2) ne sont pas solubles dans le liquide. Leurs flux massiques sont donc nuls à la surface de la gouttelette. Il reste donc seulement une génération de vapeur de carburant à la surface qui se calcule à l'aide de l'équation 2.16. Cette masse de vapeur est égale à la variation de masse de la gouttelette.

$$\frac{dm_g}{dt} = \dot{m}_s = h_m \cdot A_g \cdot \rho_{\text{ref}} \cdot (Y_\infty - Y_s) \quad (2.16)$$

où h_m est le coefficient de transfert de masse, ρ_{ref} est la masse volumique de référence et Y représente la fraction massique du milieu ambiant et à la surface de la gouttelette selon l'indice.

Les coefficients h_t et h_m sont calculés avec l'équation 2.17 et 2.18. Ils sont fonction respectivement des nombres Nu et Sh .

$$h_t = \frac{Nu \cdot k}{d_g} \quad (2.17)$$

$$h_m = \frac{Sh \cdot D_{AB}}{d_g} \quad (2.18)$$

Tel que constaté dans le chapitre 1, il existe plusieurs corrélations dans la littérature pour l'évaluation des nombres Nu et Sh. Une étude sur cette question sera présentée au chapitre 4 afin de déterminer quelles corrélations permettant d'évaluer les nombres Nu et Sh semblent les plus aptes à reproduire les résultats expérimentaux en employant le modèle DC.

2.4 Discussion sur l'effet multicomposants du modèle DC

L'effet multicomposants du modèle DC est surtout basé sur l'évaluation des propriétés de la phase vapeur et sur l'évaluation de la fraction molaire de carburant se retrouvant à la surface de la gouttelette. Comme il sera présenté au chapitre 3, l'évaluation de la masse molaire du n-alcane équivalent de la phase vapeur vient influencer les propriétés de transport qui influencent à leur tour les coefficients de transfert de masse et de chaleur (équations 2.17 et 2.18).

De plus (et surtout), la masse molaire du n-alcane équivalent de la phase vapeur vient influencer la fraction molaire à la surface de la gouttelette. Par exemple, si la masse molaire du n-alcane équivalent de la phase vapeur est assez faible ($Pe \rightarrow 0$), l'évaluation de la fraction molaire de vapeur de carburant à la surface de la gouttelette sera plus importante. À l'inverse, si la masse molaire du n-alcane équivalent de la phase vapeur est assez élevée ($Pe \rightarrow \infty$), la fraction molaire de vapeur de carburant à la surface sera plus faible. La fraction molaire de vapeur de carburant vient influencer directement le débit massique à la surface. Tel que rapporté à l'équation 2.16, le débit massique est proportionnel à la différence entre la fraction massique de vapeur de carburant dans le milieu ambiant et la fraction massique de vapeur de carburant à la surface. La fraction massique et la fraction molaire ne sont pas directement proportionnelles mais plus la fraction molaire est importante, plus la fraction massique le devient. La relation entre la

fraction molaire et la fraction massique d'un élément i est présenté aux équations 2.19 à 2.21.

$$X_i = \frac{\frac{Y_i \cdot \rho}{MM_i}}{\frac{\rho}{MM_i}} = \frac{Y_i \cdot MM_m}{MM_i} \quad (2.19)$$

$$Y_i = \frac{X_i \cdot MM_i}{MM_m} \quad (2.20)$$

$$MM_m = \sum_i X_i \cdot MM_i \quad (2.21)$$

où X_i , Y_i et MM_i sont respectivement la fraction molaire, la fraction massique et la masse molaire de l'élément i . MM_m est la masse molaire du mélange. L'évaluation de la fraction molaire à la surface des gouttelettes sera présentée au chapitre 3. Une attention particulière a été consacrée à cette dernière car elle influence directement le débit massique prédit par le modèle DC et permet de prévoir à quel moment un élément plus volatil s'évaporerait dans des conditions se rapprochant d'un moteur diesel (chapitre 5).

2.5 Conclusion du chapitre

Ce chapitre a présenté le modèle DC. Ce dernier est basé sur les courbes de distillation des différents carburants grands marchés. Le modèle DC permet de calculer la masse molaire du n-alcane équivalent de la phase vapeur et de la phase liquide. Pour la phase vapeur, l'évaluation est basée sur le nombre de Pe et la fraction massique évaporée, Ω . Pour la phase liquide, l'évaluation est basée seulement sur Ω . Le nombre de Pe peut être vu comme le ratio entre la rapidité d'évaporation de la vapeur et la rapidité de diffusion des différents éléments dans la phase liquide. On se sert de Pe pour déterminer si les éléments plus volatils du carburant ont le temps de se rendre à la surface pour s'évaporer ou si la composition de la vapeur de carburant est équivalente à la composition du liquide. Dans

ce dernier cas, la diffusion des éléments plus volatils est trop lente et l'effet multicomposants devient négligeable.

Finalement, pour permettre le calcul de l'évolution d'une gouttelette dans des conditions rencontrées dans les simulations d'injection et de moteur diesel, plusieurs propriétés autant pour la phase gazeuse que pour la phase liquide doivent être évaluées. Les corrélations et les procédures employées à cette fin sont présentées dans le prochain chapitre.

CHAPITRE 3

Propriétés

3.1 Introduction

L'évaluation des propriétés physiques est un domaine en soit. Il est bien sûr préférable d'utiliser des valeurs provenant de l'expérimentation. Cependant, il est très rare de trouver de telles tables pour toutes les substances dans toutes les plages de conditions possibles. Comme l'utilisation du modèle DC nécessite l'évaluation de plusieurs propriétés selon la température, la pression et la masse molaire d'un n-alcane équivalent, il devient plus facile de se baser sur des relations empiriques. De cette façon, on peut considérer la variation des propriétés lors de l'évaporation d'une gouttelette. Tel que noté dans le premier chapitre, Abrazom (Abramzon et Sirignano, 1989) utilise déjà des corrélations afin de tenir en compte cet aspect. Considérer la variation des propriétés est devenu monnaie courante comme on peut voir dans (Burger et al., 2003) et (Sazhin et al., 2005). Dans la majorité des cas, la référence est le livre «The Properties of Gases and Liquids» qui en est maintenant à sa 5e édition (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001).

Ce chapitre contient 4 sections. La première partie introduit les propriétés de référence utilisées dans la majorité des corrélations. La deuxième et la troisième parties traitent respectivement de l'évaluation des propriétés de la phase gazeuse et de la phase liquide. Finalement, la quatrième partie présente une méthode pour déterminer la fraction molaire à la surface de la gouttelette dans des conditions de basse et de haute pression.

3.2 Propriétés de référence

Les corrélations permettant l'évaluation des propriétés des n-alcanes sont en grande partie basées sur des propriétés de référence déjà connues. Ces dernières sont résumées au tableau 3.1 ainsi que les unités utilisées dans la majorité des corrélations.

Tableau 3.1

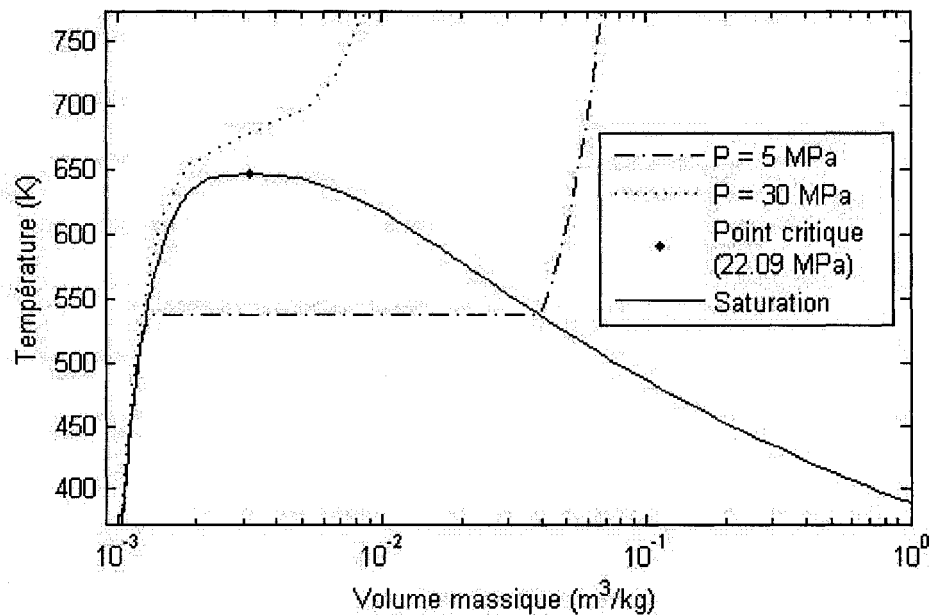
Propriétés de référence utilisées dans les corrélations pour évaluer les propriétés

Symbole	Nom	Description	Unité
T_c	Température critique	Température au point critique	K
P_c	Pression critique	Pression au point critique	bar
ω	Facteur acentrique de Pitzer	$-\log(P_{vp}/P_c)_{T/T_c=0.7} - 1$	-
V_c	Volume critique	Volume que prend une mole de matière au point critique	cm ³ /mol
Z_c	Facteur de compressibilité critique	Rapport entre le volume critique et le volume en gaz parfait au point critique	-
$V_{l,ref}$	Volume liquide de référence	Volume que prend une mole de matière à pression atmosphérique et à 20°C	cm ³ /mol
Δh_{evap}	Enthalpie d'évaporation	Enthalpie d'évaporation au point normal d'ébullition	J/mol
T_{evap}	Température d'ébullition	Température au point normal d'ébullition (pression atmosphérique)	K

Il est important de noter les unités utilisées au tableau 3.1. Ces unités sont celles à utiliser dans les corrélations de ce chapitre si elles ne sont pas spécifiées. Avec ces unités, la constante universelle des gaz est :

$$R = 83.145 \frac{\text{bar} \cdot \text{cm}^3}{\text{mol} \cdot \text{K}} \quad (3.1)$$

On peut voir que la majorité des paramètres énumérés au tableau 3.1 sont liés au point critique. Ce point est extrêmement important dans l'analyse du passage de l'état liquide à l'état vapeur. Le point critique d'une substance pure est le premier endroit (en termes de température, pression et volume molaire ou massique) où l'évaporation de cette dernière n'est pas caractérisée par un changement abrupt du volume molaire ou massique. Le graphique 3.1 présente, à titre d'exemple, le diagramme T-V de l'eau sur lequel on peut observer le passage de l'état liquide à l'état vapeur pour deux pressions différentes.



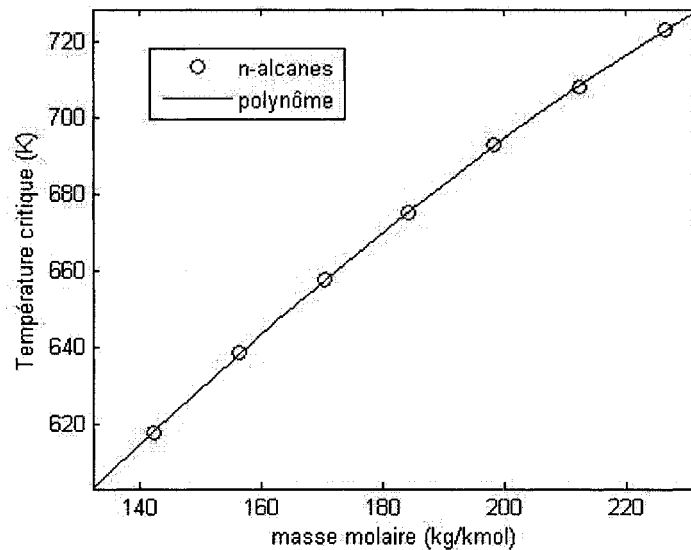
Graphique 3.1 *Évolution de l'évaporation à pression constante de l'eau sur un diagramme T-V.*

On peut voir sur le graphique 3.1, les deux grands types d'évaporation. À une pression de 5 MPa, l'évaporation est subcritique. Le passage de l'état liquide à l'état vapeur est bien défini par un plateau isotherme qui correspond tout simplement à l'ébullition. À une pression de 30 MPa, l'évaporation est supercritique. Le passage de l'état liquide à l'état vapeur n'est plus simple à distinguer. On ne peut pas observer une discontinuité entre l'état liquide et l'état vapeur contrairement à une évaporation évoluant sous la pression critique.

Comme les différentes caractéristiques physiques des n-alcanes doivent être interpolées pour l'utilisation du modèle DC, l'utilisation de polynômes de lissage devient très pratique. Des polynômes du deuxième ordre fonction de la masse molaire (MM) tels que présentés à l'équation 3.2 ont été choisis pour leur simplicité.

$$T_c = a \cdot MM^2 + b \cdot MM + c \quad (3.2)$$

Par la suite, il devient facile de calculer par exemple la température critique lorsque la masse molaire de la gouttelette se situe entre deux n-alcanes. Le graphique 3.2 présente un exemple pour la température critique.



Graphique 3.2 *Polynôme de lissage de la température critique des n-alcanes.*

À noter que seul les n-alcanes de C10 à C16 (voir annexe I) ont été utilisés pour la détermination des coefficients de l'équation 3.2 car, comme vu au graphique 3.2, la masse molaire de la vapeur et du liquide, que ce soit pour le kérosène ou le diesel, est toujours incluse entre la masse molaire du décane (C10) et celle du hexadécane (C16). Le tableau 3.2 présente un résumé des différents coefficients des polynômes de lissage employés dans le cadre du présent projet pour calculer les propriétés de référence.

Tableau 3.2

Coefficients des polynômes de lissage

	a	b	c
T_c	$-2,995e-3 \text{ K}/(\text{kg}/\text{kmol})^2$	$2,349 \text{ K}/(\text{kg}/\text{kmol})$	$3,444e2 \text{ K}$
P_c	$3,993e-4 \text{ bar}/(\text{kg}/\text{kmol})^2$	$2,333e-1 \text{ bar}/(\text{kg}/\text{kmol})$	$4,633e1 \text{ bar}$
ω	$-5,566e-6 \text{ l}/(\text{kg}/\text{kmol})^2$	$4,721e-3 \text{ l}/(\text{kg}/\text{kmol})$	$-6,707e-2$
V_c	$3,267e-3 \text{ cm}^3/\text{mol}/(\text{kg}/\text{kmol})^2$	$3,694 \text{ cm}^3/\text{mol}/(\text{kg}/\text{kmol})$	$3,161e1 \text{ cm}^3/\text{mol}$
Z_c	0	$-2,037e-4 \text{ l}/(\text{kg}/\text{kmol})$	$2,858e-1$
$V_{l,\text{ref}}$	0	$1,167 \text{ cm}^3/\text{mol}/(\text{kg}/\text{kmol})$	$2,992e1 \text{ cm}^3/\text{mol}$
Δh_{evap}	$-3,527e-4 \text{ J}/\text{mol}/(\text{kg}/\text{kmol})^2$	$2,780e-1 \text{ J}/\text{mol}/(\text{kg}/\text{kmol})$	$6,343 \text{ J}/\text{mol}$
T_{evap}	$-2,813e-3 \text{ K}/(\text{kg}/\text{kmol})^2$	$2,373 \text{ K}/(\text{kg}/\text{kmol})$	$1,667e2 \text{ K}$

3.3 Propriétés du milieu gazeux

L'évaluation des propriétés du milieu gazeux représente la partie la plus importante pour l'application du modèle DC car la majorité des nombres adimensionnels qui quantifient l'évaporation sont basés sur ces propriétés. Un résumé des propriétés présentées dans cette section ainsi que le nom des auteurs des corrélations se retrouve au tableau 3.3.

Tableau 3.3

Liste des propriétés du milieu gazeux étudiées

Propriété	Auteur(s) des corrélations	Influence
Viscosité	Lucas	Pr, Sc et Re
Conductivité thermique	Roy et Thodos ; Stiel and Thodos	Pr
Chaleur spécifique	Thinh ; Lee et Kesler	Pr
Coefficient de diffusion binaire	Fuller ; Takahashi	Sc

Tableau 3.3 (suite)

Liste des propriétés du milieu gazeux étudiées

Propriété	Auteur(s) des corrélations	Influence
Masse volumique du milieu ambiant	Aucun (gaz parfait)	Re
Masse volumique de référence	Aucun (gaz parfait)	Sc

Certaines hypothèses ont dû être apportées dans la programmation de la plupart des corrélations car il est très rare d'obtenir une corrélation applicable parfaitement à un problème. C'est pour cette raison que chaque corrélation ou procédure est présentée dans les prochaines sections.

3.3.1 État de référence

Avant d'étudier plus en détail les corrélations, il est important de noter que souvent, les propriétés sont évaluées à un état dit de référence. Un état de référence souvent utilisé dans les problèmes de transfert de chaleur ou/et de masse se nomme « film ». Il représente une température moyenne et une fraction molaire moyenne entre la surface de la gouttelette et le milieu ambiant. Dans le cas d'une gouttelette, l'état de référence souvent utilisé est plutôt « la règle du 1/3 » (Abramzon et Sirignano, 1989 ; Burger et al., 2003 ; Chin, 1994 ; Yuen et Chen, 1978) à l'exception de la masse volumique dans le nombre de Reynolds qui est celle du milieu ambiant. Il s'agit d'évaluer les propriétés à une température (T) et une fraction massique (Y) de référence comme présentées par les équations 3.3 et 3.4.

$$T_{\text{ref}} = T_s + \frac{1}{3}(T_\infty - T_s) \quad (3.3)$$

$$Y_{\text{ref}} = Y_s + \frac{1}{3}(Y_\infty - Y_s) \quad (3.4)$$

L'indice ∞ représente le milieu ambiant alors que l'indice s , représente la surface de la gouttelette.

3.3.2 Viscosité d'un mélange gazeux

La viscosité, μ , de référence est calculée à l'aide des corrélations de Lucas (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001).

$$\xi = 0.176 \left(\frac{T_c}{MM^3 \cdot P_c^4} \right)^{1/6} \quad (3.5)$$

où ξ est l'inverse de la viscosité réduite (μP^{-1}). La constante 0.176 doit être utilisée si les unités de T_c , MM et P_c sont respectivement les K, les kg/kmol et les bar. Il est possible de déterminer la viscosité, μ , avec la relation suivante.

$$\mu \cdot \xi = 0.807 \cdot T_r^{0.618} - 0.357 \cdot \exp(-0.449 \cdot T_r) + 0.340 \cdot \exp(-4.058 \cdot T_r) + 0.018 \quad (3.6)$$

Les unités de μ sont de μP . Deux termes ont été volontairement retirés de l'équation 3.6 car ils ne sont pas nécessaires avec les substances étudiées dans le présent projet. L'équation 3.6 introduit le paramètre T_r qui signifie température réduite. La température réduite ainsi que la pression réduite sont deux paramètres qui sont utilisés très souvent dans les corrélations présentées dans ce chapitre. Il s'agit du ratio de la température sur la température critique et du ratio de la pression et de la pression critique.

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad (3.7)$$

$$P_r = \frac{P}{P_c} \quad (3.8)$$

Dans le cas où l'on souhaite déterminer la viscosité d'un mélange gazeux, les mêmes équations peuvent être employées sauf qu'il faut définir les différents paramètres tels qu'exposés aux équations 3.9 à 3.11.

$$T_{cm} = \sum_i X_i \cdot T_{ci} \quad (3.9)$$

$$P_{cm} = R \cdot T_{cm} \frac{\sum_i X_i \cdot Z_{ci}}{\sum_i X_i \cdot V_{ci}} \quad (3.10)$$

$$MM_m = \sum_i X_i \cdot MM_i \quad (3.11)$$

où l'indice cm représente les propriétés critiques du mélange gazeux composé d'air et de vapeur de carburant. La proportion de carburant est définie par la fraction molaire de référence telle que calculée à l'équation 3.4.

Maintenant, si l'on veut ajouter l'effet de la pression Lucas propose une procédure qui est liée aux équations présentées jusqu'à maintenant. Premièrement, on calcule un paramètre Z_1 .

$$Z_1 = \mu^0 \cdot \xi \quad (3.12)$$

où μ^0 est la viscosité basse pression. Si $T_r < 1$, on calcule Z_2 comme suit :

$$Z_2 = 0.600 + 0.760 \cdot P_r^\alpha + (6.990 \cdot P_r^\beta - 0.6)(1 - T_r) \quad (3.13)$$

$$\text{où } \alpha = 3.262 + 14.98 \cdot P_r^{5.508} \quad (3.14)$$

$$\text{et } \beta = 1.390 + 5.746 \cdot P_r \quad (3.15)$$

Dans le cas où $1 < T_r < 40$ et que $P_r < 100$, on calcule Z_2 comme suit :

$$Z_2 = Z_1 \left(1 + \frac{a \cdot P_r^e}{b \cdot P_r^f + (1 + c \cdot P_r^d)^{-1}} \right) \quad (3.16)$$

$$\text{où } a = \frac{1.245 \times 10^{-3}}{T_r} \exp(5.1726 \cdot T_r^{-0.3286}) \quad (3.17)$$

$$\text{et } b = a(1.6553 \cdot T_r) - 1.2723 \quad (3.18)$$

$$\text{et } c = \frac{0.4489}{T_r} \exp(3.0578 \cdot T_r^{-37.7332}) \quad (3.19)$$

$$\text{et } d = \frac{1.7368}{T_r} \exp(2.2310 \cdot T_r^{-7.6351}) \quad (3.20)$$

$$\text{et } e = 1.3088 \quad (3.21)$$

$$\text{et } f = 0.9425 \cdot \exp(-0.1853 \cdot T_r^{0.4489}) \quad (3.22)$$

Finalement, on calcule la viscosité en $\text{N}\cdot\text{s}/\text{m}^2$ avec la relation suivante :

$$\mu = \frac{Z_2}{\xi \cdot 10^7} \quad (3.23)$$

Dans le cas où l'on cherche la viscosité à haute pression pour un mélange, on peut utiliser la même procédure si les paramètres T_c , P_c et MM sont calculés pour le mélange avec les équations 3.9 à 3.11. À noter qu'au moment de la programmation, il s'est révélé beaucoup plus simple d'utiliser seulement l'azote plutôt que les fractions molaires de chaque gaz contenue dans l'air surtout dû au fait que la composition de l'air peut changer lors de la combustion dans un moteur diesel. Le tableau 3.4 présente une comparaison entre les valeurs de viscosité calculées avec l'approche de Lucas et des valeurs expérimentales (Incropera et DeWitt, 2002, ; Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001) pour un maximum de conditions jugées pertinentes.

Tableau 3.4

Comparaison entre les valeurs calculées et expérimentales de viscosité

Substance	% molaire	T (K)	P (bar)	Calculée ($\text{N}\cdot\text{s}/\text{m}^2$)	Expérimentale ($\text{N}\cdot\text{s}/\text{m}^2$)	Erreur (%)
azote	100	300	1	1.79e-5	1.78e-5	0,6
azote oxygène	79 21	300	1	1.79e-5	1.85e-5	-3,2

Tableau 3.4 (suite)

Comparaison entre les valeurs calculées et expérimentales de viscosité

Substance	% molaire	T (K)	P (bar)	Calculée (N.s/m ²)	Expérimentale (N.s/m ²)	Erreur (%)
azote oxygène	79 21	1200	1	4.58e-5	4.73e-5	-3,1
n-hexane	100	380	1	0.83e-5	0.81e-5	2,4
n-hexane	100	540	1	1.16e-5	1.16e-5	0,2
azote n-heptane	0 100	344	1	0.715e-5	0.694e-5	3,0
azote n-heptane	0.515 0.485	344	1	1.042e-5	1.040e-5	0,2
azote n-heptane	0.853 0.147	344	1	1.541e-5	1.546e-5	-0,3
azote n-heptane	100 0	344	1	1.987e-5	1.975e-5	0,6
n-pentane	100	600	20.3	1.45e-5	1.43e-5	1,6
n-pentane	100	600	81.1	2.30e-5	2.42e-5	-5,1
n-pentane	100	600	152	3.92e-5	3.83e-5	2,3

À noter que dans le cas de l'air (2^e et 3^e cas du tableau 3.4), les calculs ont été faits seulement avec l'azote. Le but de cette comparaison est de voir si l'utilisation de l'azote seulement cause une erreur importante. On peut voir qu'à 1200 K, l'erreur demeure très faible (-3,1%). Comme la température de référence est évaluée avec la règle du 1/3 (équation 3.3), elle n'atteindra jamais des valeurs très élevées (exemple 2000 K). Dans un cas extrême, où la température de l'air serait de 2000 K et que la température de la gouttelette serait à son maximum possible soit 715 K (T_c maximum atteignable par le diesel avec le modèle DC), la température de référence serait approximativement de 1200 K. Comme l'erreur à 1200 K est seulement de -3,1%, la simplification de seulement utiliser l'azote pour évaluer la viscosité de l'air semble acceptable. Il faut noter que les équations pour le mélange gazeux ne sont pas présentées pour le mélange des différents constituants de l'air. Ces dernières sont utilisées pour calculer les propriétés d'un mélange

gazeux d'azote (utilisé pour représenter l'air) et la vapeur d'un n-alcane équivalent. Comme précisé à la section 3.3.1 les propriétés sont évaluées à un état dit de référence. Ce dernier défini, premièrement, la température à employer dans les corrélations. Deuxièmement, l'état de référence défini la fraction massique d'azote et de vapeur de carburant à employer dans les corrélations de mélange.

Le pourcentage d'erreur présenté dans le tableau 3.4 est calculé avec l'équation 3.24.

$$\frac{(\text{calc.} - \text{exp.})}{\text{exp.}} \times 100 \quad (3.24)$$

Pour ne pas trop alourdir ce chapitre, le reste des comparaisons entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées de diverses propriétés ont été placées à l'annexe 2. L'équation 3.24 est toujours utilisée dans le calcul des pourcentages d'erreur.

3.3.3 Conductivité thermique

La procédure pour évaluer la conductivité thermique, k , est semblable à celle présentée pour la viscosité. Premièrement, on calcule l'inverse de la conductivité thermique Γ d'un n-alcane avec la méthode de Roy et Thodos (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001).

$$\Gamma = 210 \left(\frac{T_c \cdot MM^3}{P_c^4} \right)^{1/6} \quad (3.25)$$

La constante 210 doit être utilisée si les unités de T_c , MM et P_c sont respectivement les K, les kg/kmol et les bar. Pour déterminer la conductivité thermique, Roy et Thodos propose les relations suivantes :

$$k \cdot \Gamma = (k \cdot \Gamma)_{tr} + (k \cdot \Gamma)_{int} \quad (3.26)$$

$$\text{où } (k \cdot \Gamma)_{tr} = 8.757 \cdot (\exp(0.0464 \cdot T_r) - \exp(-0.2412 \cdot T_r)) \quad (3.27)$$

$$\text{et } (k \cdot \Gamma)_{int} = C \cdot f(T_r) \quad (3.28)$$

Le terme $f(T_r)$ (équation 3.28) est une fonction que l'on choisit selon la famille d'hydrocarbures. Les n-alcanes se classant dans la famille des hydrocarbures saturés :

$$f(T_r) = -0.152 \cdot T_r + 1.191 \cdot T_r^2 - 0.039 \cdot T_r^3 \quad (3.29)$$

La variable C (équation 3.28) quant à elle dépend de la forme de la molécule. Elle se calcule par l'addition des contributions de chaque groupe d'atomes formant la molécule. La constante C pour un n-alcane particulier est déterminée par l'équation 3.30.

$$C = 0.73 + 2.00 + 3.18 + 3.68 + 4.56 \cdot (nbc - 4) \quad (3.30)$$

Le terme nbc signifie le nombre d'atome de carbone. Notez qu'il faut au moins du pentane ($nbc > 5$) pour employer cette équation ce qui est le cas dans le présent projet. Dans l'application du modèle DC, il faut interpoler la variable C dans le cas où la masse molaire du carburant se retrouve entre deux n-alcanes. Ceci est possible si l'on combine l'équation 3.30 avec la relation qui lie le nombre d'atomes de carbone d'un n-alcane avec sa masse molaire :

$$nbc = \frac{8 \cdot (125 \cdot MM - 252)}{14027} \quad (3.31)$$

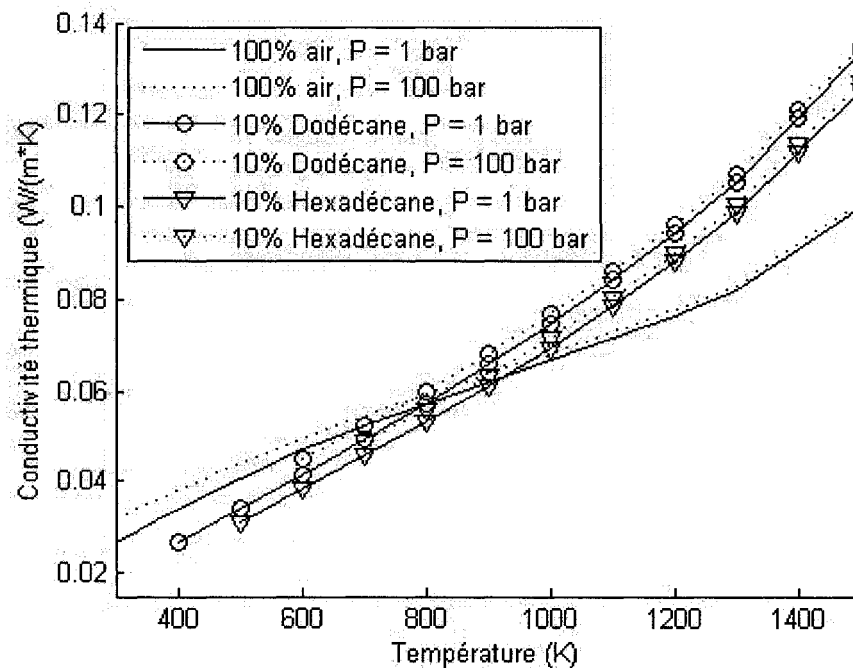
Cette dernière relation a été obtenue en corrélant les masses molaires des n-alcanes avec leurs nombres d'atomes de carbone respectifs. Les valeurs utilisées (MM et nbc) pour obtenir cette relation sont présentées à l'annexe 1. En combinant l'équation 3.30 et l'équation 3.31, on obtient l'équation 3.32.

$$C = 0.3251 \cdot MM - 9.3054 \quad (3.32)$$

Pour l'évaluation de la conductivité thermique de l'air à basse pression, il s'est avéré plus simple d'utiliser des tables déjà disponibles (Incropera et DeWitt, 2002). Le calcul de la conductivité thermique d'un mélange gazeux à basse pression peut se calculer à l'aide de l'équation proposée premièrement par Wassiljewa et améliorée par Mason et Saxena (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001). Cependant, comme la procédure est complexe, il a été jugé plus pertinent de la placer en annexe (voir annexe 3).

Pour inclure l'effet de la pression sur le mélange, la procédure de Stiel et Thodos (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001) est employée. Cette procédure fut développée à priori pour les substances pures. Leurs corrélations sont basées sur l'hypothèse que la différence entre la conductivité thermique à haute pression et celle à pression ambiante est fonction de la masse volumique. Ces corrélations peuvent aussi être employées pour un mélange d'azote et de vapeur de carburant (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001). Pour plus de détails, voir annexe 3.

Afin de mieux illustrer les résultats obtenus, le graphique 3.3 présente la conductivité thermique calculée pour différentes conditions



Graphique 3.3 Résultats des calculs de conductivité thermique pour différentes conditions.

Comme on peut le voir sur le graphique 3.3, trois différents cas sont étudiés et chacun pour une pression de 1 et 100 bar. Premièrement, on voit que l'effet de la pression sur la conductivité thermique est faible. Cependant, dans tous les cas, la pression augmente la

conductivité thermique. On peut voir que l'ajout d'un n-alcane sous forme vapeur dans le mélange influence considérablement les valeurs. De plus, en variant le n-alcane, on remarque une plus grande influence que l'effet de la pression. Ce qui semble supporter l'ajout d'un modèle multicomposants au niveau de l'évaluation de la conductivité thermique à tout le moins.

3.3.4 Chaleur spécifique

La chaleur spécifique, C_p , des gaz est de façon générale traitée avec l'hypothèse des gaz parfaits qui conduit à une chaleur spécifique qui est seulement fonction de la température. Afin d'inclure l'effet de la pression, une méthode proposée par Lee et Kesler (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001) est utilisée dans l'application du modèle DC.

La première étape est de déterminer une chaleur spécifique pour chaque composé d'un mélange avec l'hypothèse des gaz parfaits puis de faire une moyenne pondérée par la fraction molaire.

$$C_{Pm}^{\circ} = \sum_i X_i \cdot C_{Pi}^{\circ} \quad (3.33)$$

Dans le cas de l'air, comme pour la conductivité thermique, des valeurs tabulées sont utilisées pour l'évaluation du C_p sous la forme d'un gaz parfait (Incropera et DeWitt, 2002). Pour les n-alcane, une procédure proposée par Thinh (Reid, Prausnitz et Poling, 1987) est utilisée. Elle est basée sur la contribution des différents groupes d'atomes. Comme les n-alcane sont des molécules relativement simples, il suffit d'inclure l'effet des groupes CH_3 et CH_2 .

$$CH_3 = 19.8312 + 85.5824 \cdot \exp\left(\frac{-1013.8229}{T^{1.0489}}\right) \quad (3.34)$$

$$CH_2 = 12.9037 + 573.0482 \cdot \exp\left(\frac{-788.7739}{T^{1.0380}}\right) - 503.96 \cdot \exp\left(\frac{-832.8313}{T^{1.0452}}\right) \quad (3.35)$$

$$C_p^\circ = 2 \cdot CH_3 + (nbc - 2) \cdot CH_2 \quad (3.36)$$

Par la suite, on inclut l'effet de la pression en se basant sur la température et la pression réduites calculées avec l'équation 3.7 et 3.8 respectivement.

$$C_{Pm} = C_{Pm}^\circ + \Delta C_{Pm} \quad (3.37)$$

$$\Delta C_{Pm} = (\Delta C_p)^{(0)} + \omega \cdot (\Delta C_p)^{(1)} \quad (3.38)$$

$$(\Delta C_p)^{(0)} = f(T_r, P_r) \quad (3.39)$$

$$(\Delta C_p)^{(1)} = f(T_r, P_r) \quad (3.40)$$

Cette méthode s'applique autant aux substances pures qu'aux mélanges. Pour une substance pure, on utilise directement T_c , P_c de la substance pour le calcul de T_r et P_r . Pour un mélange, on utilise les équations 3.41 à 3.43 pour déterminer les propriétés pseudo critiques T_{cm} et P_{cm} ainsi que le facteur acentrique, ω_m .

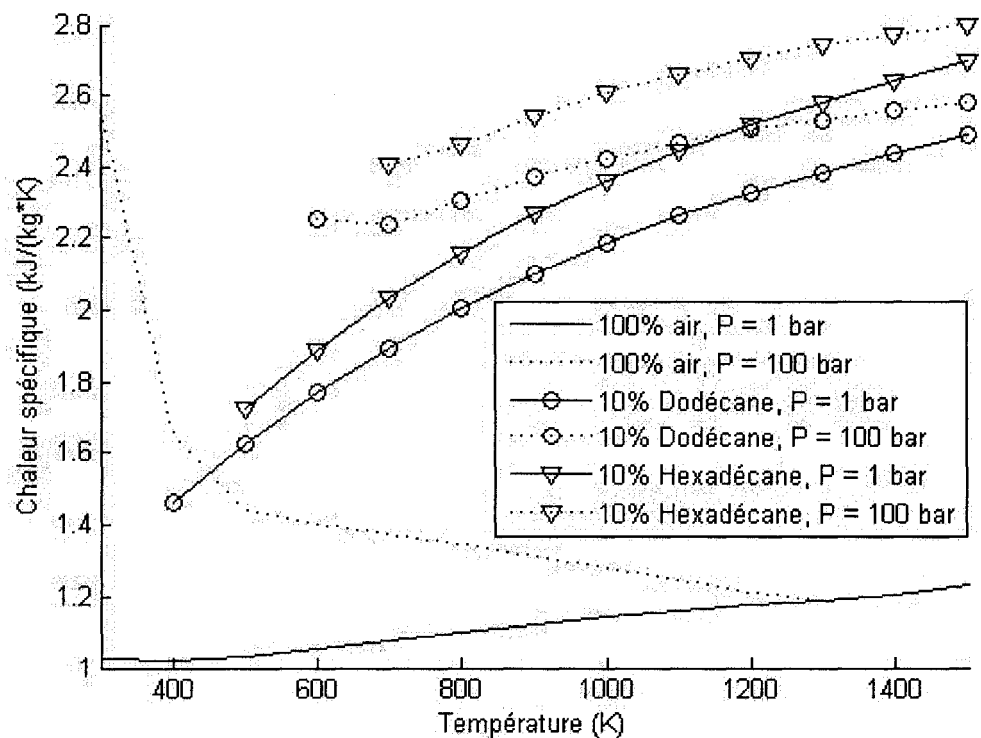
$$T_{cm} = \sum_i X_i \cdot T_{ci} \quad (3.41)$$

$$P_{cm} = \frac{Z_{cm} \cdot R \cdot T_{cm}}{V_{cm}} = \frac{\left(\sum_i X_i \cdot Z_{ci} \right) \cdot R \cdot \left(\sum_i X_i \cdot T_{ci} \right)}{\left(\sum_i X_i \cdot V_{ci} \right)} \quad (3.42)$$

$$\omega_m = \sum_i X_i \cdot \omega_i \quad (3.43)$$

L'évaluation des termes $(\Delta C_p)^{(0)}$ et $(\Delta C_p)^{(1)}$ se fait à l'aide de tables proposées par Lee et Kesler (Reid, Prausnitz et Poling, 1987). Le problème de ces tables est qu'elles n'avancent aucun chiffre dans les environs du point critique car il est difficile d'y avoir une grande précision. De plus, la chaleur spécifique devient théoriquement infinie au point critique. Cette réalité cause de grandes difficultés dans l'application du modèle DC car si par hasard l'évaluation de la chaleur spécifique se retrouve dans cette région, il est nécessaire d'avoir une valeur pour effectuer un calcul. Pour palier à ce problème une procédure

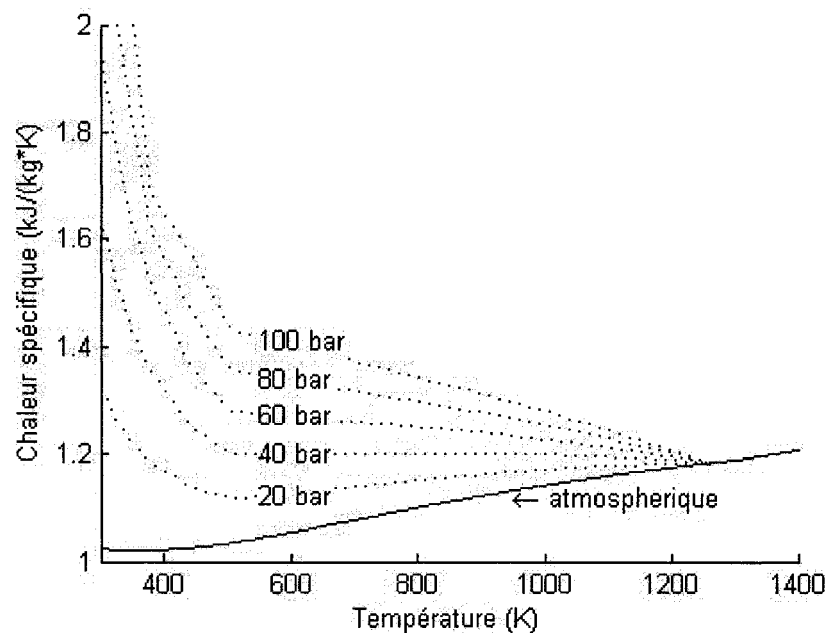
d'interpolation cubique est employée afin d'obtenir des valeurs. L'introduction de cette interpolation cause une erreur dans cette région mais la probabilité de s'y retrouver est faible car le point critique n'est qu'un cas particulier parmi une infinité d'autres cas. Les tables utilisées dans le présent projet sont présentées à l'annexe 4. On y retrouve les valeurs proposées par Lee et Kesler ainsi que les valeurs ajoutées par la procédure d'interpolation. Le graphique 3.4 présente les résultats des calculs de chaleur spécifique pour différentes conditions.



Graphique 3.4 *Résultats des calculs de chaleur spécifique pour différentes conditions.*

On peut voir l'influence de la pression sur la chaleur spécifique particulièrement à basse température. La raison est simple, lorsque le mélange atteint une température réduite de 10, on le considère comme un gaz parfait. On peut clairement voir un changement de pente pour la courbe 100% air à 100 bar. Ce changement est dû à l'interpolation linéaire

entre les différentes valeurs présentées dans les tables de Lee et Kesler. Entre chaque point, la pente de l'un à l'autre est différente. On peut aussi clairement voir que l'ajout de 10% molaire d'un n-alcane dans le mélange gazeux vient aussi influencer la valeur de la chaleur spécifique. Si l'on modifie le n-alcane, on peut noter une différence moins importante. Le graphique 3.5 présente la variation graduelle de la chaleur spécifique jusqu'à une pression de 100 bar pour l'air seulement.



Graphique 3.5 *Chaleur spécifique de l'air en fonction de la température pour différentes pressions.*

Comme on peut le voir à faible température, la chaleur spécifique semble se diriger tout droit vers l'infini. En fait, elle se dirige vers un maximum qui se retrouve dans une zone non loin de la température critique de l'azote soit 126 K. Vers une température de 1260 K (10 fois la température critique) on voit que toutes les courbes se confondent en une seule. C'est à ce point que l'air, pour l'évaluation de la chaleur spécifique, est considéré comme un gaz parfait.

3.3.5 Coefficient de diffusion binaire

Le coefficient de diffusion binaire, D_{AB} , utilisé dans les calculs de la phase gazeuse est basé sur la corrélation de Fuller et al. ainsi que celle de Takahashi (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001). La corrélation de Fuller et al. permet le calcul du coefficient binaire à basse pression.

$$D_{AB} = \frac{0.00143 \cdot T_r^{1.75}}{P \cdot MM_{AB}^{1/2} \cdot \left((\sum_v)_A^{1/3} + (\sum_v)_B^{1/3} \right)} \quad (3.44)$$

$$\text{où } MM_{AB} = 2 \cdot \left(\frac{1}{MM_A} + \frac{1}{MM_B} \right)^{-1} \quad (3.45)$$

Le terme \sum_v est la somme des contributions de chaque atome des molécules A et B. Ces contributions sont des nombres empiriques déterminés par les auteurs. Comme l'air est principalement constitué d'azote, seul ce dernier composé est considéré dans les calculs. Le tableau 3.5 présente la contribution de certains atomes.

Tableau 3.5

Contribution des différents atomes pour la corrélation de Fuller et al.

Atome ou molécule	Contribution
C	15.9
H	2.31
N ₂	18.5

On peut réécrire la contribution discrète de chaque atome d'un n-alcane en une équation continue applicable pour un n-alcane équivalent comme présenté aux équations 3.46 et 3.47.

$$\sum_v = 15.9 \cdot nbc + 2.31 \cdot (2 \cdot nbc + 2) \quad (3.46)$$

$$\Sigma_v = 1.4629 \cdot MM + 1.6708 \quad (3.47)$$

Dans le cas de l'azote, on utilise directement la valeur présentée dans le tableau 3.5.

Pour inclure l'effet de la pression dans le calcul du coefficient binaire de diffusion, la corrélation de Takahashi est employée.

$$\frac{D_{AB} \cdot P}{(D_{AB} \cdot P)^+} = f(T_r, P_r) \quad (3.48)$$

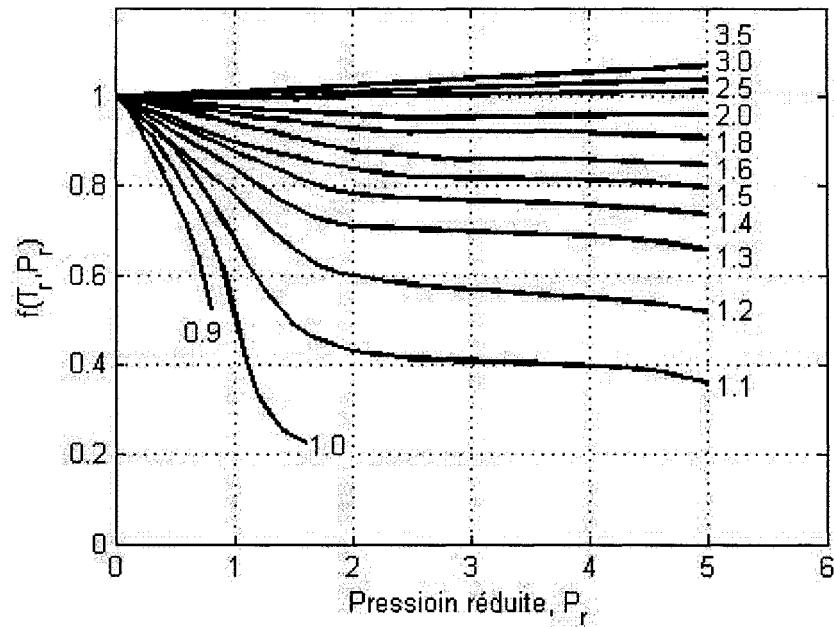
$$\text{où } T_r = \frac{T}{T_{cm}} \quad (3.49)$$

$$\text{et } P_r = \frac{P}{P_{cm}} \quad (3.50)$$

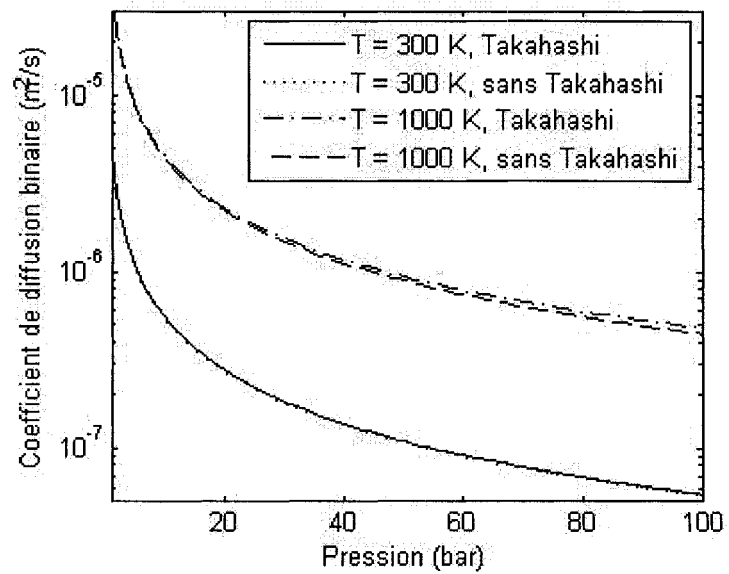
$$\text{avec } T_{cm} = \sum_i X_i \cdot T_{ci} \quad (3.51)$$

$$\text{et } P_{cm} = \sum_i X_i \cdot P_{ci} \quad (3.52)$$

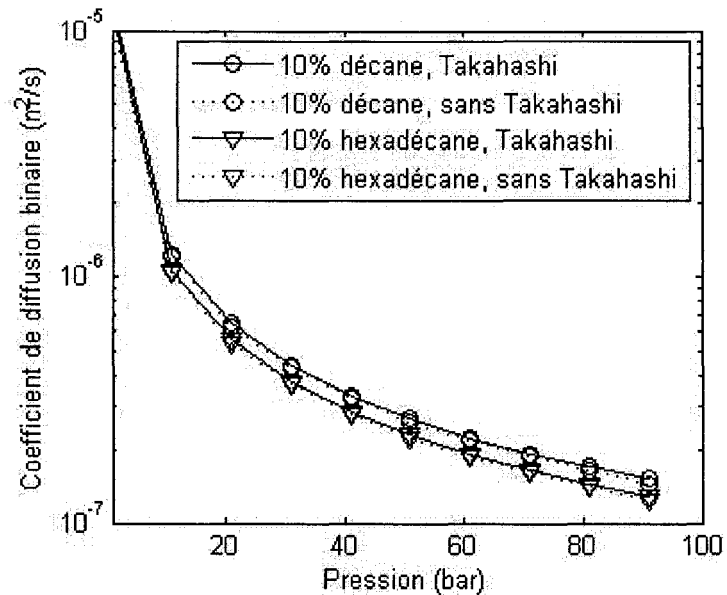
L'exposant + implique que cette valeur est évalué à basse pression comme celle calculée avec la corrélation de Fuller. Pour des pressions basses à moyennes la corrélation de Fuller est applicable car elle tient compte de l'effet de la pression. Cependant, à de plus hautes pressions, il est préférable d'employer un facteur de correction comme celui proposé par Takahashi. Tel qu'observé à l'équation 3.48, ce facteur est fonction de la température et de la pression réduite et ses valeurs possibles sont présentées sur le graphique 3.6. Par la suite, les graphiques 3.7 et 3.8 présentent les coefficients binaires calculés pour différentes conditions.



Graphique 3.6 *Facteur de correction de Takahashi.*



Graphique 3.7 *Coefficient de diffusion binaire calculé avec et sans le facteur de correction de Takahashi entre de l'azote et du n-décane.*



Graphique 3.8 *Coefficient de diffusion binaire calculé avec et sans le facteur de correction de Takahashi à 500 K.*

On peut voir que dans les conditions étudiées au graphique 3.7, l'effet du facteur de correction de Takahashi est négligeable. Cependant, il peut survenir des conditions où l'influence de ce facteur est plus importante. Par exemple, dans le cas d'une gouttelette qui se retrouve dans un environnement déjà riche en vapeur de carburant et que la température locale est relativement faible. On peut voir aux graphiques 3.7 et 3.8 que la température et particulièrement la pression ont un effet sur le coefficient de diffusion. Finalement on peut noter que pour des conditions équivalentes, il y a aussi un effet lorsque l'on change la masse molaire du n-alcane équivalent.

Ceci conclut la section sur les propriétés de la phase gazeuse. La plupart des propriétés sont influencées non seulement par la température mais aussi par la pression, par la présence de vapeur de carburant et par la masse molaire de cette vapeur de carburant. Cependant, l'effet de la pression s'est avéré négligeable dans certain cas. La comparaison entre les valeurs calculées et expérimentales, lorsque disponible, a révélé une erreur absolue très faible, inférieure ou égale à environ 5% (voir tableau 3.4 et l'annexe 2).

3.4 Propriétés du liquide

L'approche pour calculer les propriétés de la phase liquide est différente pour une raison majeure : les liquides sont considérés comme incompressibles. Ces propriétés sont indispensables pour effectuer les calculs mais elles n'influencent pas les nombres adimensionnels qui quantifient l'évaporation sauf un, le nombre de Peclet. Tel qu'observé à l'équation 2.1, le calcul du nombre de Peclet nécessite un coefficient de diffusion binaire de la phase liquide. Un résumé des propriétés présentées dans la section 3.4 ainsi que le nom des auteurs des corrélations se retrouve au tableau 3.6.

Tableau 3.6

Liste des propriétés étudiées pour la phase liquide

Propriété	Auteur(s) des corrélations	Influence
Viscosité	Orrick et Erbar	D_{AB}
Coefficient de diffusion binaire	Wilke et Chang	Pe
Chaleur spécifique	Rowlinson	-
Enthalpie d'évaporation	Watson	-
Masse volumique	-	-

3.4.1 Viscosité

La viscosité du carburant sous forme liquide, μ_{liq} , n'influence pas directement les calculs d'évaporation. Une estimation est toutefois nécessaire pour calculer le coefficient de diffusion binaire présenté à la prochaine section. Orrick et Erbar propose un technique simple à utiliser avec les n-alcanes (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001) :

$$\ln\left(\frac{\mu_{liq}}{\rho_{l,ref} \cdot MM}\right) = A + \frac{B}{T} \quad (3.53)$$

où la masse volumique de référence, $\rho_{1,\text{ref}}$, est celle du liquide à 20°C. On peut introduire le volume molaire calculé avec les polynômes de lissage (voir équation 3.2 et tableau 3.2) de la façon suivante :

$$\rho_{1,\text{ref}} = \frac{MM}{V_{1,\text{ref}}} \quad (3.54)$$

$$\ln(\mu_{\text{liq}} \cdot V_{1,\text{ref}}) = A + \frac{B}{T} \quad (3.55)$$

Pour ce qui est des deux constantes A et B, elles se calculent avec une contribution de groupes d'atomes. Dans le cas d'un n-alcane, elles se calculent comme suit :

$$A = -(6.95 + 0.21 \cdot \text{NBC}) \quad (3.56)$$

$$B = 275 + 99 \cdot \text{NBC} \quad (3.57)$$

Pour des équations continues applicables pour un n-alcane équivalent, on peut réécrire les équations 3.56 et 3.57 comme suit :

$$A = -0.01497 \cdot MM - 6.920 \quad (3.58)$$

$$B = 7.058 \cdot MM + 260.8 \quad (3.59)$$

3.4.2 Coefficient de diffusion binaire

Wilke et Chang proposent, en 1955, une corrélation toujours utilisée de nos jours pour calculer la diffusion binaire $D_{\text{ab,liq}}$ entre deux liquides. Chin, qui propose le modèle DC, utilise cette corrélation pour évaluer le nombre de Peclet. Le coefficient de diffusion se calcule avec l'équation 3.60 (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001).

$$D_{\text{AB,liq}} = \frac{7,4 \times 10^{-8} (\phi \cdot MM_{\text{B}})^{1/2} \cdot T}{\mu_{\text{B}} \cdot V_{\text{A}}^{0,6}} \quad (3.60)$$

Le terme ϕ de l'équation 3.60 est un facteur associatif du solvant B. Dans le cas des substances non associatives comme les n-alcane, ce terme est égale à un et peut donc être

retiré de l'équation. Cette corrélation permet de calculer la diffusion de A dans une grande quantité de B. Ceci revient, dans le cas du modèle DC, à calculer le coefficient de diffusion d'un élément qui veut s'évaporer plus rapidement (A) que le carburant liquide (B). Encore une fois, le modèle DC se base sur les n-alcane pour calculer ce coefficient. On considère que A est un n-alcane qui s'évapore et que B est un n-alcane représentant le liquide. On peut calculer la masse molaire de ces deux n-alcane avec les équations 2.2 et 2.12 pour A et B respectivement. Ceci se résume aux équations 3.60 et 3.61.

$$MM_A = MM_{vap} \quad (3.61)$$

$$MM_B = MM_{liq} \quad (3.62)$$

Il faut donc calculer la viscosité du carburant, μ_B , avec la masse molaire moyenne du liquide telle que présentée dans la section 3.4.1. Le terme V_A est le volume molaire de l'élément A au point normal d'ébullition (pression atmosphérique). Il se calcule avec l'équation suivante :

$$V_A = 0.285 \cdot V_{c,A}^{1.048} \quad (3.63)$$

3.4.3 Chaleur spécifique

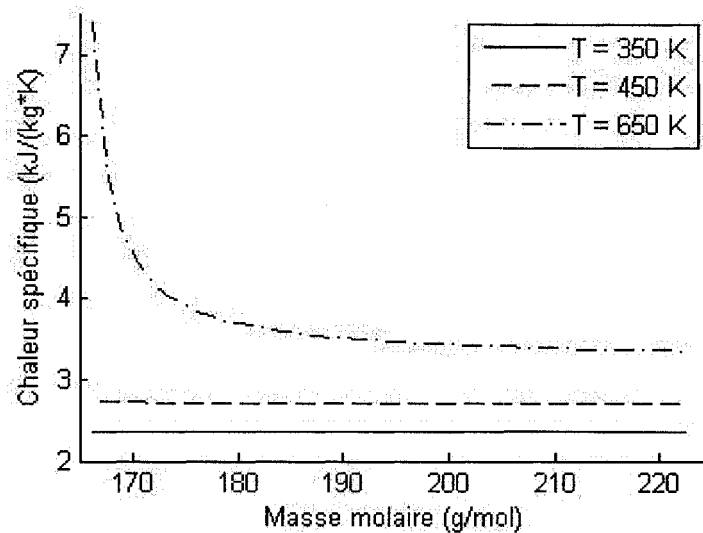
Pour calculer la chaleur spécifique, $C_{p,liq}$, du carburant sous forme liquide, une corrélation proposée par Rowlinson (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001) est utilisée. Cette dernière permet de calculer la différence entre la chaleur spécifique du liquide et celle sous l'état d'un gaz parfait avec l'équation suivante :

$$\frac{C_{p,liq} - C_p^\circ}{R} = 1.586 + \frac{0.49}{1 - T_r} + \omega \left[4.2775 + \frac{6.3 \cdot (1 - T_r)^{1/3}}{T_r} + \frac{0.4355}{1 - T_r} \right] \quad (3.64)$$

où $C_{p,liq}$ est la chaleur spécifique du liquide que l'on désire calculer et C_p° est la chaleur spécifique sous forme de gaz parfait. Il suffit d'avoir une corrélation pour déterminer la chaleur spécifique d'un n-alcane sous forme de gaz parfait pour calculer celle du liquide.

La corrélation de Thinh déjà définie (équations 3.34 à 3.36) permet de calculer la chaleur spécifique d'un n-alcane sous forme de gaz parfait.

On peut voir, au graphique 3.9, la chaleur spécifique calculée avec l'équation 3.64 à différentes températures pour la plage de masses molaires utilisée dans le modèle DC. À noter que dans le cas de la phase liquide, la masse molaire du kérosène et du diesel se situe dans une plage entre le n-dodécane et le n-hexadécane, tel que montré au graphique 2.2. On peut voir au graphique 3.9 qu'à basse température ($T = 350$ et 450 K), la différence de la chaleur spécifique d'un n-alcane à l'autre ne change pas beaucoup. À $T = 650$ K, on voit apparaître une forte différence. Cela est dû au fait que la température critique des éléments plus légers (à plus petite masse molaire) est plus faible. Le n-dodécane (extrémité gauche de la courbe) a une température réduite de 0,99 à 650 K.



Graphique 3.9 *Chaleur spécifique du carburant liquide en fonction de la masse molaire du n-alcane équivalent pour différentes températures.*

3.4.4 Enthalpie d'évaporation

Cette corrélation est basée sur le point normal d'ébullition. Cette dernière se nomme la relation de Watson (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001) :

$$\Delta h_{\text{evap},2} = \Delta h_{\text{evap},1} \left(\frac{1 - T_{r,2}}{1 - T_{r,1}} \right)^n \quad (3.65)$$

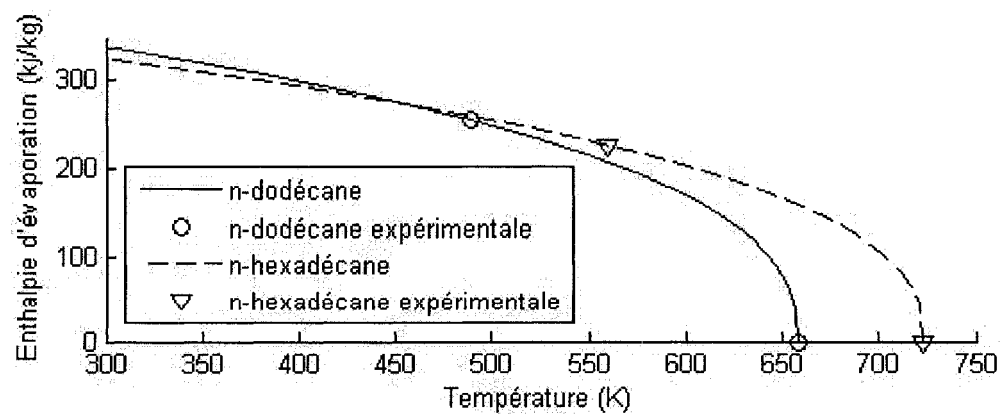
Pour l'exposant n , la proposition de Thodos (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001) est retenue :

$$n = 0.38 \quad (3.66)$$

Les termes $\Delta h_{\text{evap},1}$ et $T_{r,1}$ sont connus et calculés avec les polynômes de lissage (voir équation 3.2 et tableau 3.2) et $T_{r,2}$ est la température réduite à laquelle on désire calculer l'enthalpie d'évaporation. On obtient des kJ/kg avec la relation suivante :

$$\frac{\Delta h_{\text{evap},2} \cdot 1000}{\text{MM}} \quad (3.67)$$

Le graphique 3.10 présente l'enthalpie d'évaporation pour deux n-alcanes en fonction de la température ainsi que des valeurs expérimentales (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001).



Graphique 3.10 *Enthalpie d'évaporation en fonction de la température.*

3.4.5 Masse volumique

La masse volumique est l'une des rares propriétés qui n'est pas basée sur les n-alcanes. La raison est simple, les n-alcanes ont une masse volumique relativement plus faible que le diesel et le kérosène.

Pour le diesel, une corrélation propre au diesel no.2 est utilisée (Siebers, 1998). Les unités sont les Kelvin pour la température du liquide et le résultat est en kg/m^3 .

$$\rho_{\text{liq}} = 844 - 0.9 \cdot (T - 289) \quad (3.68)$$

Pour le kérosène, la corrélation de Hankinson, Brobst et Thomson est utilisée (Reid, Prausnitz et Poling, 1987).

$$\rho_{\text{liq}} = \frac{1}{V_s} \quad (3.69)$$

où V_s est le volume du liquide saturé et est défini par :

$$\frac{V_s}{V^*} = V_r^{(0)} \cdot (1 - \omega \cdot V_r^\delta) \quad (3.70)$$

où les variables en découlant se calculent comme suit :

$$V_r^{(0)} = 1 + a \cdot (1 - T_r)^{1/3} + b \cdot (1 - T_r)^{2/3} + c \cdot (1 - T_r) + d \cdot (1 - T_r)^{4/3} \quad (3.71)$$

$$V_r^\delta = \frac{(e + f \cdot T_r + g \cdot T_r^2 + h \cdot T_r^3)}{(T_r - 1.00001)} \quad (3.72)$$

$$a = -1.52816 \quad (3.73)$$

$$b = 1.43907 \quad (3.74)$$

$$c = -0.8146 \quad (3.75)$$

$$d = 0.190454 \quad (3.76)$$

$$e = -0.296123 \quad (3.77)$$

$$f = 0.386914 \quad (3.78)$$

$$g = -0.0427258 \quad (3.79)$$

$$h = -0.0480645 \quad (3.80)$$

Les variables V^* , ω et T_c doivent être choisies pour le kérosène. Ces dernières sont (Reid, Prausnitz et Poling, 1987) :

$$V^* = 0.6674 \quad (3.81)$$

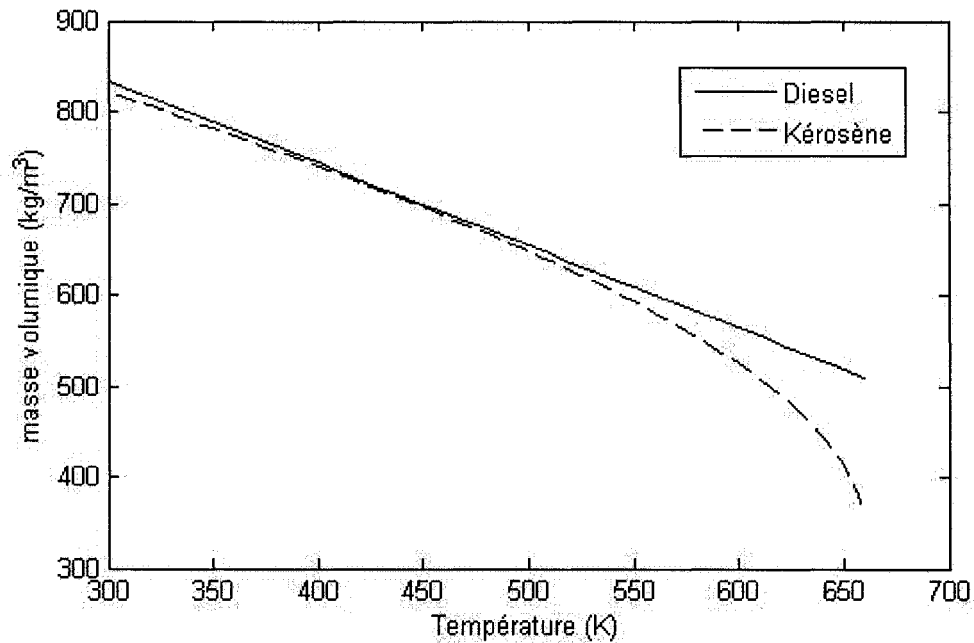
$$\omega = 0.4783 \quad (3.82)$$

$$T_c = 664.30 \quad (3.83)$$

En utilisant des Kelvin pour la température et toutes les valeurs présentées de 3.73 à 3.83, le résultat de l'équation 3.69 est en mol/L. Afin d'obtenir des kg/m^3 , l'équation 3.69 doit être remplacée par :

$$\rho_{\text{liq}} = \frac{1}{V_s} \cdot \text{MM} \quad (3.84)$$

La masse molaire choisie est celle du n-dodécane (voir annexe 1) car ce n-alcane se rapproche du kérosène (Ghassemi, Baek et Khan, 2006). Le graphique 3.11 présente la masse volumique du diesel et du kérosène calculée avec les équations 3.68 et 3.84 pour différentes températures.



Graphique 3.11 *Masse volumique du diesel et du kérosène en fonction de la température.*

3.5 Équilibre liquide/vapeur

Cette section présente des équations pour évaluer une condition frontière. Cette dernière est la fraction molaire de carburant dans la phase vapeur à la surface de la gouttelette.

La façon la plus répandue (Abramzon et Sirignano, 1989 ; Incropera et DeWitt, 2002 ; Prommersberger, Maider et Wittig, 1998) se nomme la loi de Raoult et elle est définie comme suit :

$$P_{\text{vap},i} \cdot X_i^{\text{liq}} = P_{\infty} \cdot X_i^{\text{vap}} \quad (3.85)$$

où P_{vap} représente la pression de vapeur. Avec l'hypothèse que la fraction molaire du carburant dans la phase liquide est égale à un, on réduit l'équation à :

$$X_i^{\text{vap}} = \frac{P_{\text{vap},i}}{P_{\infty}} \quad (3.86)$$

La loi de Raoult n'est plus applicable lorsque la pression ambiante devient importante (Burger et al., 2003 ; Zhu et Aggarwal, 2000). Il devient préférable d'utiliser une approche plus générale qui est basée sur l'équilibre thermodynamique de l'interface vapeur/liquide pour un mélange. Pour chaque substance i dans un mélange, l'équilibre thermodynamique est atteint lorsque la fugacité de cette substance dans la phase vapeur (f_i^{vap}) est égale à la fugacité de cette même substance dans la phase liquide (f_i^{liq}).

$$f_i^{\text{liq}} = f_i^{\text{vap}} \quad (3.87)$$

Afin d'arriver à calculer cette condition, il est pratique d'introduire le coefficient de fugacité ϕ qui est défini comme suit :

$$\phi_i = \frac{f_i}{X_i \cdot P_\infty} \quad (3.88)$$

Ce coefficient peut être utilisé aussi bien pour la phase liquide que la phase gazeuse. En introduisant l'équation 3.88 dans 3.87, on obtient une forme plus générale de l'équation 3.85.

$$\phi_i^{\text{liq}} \cdot X_i^{\text{liq}} = \phi_i^{\text{vap}} \cdot X_i^{\text{vap}} \quad (3.89)$$

Cette dernière égalité permet de calculer l'équilibre d'un mélange lorsqu'il est possible de calculer le coefficient de fugacité. Ce dernier peut être calculé avec une équation d'état analytique permettant de déterminer les propriétés volumétriques d'une substance et d'un mélange. Zhu (Zhu et Aggarwal, 2000) présente une analyse sur cette question dans le cas d'une gouttelette qui s'évapore à haute pression. Il affirme que deux équations d'état de type cubiques sont convenables pour le calcul de l'équilibre. L'équation utilisée dans le présent projet et recommandée par Zhu est celle de Redlich et Kwong avec l'amélioration apporté par Soave (Reid, Prausnitz et Poling, 1987).

$$P = \frac{R \cdot T}{V - b} - \frac{a}{V^2 + b \cdot V} \quad (3.90)$$

$$\text{où } a = \frac{0.42748 \cdot R^2 \cdot T_c^2}{P_c} \left[1 + \left(0.48 + 1.574 \cdot \omega - 0.176 \cdot \omega^2 \right) \left(1 - T_r^{1/2} \right) \right]^{1/2} \quad (3.91)$$

$$\text{et } b = \frac{0.08664 \cdot R \cdot T_c}{P_c} \quad (3.92)$$

Cette dernière équation est souvent nommée SRK ou RKS selon les livres. Il est donc possible de calculer le coefficient de fugacité basé sur l'équation d'état SRK comme suit (Reid, Prausnitz et Poling, 1987):

$$\ln \phi_i = \frac{b_i}{b} (Z-1) - \ln(Z-B) + \frac{A}{B} \left(\frac{b_i}{b} - \delta_i \right) \cdot \ln \left(\frac{Z+B}{Z} \right) \quad (3.93)$$

où les variables Z , A , B , b_i/b et δ_i sont définies comme suit :

$$Z = \frac{P \cdot V_m}{R \cdot T} \quad (3.94)$$

$$A = \frac{a_m \cdot P}{R^2 \cdot T^2} \quad (3.95)$$

$$B = \frac{b_m \cdot P}{R \cdot T} \quad (3.96)$$

$$\frac{b_i}{b} = \frac{T_{ci}/P_{ci}}{\sum_j X_j \cdot T_{cj}/P_{cj}} \quad (3.97)$$

$$\delta_i = \frac{2 \cdot a_i^{1/2}}{a_m} \sum_j X_j \cdot a_j^{1/2} \cdot (1 - k_{ij}) \quad (3.98)$$

$$a_m = \sum_i \sum_j X_i \cdot X_j \cdot (a_i \cdot a_j)^{1/2} (1 - k_{ij}) \quad (3.99)$$

$$b_m = \sum_i X_i \cdot b_i \quad (3.100)$$

Le terme V_m est le volume molaire pour le mélange. On doit le calculer pour la phase liquide et pour la phase gazeuse à l'aide de l'équation 3.90. Le coefficient k_{ij} est un coefficient binaire empirique d'influence entre les substances i et j . Il est généralement

près de zéro. Le tableau 3.7 résume les différents coefficients k_{ij} disponibles dans la littérature (Knapp, 1982) et appropriés au présent projet.

Tableau 3.7

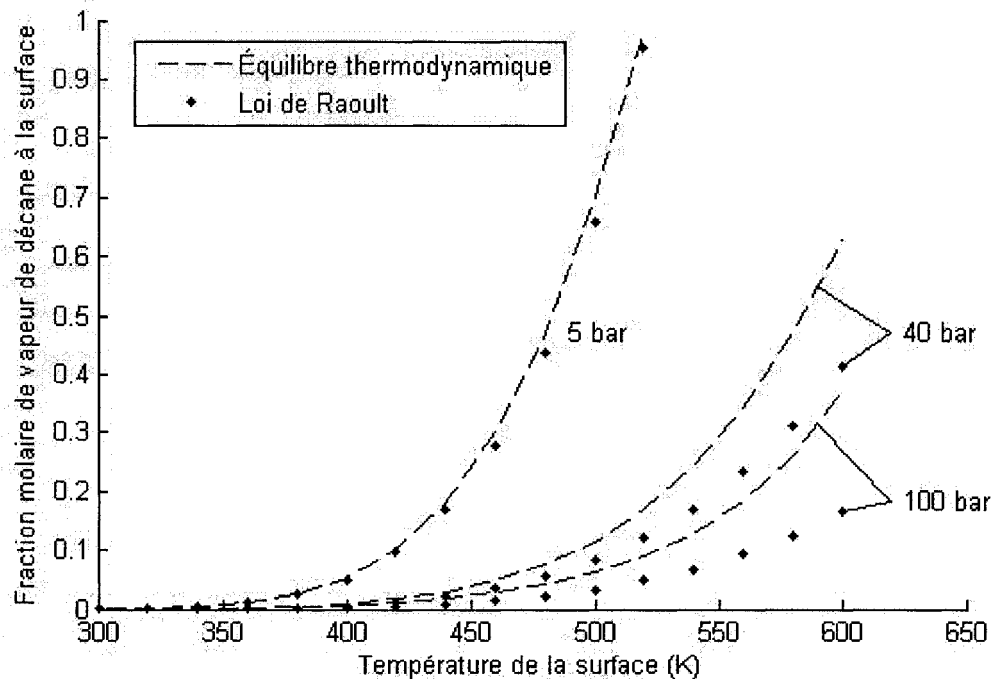
Coefficient binaire empirique

n-alcane	Deuxième substance	K_{ij}
Éthane	Azote	0,0407
Propane	Azote	0,0763
butane	Azote	0,07
Pentane	Azote	0,0878
Hexane	Azote	0,1496
Heptane	Azote	0,1422
Décane	Azote	0,1033

Une première conséquence des données recueillies est que l'équilibre peut seulement être calculé avec de l'azote (Zhu et Aggarwal, 2000). Deuxièmement, aucune valeur de k_{ij} n'est disponible pour les n-alcane de C11 à C16. À défaut d'avoir cette information disponible dans la littérature, la valeur du décane a été utilisée car il est le n-alcane le plus près de ces derniers.

Il est donc possible de calculer les fractions molaires dans la phase gazeuse et dans la phase liquide à l'aide des équations 3.89 à 3.100. Il est à noter que ces équations sont hautement non linéaires et nécessitent des résolutions par méthodes numériques. Elles sont couplées entre elles par l'équation d'état pour le mélange et par le fait que la somme des fractions molaires dans chacune des phases doit donner un. La solution doit préférablement être calculée séparément et être tabulée pour ne pas alourdir les calculs d'évaporation de gouttelette. Les résultats sont tabulés pour plusieurs températures et

pressions dans des fichiers textes pour chaque n-alcane de C10 à C16. Il est donc possible de déterminer la fraction molaire de vapeur de carburant à la surface de la gouttelette selon la température, la pression et la masse molaire d'un n-alcane équivalent en interpolant les valeurs de ces tables. Le graphique 3.12 présente les résultats des calculs de l'équilibre vapeur/liquide pour le décane. Le graphique 3.12 permet de comprendre visuellement pourquoi il est préférable d'utiliser l'équilibre thermodynamique pour calculer la fraction molaire de vapeur à la surface d'un liquide à haute pression. À basse pression (5 bar), on voit que les courbes se confondent. On peut donc voir la validité de la loi de Raoult. On voit aussi que la fraction molaire devient égale à un vers 520 K. Ceci représente la température d'ébullition à une pression de 5 bar pour le décane. À ce point la fugacité du liquide ne peut plus être égalée par une augmentation de la fraction molaire dans la phase vapeur car elle est à son maximum.



Graphique 3.12 Fraction molaire de vapeur de décane à la surface d'une gouttelette selon la température de la surface pour différentes pressions.

À plus haute pression (40 et 100 bar) les deux courbes représentant chaque modèle ne se confondent plus du tout. L'équilibre thermodynamique à 100 bar prévoit pratiquement le double de la fraction molaire calculée par la loi de Raoult. Il n'est donc plus recommandé d'utiliser l'équilibre thermodynamique pour calculer cette condition frontière dans le cas d'une gouttelette s'évaporant à haute pression. Les pressions rencontrées lors de l'injection de carburant dans un moteur diesel sont généralement beaucoup plus élevées que 40 bar.

3.6 Conclusion du chapitre

Ceci conclut le chapitre sur l'évaluation des propriétés. Tel que constaté tout au long du chapitre, les corrélations sont basées sur certaines propriétés de référence. Des polynômes de lissage ont été présentés pour permettre d'évaluer ces propriétés pour un n-alcane équivalent qui à une masse molaire comprise entre celle du décane et celle de l'hexadécane. Les propriétés de la phase vapeur sont évaluées avec plusieurs corrélations qui permettent d'inclure l'effet de la température, de la pression et de la fraction molaire d'un n-alcane équivalent. Les propriétés de la phase liquide sont aussi évaluées mais seulement en fonction de la température. Finalement, une alternative à la loi de Raoult est présentée pour calculer la fraction molaire de vapeur de carburant à la surface de la gouttelette. Cette méthode est adaptée aux pressions d'opération typique des moteurs diesel durant l'injection. Comme cette méthode est difficile à calculer, des tables pour différentes températures, pressions et n-alcane ont été précalculées afin d'alléger les calculs qui sont présentés dans les prochains chapitres. Dans le prochain chapitre, le modèle DC est utilisé avec les corrélations pour calculer les propriétés présentées dans ce chapitre et est validé à l'aide de résultats expérimentaux de gouttelettes qui s'évaporent.

CHAPITRE 4

Validation du modèle DC

4.1 Introduction

Ce chapitre décrit la procédure de calcul programmée pour valider le modèle DC. Il décrit donc l'ordre avec lequel toutes les équations et corrélations présentées au chapitre 2 et 3 sont utilisées pour calculer l'évolution de divers paramètres d'une gouttelette de carburant s'évaporant dans un environnement défini. Une validation est faite pour, premièrement, vérifier si le modèle DC est bien programmé et, deuxièmement, vérifier si le modèle DC est capable de reproduire correctement les données expérimentales d'une gouttelette de carburant qui s'évapore. En première partie, la procédure générale de calcul est présentée. En deuxième partie, cette procédure est utilisée avec diverses corrélations proposées dans la littérature pour évaluer les nombres de Nusselt (Nu) et de Sherwood (Sh). Ces différentes corrélations sont comparées afin de déterminer laquelle reproduit le plus fidèlement les données expérimentales. En troisième partie, un facteur de correction est proposé pour améliorer l'exactitude des résultats calculés. Finalement, une comparaison avec des données expérimentales pour une gouttelette avec de la convection naturelle est présentée afin d'offrir une plus grande validité au facteur de correction proposé.

4.2 Procédure générale de calcul

Les calculs entourant l'évaporation d'une gouttelette dans un environnement quelconque sont influencés par une multitude de paramètres. Que ce soit les conditions ambiantes de l'air, les conditions initiales de la gouttelette ou la méthode d'évaluation des propriétés et des nombres adimensionnels.

La figure 4.1 présente sous forme de diagramme la procédure de calcul utilisée pour valider le modèle DC et déterminer les meilleures corrélations pour définir les nombres adimensionnels Nu et Sh. Le diagramme représente les grandes lignes des programmes utilisés pour effectuer les calculs. On peut y voir les principales étapes sous forme de blocs numérotés.

4.2.1 Conditions initiales et ambiantes (bloc 1 et 2)

Les conditions initiales sont généralement fournies dans la description de l'expérimentation. Cependant il faut noter que la liste des conditions fournies n'est pas toujours exhaustive. La fraction massique de vapeur de carburant ambiante n'est pas utilisée dans les étapes de validation car elle est toujours supposée nulle lors des expérimentations. Elle est donc toujours égale à zéro dans ce chapitre. Il est à noter que dans le cas d'une injection où plusieurs gouttelettes s'évaporent la fois et où plusieurs gouttelettes ont déjà laissé une quantité de vapeur de carburant lors de leurs passages, ce paramètre peut prendre des valeurs supérieures à zéro.

4.2.2 Solveur numérique (bloc 6)

Le solveur numérique utilisé pour calculer l'évolution de la gouttelette est un solveur disponible dans la librairie de fonction de Matlab 7. Il s'agit du ode45 qui est recommandé comme solveur à utiliser en premier lieu (MathWorks, 2005). Comme le but n'est pas de déterminer le meilleur solveur, ce dernier a été retenu. Il est basé sur un calcul explicite de type Runge-Kutta. Seules deux variables sont intégrées à l'aide du solveur. Il s'agit de la masse et de la température de la gouttelette. Les autres paramètres sont calculés à chaque pas de temps en fonction de la masse, de la température et des conditions ambiantes.

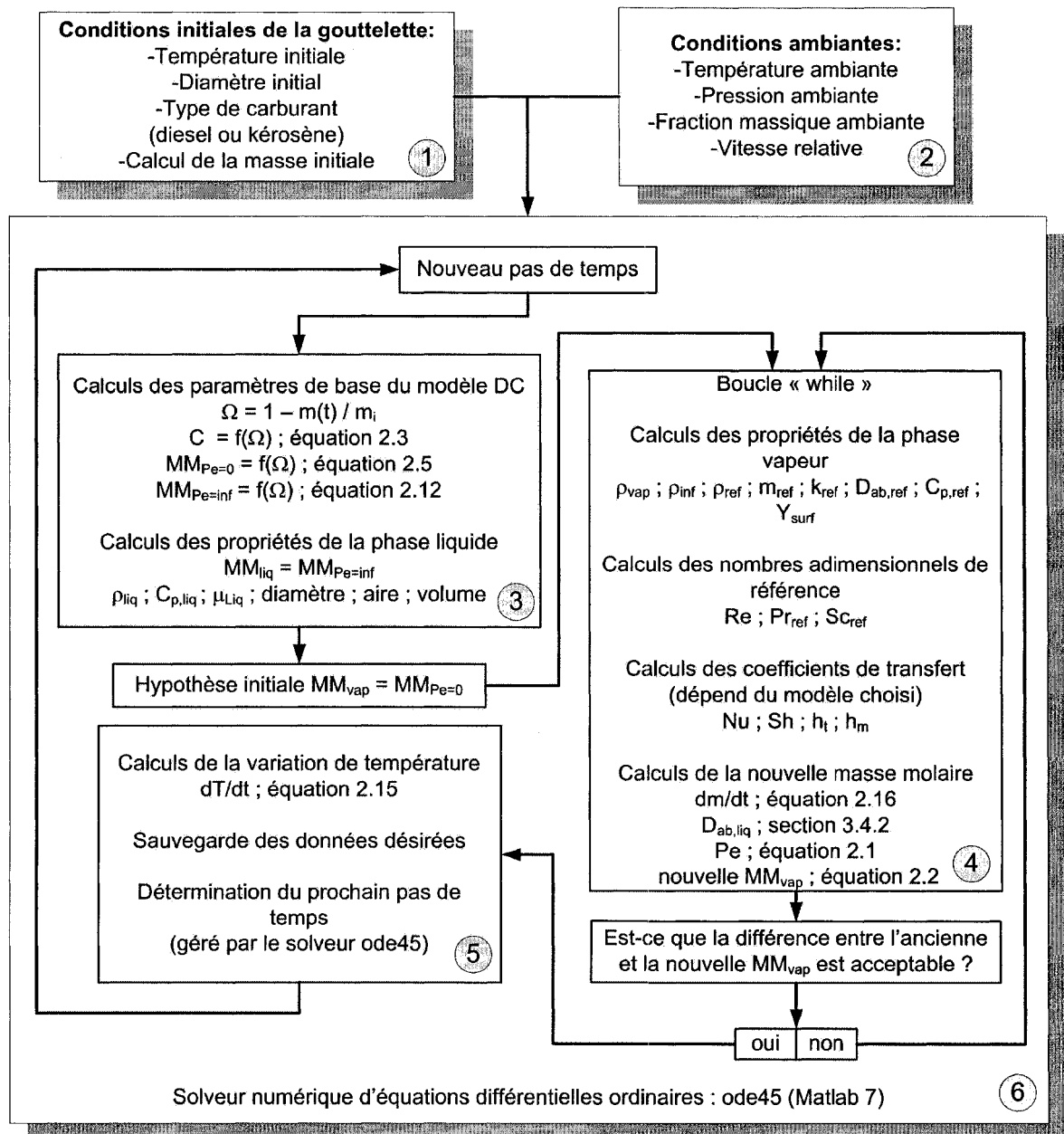


Figure 4.1 Procédure générale de calcul dans l'intégration du modèle DC sur MatLab 7.

4.2.3 Calculs des paramètres de base du modèle DC (bloc 3)

Comme expliqué au chapitre 2, le modèle DC est simple à implanter au niveau des calculs touchant la gouttelette. Il suffit de garder en mémoire la masse initiale de cette dernière pour pouvoir calculer, à chaque pas de temps, la fraction massique évaporée, Ω , telle que montrée à l'équation 2.4. Par la suite on peut directement calculer la masse molaire du n-alcane équivalent de la phase liquide et en calculer les propriétés. Cependant, pour ce qui est du calcul de la masse molaire de la phase vapeur, il est nécessaire d'évaluer le nombre de Peclet (Pe) qui dépend du débit massique. Une boucle de type « while » (bloc 4) est donc utilisée pour déterminer simultanément le nombre de Peclet et le débit massique.

4.2.4 Boucle pour déterminer le débit massique (bloc 4)

L'élément clé à déterminer pour passer au prochain pas de temps est le débit massique à la surface de la gouttelette. Cependant, le débit nécessite indirectement une évaluation du nombre de Pe qui est fonction du débit massique. Une boucle d'itération est donc nécessaire afin de faire converger la solution. L'hypothèse initiale est que la masse molaire est la plus faible possible ($Pe \rightarrow 0$) puis dépendamment du nombre de Pe calculé au bout de la chaîne de calculs, la masse molaire est réajustée avec un facteur de relaxation pour éviter des instabilités. Ce dernier a été déterminé à 0,8 pour allier performance et stabilité. Avec ce facteur de relaxation, il ne suffit que de quelques itérations pour déterminer la masse molaire du n-alcane équivalent avec une erreur inférieure à 0,001 g/mol. Avec cette précision, l'influence du changement des propriétés est généralement très faible et est donc utilisé comme critère de convergence.

4.2.5 Calculs des nombres adimensionnels de référence (bloc 4)

Trois nombres adimensionnels de référence doivent être évalués pour calculer les nombres adimensionnels Nu et Sh. Ces trois derniers sont Re, Pr et Sc. Ils sont calculés avec les équations suivantes :

$$\text{Re} = \frac{d_g \cdot \rho_\infty \cdot V_\infty}{\mu_{\text{ref}}} \quad (4.1)$$

$$\text{Pr}_{\text{ref}} = \frac{C_{p,\text{ref}} \cdot \mu_{\text{ref}}}{k_{\text{ref}}} \quad (4.2)$$

$$\text{Sc}_{\text{ref}} = \frac{\mu_{\text{ref}}}{\rho_{\text{ref}} \cdot D_{\text{AB,ref}}} \quad (4.3)$$

Les indices « ref » signifient que ces propriétés sont évaluées avec les corrélations présentées au chapitre 3 à l'état de référence défini à la section 3.3.1. Seule la masse volumique, ρ_∞ , dans l'évaluation du nombre de Reynolds (équation 4.1) est évaluée selon les conditions ambiantes (Yuen et Chen, 1978). Cette façon d'évaluer les nombres adimensionnels de référence est couramment employée (Abramzon et Sirignano, 1989 ; Burger et al., 2003 ; Prommersberger, Mairer et Wittig, 1998).

4.3 Corrélations étudiées

La présente section introduit trois différents groupes de corrélations pour évaluer les nombres de Nu et de Sh. Le but est de déterminer lequel reproduit avec le plus d'exactitude les données expérimentales. Les trois groupes de corrélations sont énumérés ci-dessous.

- Ranz & Marshall
- Le modèle « film de gaz »
- Chiang et al.

Les deux premiers ont été étudiés à maintes reprises et sont encore relativement populaires. Le dernier moins populaire se retrouve dans une revue de la littérature (Sirignano, 1993). Chacun de ces trois groupes de corrélations emploiera une méthode légèrement différente dans l'évaluation du débit massique et de la variation de la température pour des raisons qui seront présentées plus tard.

4.3.1 Ranz & Marshall

Les corrélations de Ranz et Marshall sont les mêmes que celles présentées au chapitre 1 et se résument à :

$$\text{Sh} = 2 + 0.60 \cdot \text{Re}^{1/2} \cdot \text{Sc}_{\text{ref}}^{1/3} \quad (4.4)$$

$$\text{Nu} = 2 + 0.60 \cdot \text{Re}^{1/2} \cdot \text{Pr}_{\text{ref}}^{1/3} \quad (4.5)$$

Avec le résultat de ces deux équations, on peut calculer les coefficients de transfert de masse, h_m , et de chaleur, h_t , à l'aide des équations 4.6 et 4.7 respectivement.

$$h_m = \frac{\text{Sh} \cdot D_{\text{AB,ref}}}{d_g} \quad (4.6)$$

$$h_t = \frac{\text{Nu} \cdot k_{\text{ref}}}{d_g} \quad (4.7)$$

Pour calculer le débit massique, on utilise ici l'approche molaire. Ce choix est fait car cette procédure est employée par la phase discrète de Fluent 6.2. Le calcul des concentrations du milieu ambiant et à la surface de la gouttelette s'effectue avec les deux équations suivantes :

$$C_s = \frac{P_{\text{sat}}}{R \cdot T_s} \quad (4.8)$$

$$C_\infty = \frac{P_\infty}{R \cdot T_\infty} \quad (4.9)$$

où C_s est la concentration de carburant en phase vapeur à la surface de la gouttelette en kmol/m^3 , P_{sat} est la pression de saturation du carburant, R est la constante universelle des gaz et T_s est la température de la surface, qui dans le cas présent, est la même que la température de la gouttelette. C_∞ est la concentration dans le milieu ambiant, X_{vap} est la fraction molaire de vapeur du milieu ambiant, P_∞ est la pression ambiante et T_∞ est la température ambiante. Finalement, le débit massique est calculé avec l'équation suivante :

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_s = h_m \cdot A_g \cdot (C_s - C_\infty) \cdot MM_{\text{vap}} \quad (4.10)$$

Pour le calcul de la variation de la température, l'équation 2.15 est toujours utilisée.

4.3.2 Le modèle « film de gaz »

Le modèle « film de gaz » peut être vu comme un ajout aux corrélations classiques de Ranz & Marshall (équation 4.4 et 4.5) ou celles de Frösseling (équations 1.1 et 1.2). Bien que ce modèle soit très répandu (Abramzon et Sirignano, 1989 ; Burger et al., 2003 ; Chin, 1994) on retrouve généralement de légères nuances au niveau des calculs d'une publication à l'autre. Le modèle utilisé ici est tiré d'un article publié par Burger (Burger et al., 2003) et se résume comme suit :

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_s = -\pi \cdot d_g \cdot \rho_{\text{ref}} \cdot D_{\text{AB,ref}} \cdot \text{Sh} \cdot \ln(1 + B_M) \quad (4.11)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-\dot{m}_s}{m_g \cdot C_{p,\text{liq}}} \left(\frac{C_{p,\text{vap}} (T_s - T_\infty)}{B_T} - \Delta h_{\text{evap}} \right) \quad (4.12)$$

$$B_M = \frac{Y_s - Y_\infty}{1 - Y_s} \quad (4.13)$$

$$B_T = (1 + B_M)^x - 1 \quad (4.14)$$

$$x = \frac{C_{p,\text{vap}} \text{Sh}}{C_{p,\text{ref}} \text{Nu Le}} \quad (4.15)$$

$$\text{Sh} = 2 + 0.552 \cdot \text{Re}^{1/2} \cdot \text{Sc}_{\text{ref}}^{1/3} \quad (4.16)$$

$$\text{Nu} = 2 + 0.552 \cdot \text{Re}^{1/2} \cdot \text{Pr}_{\text{ref}}^{1/3} \quad (4.17)$$

où toutes les variables avec l'indice « ref » sont évaluées à l'état de référence. La variable $C_{p,\text{vap}}$ est la chaleur spécifique de la vapeur de carburant évaluée à la température de référence. On peut voir qu'avec les équations 4.16 et 4.17 que Burger utilise les corrélations de Frösseling au lieu de Ranz & Marshall.

4.3.3 Chiang et al.

Les corrélations de Chiang et al. ont été obtenues à l'aide d'une résolution numérique de l'écoulement avec les équations de Navier-Stokes sur une grande plage de conditions (Sirignano, 1993). Les résultats se résument comme suit :

$$\text{Nu} = 1.275 \cdot (1 + B_T)^{-0.678} \cdot \text{Re}^{0.438} \cdot \text{Pr}_{\text{ref}}^{0.619} \quad (4.18)$$

$$\text{Sh} = 1.224 \cdot (1 + B_M)^{-0.568} \cdot \text{Re}^{0.385} \cdot \text{Sc}_{\text{ref}}^{0.492} \quad (4.19)$$

où les nombres adimensionnels sont évalués avec les propriétés de références. Cependant, Chiang précise que l'état de référence à utiliser est celui du film (à ne pas confondre avec le modèle « film de gaz »). Ceci revient à utiliser les équations suivantes pour définir l'état de référence.

$$T_{\text{ref}} = T_s + \frac{1}{2}(T_\infty - T_s) \quad (4.20)$$

$$Y_{\text{ref}} = Y_s + \frac{1}{2}(Y_\infty - Y_s) \quad (4.21)$$

Les variables B_M et B_T sont évaluées avec les équations 1.14 et 1.15. Finalement, la variation de la masse et la variation de la température de la gouttelette sont calculées avec les équations 2.16 et 2.15 respectivement.

4.4 Validation numérique

Cette section comprend une validation numérique afin de déterminer si les équations du modèle DC (chapitre 2) et les corrélations des propriétés (chapitre 3) sont bien programmées. Pour ce faire, les résultats de calculs sont comparés à des résultats numériques déjà publiés (Burger et al., 2003). Comme les résultats publiés sont calculés avec les équations du modèle film de gaz, seul ce dernier est comparé. Ces résultats sont basés sur l'évaporation d'une gouttelette en apesanteur. Les conditions ambiantes et initiales sont résumées au tableau 4.1.

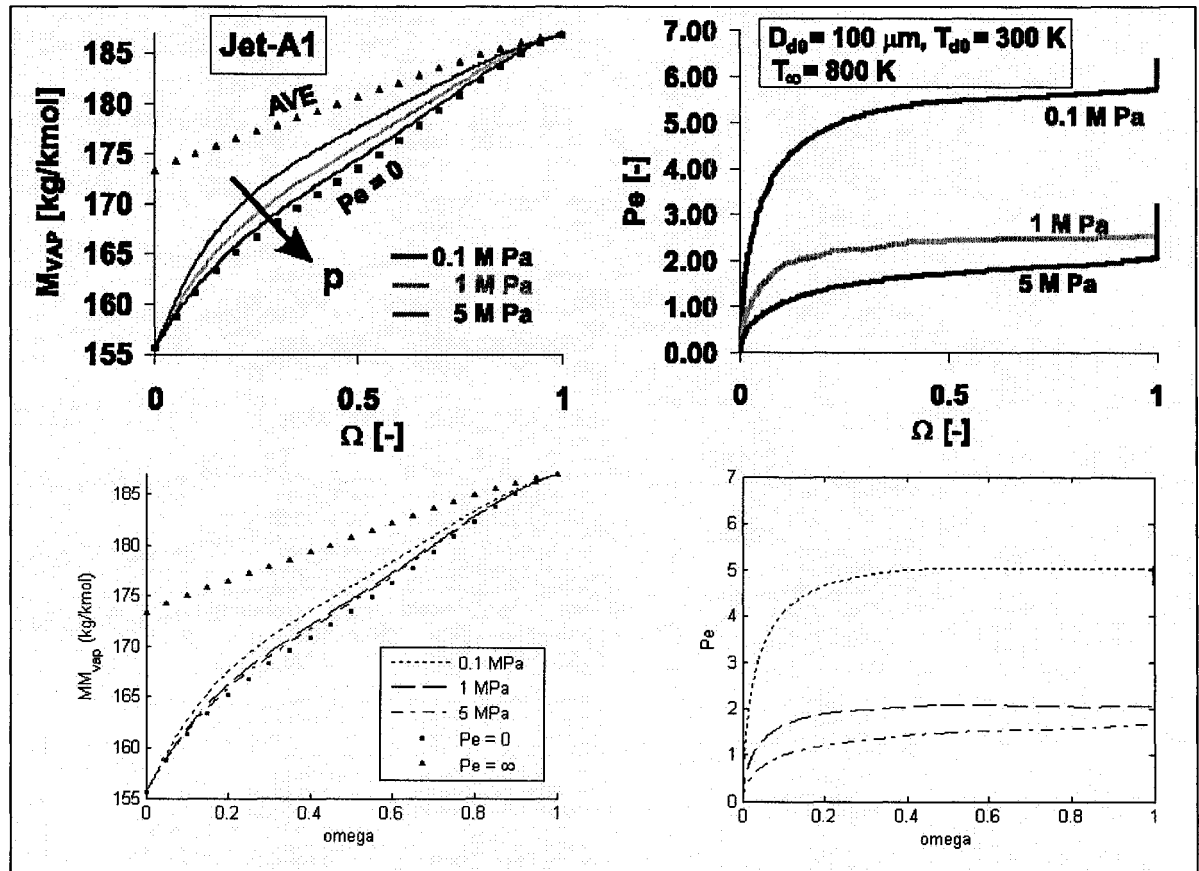
Tableau 4.1

Conditions ambiantes et initiales de la validation numérique

Conditions	Cas 1	Cas 2	Cas 3
Température ambiante	800 K	800 K	800 K
Pression ambiante	0,1 MPa	1 MPa	5 MPa
Vitesse du vent relatif	0 m/s	0 m/s	0 m/s
Température initiale de la gouttelette	300 K	300 K	300 K
Diamètre initial de la gouttelette	100 μm	100 μm	100 μm

À noter que seule la pression change d'un cas à l'autre. Le graphique 4.1 présente les calculs de l'évolution de la masse molaire de la phase vapeur et du nombre de Peclet publié (Burger et al., 2003) et ceux obtenus avec la procédure de calcul. La masse molaire de la vapeur et le nombre de Pe sont deux paramètres importants du modèle DC et ils sont essentiels à l'interprétation des résultats qui sera fait au chapitre 5. Ces deux paramètres sont à la base de l'effet multicomposants comme il sera discuté dans les sections à venir. On peut observer au graphique 4.1 que les résultats calculés sont en concordance avec ceux publiés. Il a une légère différence qui peut être due à une évaluation différente de certaines

propriétés. Pour la masse molaire de la vapeur de carburant, l'erreur est toujours inférieure à 4%. Pour le nombre de Pe , l'erreur moyenne est de 10% pour la majorité de la vie des gouttelettes. L'erreur atteint un niveau plus important vers la fin de la vie des gouttelettes ($\Omega = 0.8-1.0$) de l'ordre de 15% à 20%. Notons que ces résultats sont présentés pour valider la programmation du modèle DC. Les résultats retrouvés au graphique 4.1 ne sont pas des résultats expérimentaux mais bien des résolutions numériques. La prochaine section présente une validation face à des résultats expérimentaux.



Graphique 4.1 *Comparaison entre les résultats obtenus par calcul (bas) et les résultats publiés (haut).*

(Tiré de Burger et al., 2003)

4.5 Validation avec résultats expérimentaux

Les trois modèles présentés dans la section 4.3 vont maintenant être comparés à des résultats expérimentaux. Il n'existe pas une très grande quantité et qualité de données expérimentales sur l'évaporation de gouttelettes de carburant grand marché comme le kérosène et le diesel. Habituellement, pour éliminer l'effet multicomposants, les expérimentations sont faites avec des substances pures. Toutefois, il existe quelques études avec des gouttelettes de carburant grand marché.

4.5.1 Gouttelette de kérosène avec vent relatif

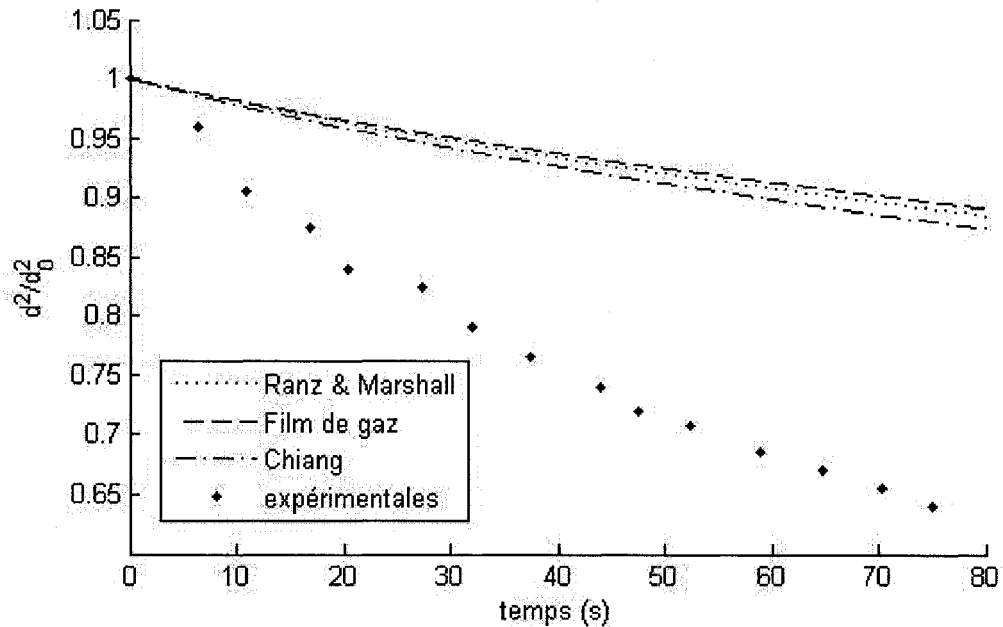
Cette expérimentation est assez loin des conditions moteur, mais elle est utilisée comme outil de comparaison car très rares sont les études de gouttelette de carburant grand marché avec un vent relatif entre la gouttelette et l'air ambiant. Il s'agit d'une expérimentation faite à la pression atmosphérique et à une température de 21°C (Runge et Teske, 1998). Les différentes conditions ambiantes et initiales utilisées pour faire les calculs sont résumées au tableau 4.2.

Tableau 4.2

Conditions ambiantes et initiales
de l'expérimentation 1

Conditions	valeur
Température ambiante	294 K
Pression ambiante	1 atm
Vitesse du vent relatif	3 m/s
Température initiale de la gouttelette	294 K
Diamètre initial de la gouttelette	639 μm

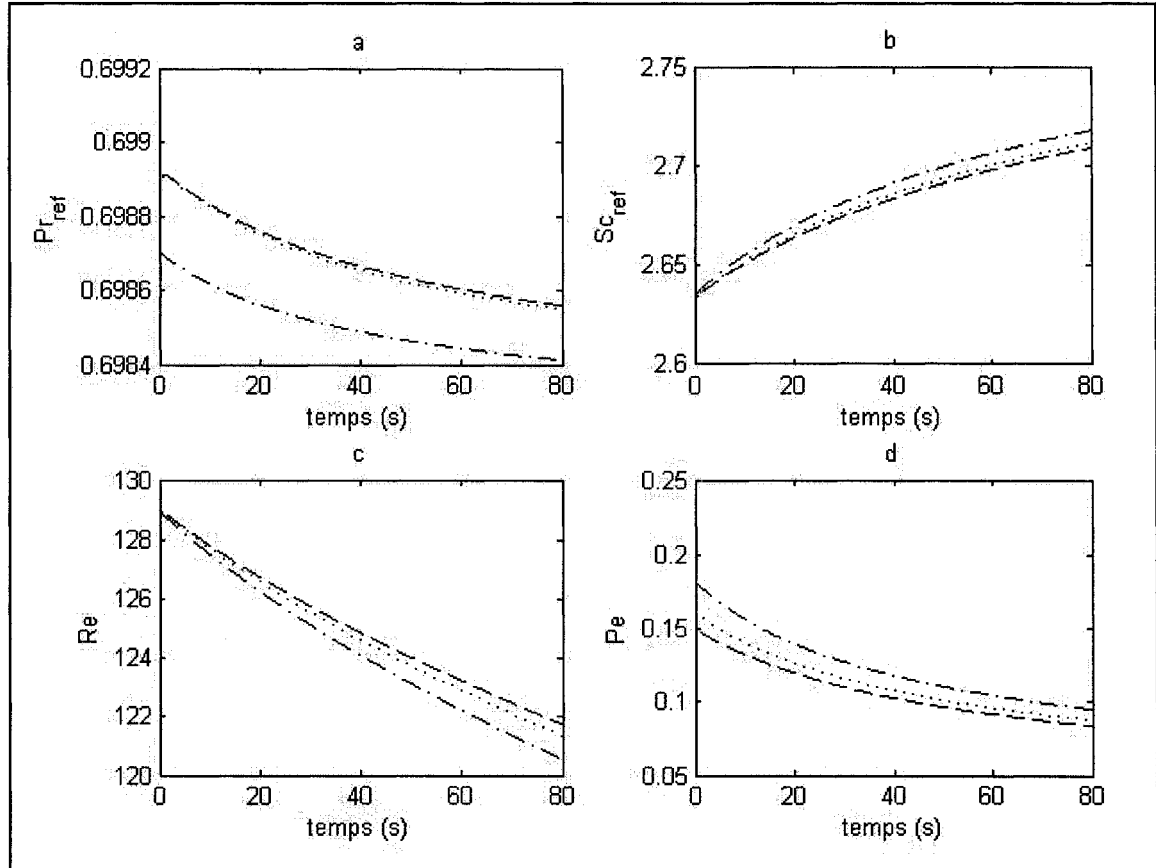
Une comparaison entre les résultats calculés et les résultats expérimentaux peut être vue au graphique 4.2.



Graphique 4.2 *Comparaison entre le diamètre obtenu par calculs et le diamètre mesuré expérimentalement par (Runge et Teske, 1998).*

Les résultats du graphique 4.2 illustre la difficulté des modèles à reproduire la réalité des résultats expérimentaux. Notons que peu importe la méthode employée pour déterminer le débit massique et la variation de la température, les trois modèles produisent des résultats très semblables. Ceci démontre premièrement l'équivalence entre ces trois groupes de corrélations et deuxièmement, que l'écart entre les résultats expérimentaux et les résultats calculés ne peut pas être attribué à la différence entre les corrélations employées. Le graphique 4.3 présente la valeur de quatre nombres adimensionnels durant l'évaporation. À noter que la légende est identique à celle du graphique 4.2. On peut voir au graphique 4.3 que les nombres ne varient pas beaucoup sauf le nombre de Reynolds. Cette situation est normale car il est proportionnel au diamètre qui diminue constamment.

On peut aussi voir que les nombres sont pratiquement identiques d'un modèle à l'autre. La plus grande différence est entre le modèle de Chiang et les deux autres. La raison est simple. Dans la procédure de Chiang, l'état de référence n'est pas tout à fait le même.



Graphique 4.3 *Évolution de différents nombres adimensionnels lors de l'évaporation de la gouttelette (..... R&M ; --- Film ; ----- Chiang).*

4.5.2 Facteur de correction

Suite à plusieurs tentatives pour diminuer l'écart entre les résultats expérimentaux et les résultats calculés tel qu'examinée au graphique 4.2, un facteur de correction simple a été déterminé. Au graphique 4.2, les trois modèles étudiés donnent relativement le même écart soit une gouttelette s'évaporant trop lentement. Ceci conduit à l'hypothèse que le

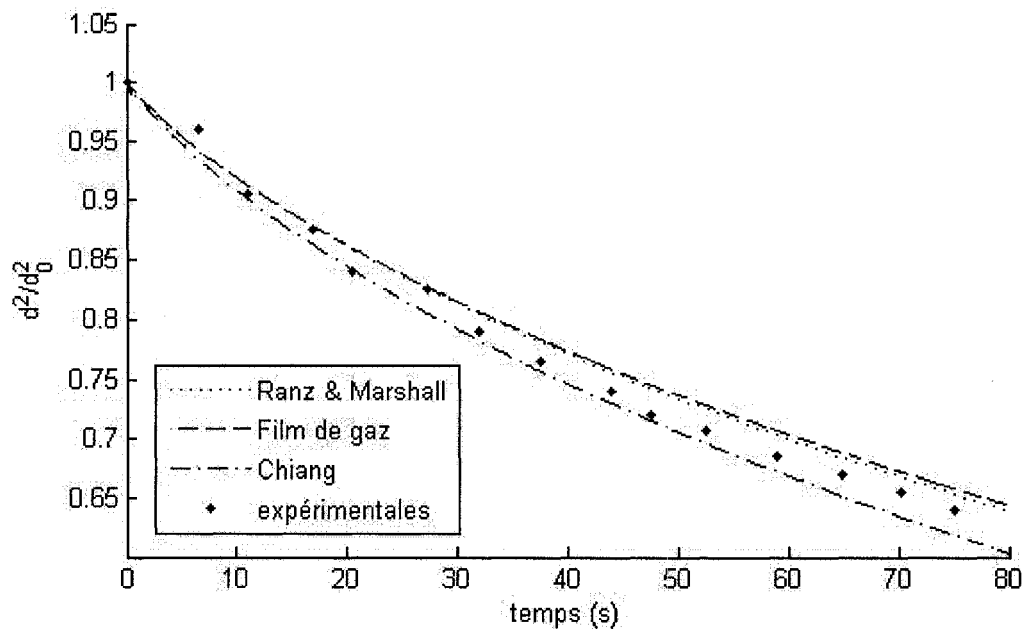
débit massique évalué par les corrélations est trop faible. Cette situation a conduit à la modification de l'équation calculant le coefficient de transfert de masse par l'ajout d'un facteur qui augmente le débit massique de façon importante. Ce dernier a été déterminé par déductions et par essais et erreurs. Le facteur de correction proposé est présenté à l'équation 4.22.

$$\frac{MM_{\text{vap}}}{MM_{\text{m,ref}}} \quad (4.22)$$

où MM_{vap} est la masse molaire de la vapeur de carburant calculée à l'aide de l'équation 2.2 et MM_{ref} est la masse molaire du mélange air/carburant calculé à l'état de référence. En présentant le facteur sous cette forme, il peut paraître que l'écart présenté au graphique 4.2 vient seulement d'une confusion entre la fraction molaire et la fraction massique (voir équation 2.20). C'est pour cette raison que le modèle de Ranz et Marshall est calculé complètement avec l'approche molaire et que les deux autres (film de gaz et Chiang) sont calculés complètement avec l'approche massique pour éliminer la possibilité que l'écart vient d'une telle confusion. De plus, le faible écart entre les modèles rappelle que ces méthodes sont équivalentes. En ajoutant ce facteur à l'équation 4.6, on obtient l'équation suivante :

$$h_m = \frac{Sh \cdot D_{AB,\text{ref}}}{d_g} \cdot \frac{MM_{\text{vap}}}{MM_{\text{m,ref}}} \quad (4.23)$$

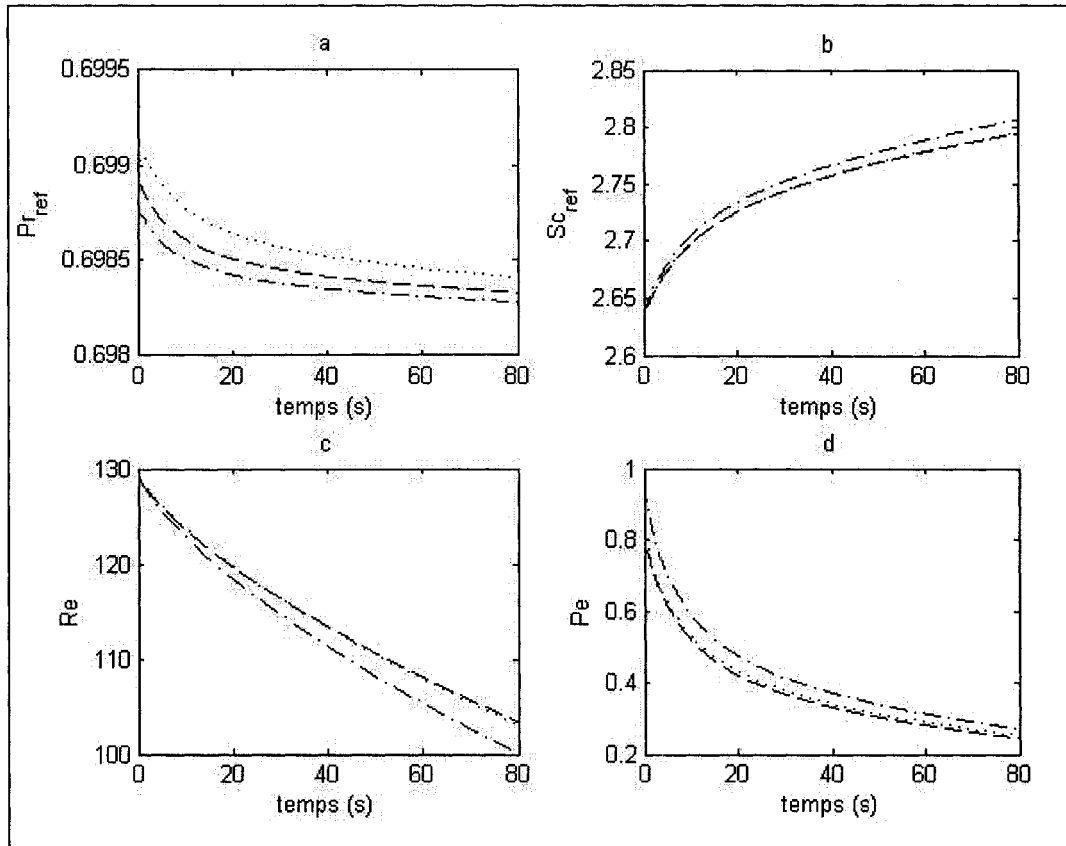
En incorporant ce facteur de correction dans la procédure de calcul des trois groupes de corrélations présentés jusqu'à présent, l'écart entre les données expérimentales et les données calculées diminue de beaucoup comme en témoigne le graphique 4.4.



Graphique 4.4 *Comparaison entre le diamètre obtenu par calculs avec le facteur de correction et le diamètre mesuré expérimentalement par Runge et al. (1998).*

On peut voir que les résultats calculés sont en accord avec les résultats expérimentaux. Le pourcentage d'erreur maximum est de 3,5 %, 3,1 % et -3,3 % pour les modèles Film de gaz, Chiang et Ranz & Marshall respectivement. Fait intéressant, le facteur corrige l'écart des trois modèles. Ceci a une répercussion importante. Avec les résultats présentés au graphique 4.4, aucun modèle n'est clairement supérieur aux autres pour reproduire les résultats expérimentaux. On peut aussi voir l'effet du modèle DC pour les trois modèles. Le théorème rapporte que l'évolution du diamètre au carré d'une gouttelette de substance pure qui s'évapore et dont la température ne change pas est une ligne droite (Kuo, 1986). On voit clairement que l'évolution du diamètre au carré n'est pas une ligne droite mais une ligne courbe dont la pente de la tangente est de moins en moins prononcée. Les parties plus volatiles s'évaporent plus rapidement dans les premiers instants (pente de la tangente plus prononcée). Plus le temps avance moins la pente de la tangente est prononcée car la gouttelette est de moins en moins volatile. Le graphique 4.5 présente l'évolution de quatre

nombre adimensionnels. Ce sont les mêmes qu'au graphique 4.3 sauf qu'ils ont été évalués lors des calculs faits avec le facteur de correction.



Graphique 4.5 *Évolution de différents nombres adimensionnels lors de l'évaporation de la gouttelette avec facteur de correction (..... R&M ; --- Film ; --- Chiang).*

Pour les nombres Pr_{ref} et Sc_{ref} , la différence n'est pas vraiment notable. On remarque une légère différence pour le nombre de Reynolds qui diminue plus rapidement car le diamètre de la gouttelette diminue plus rapidement. On note une augmentation du nombre de Peclet dû à l'augmentation du débit massique. Cependant, on peut dire que le nombre de Peclet est faible avec ou sans le facteur de correction.

Plusieurs lectures ont été faites pour tenter d'expliquer ce facteur de correction mais tous les articles et livres lus n'en font pas référence. La difficulté est que la plupart des articles et livres montrent les mêmes équations que celles présentées ici mais on ne voit aucun exemple de calculs. Très souvent, on ne retrouve aucune comparaison avec des résultats expérimentaux. Cependant, on y retrouve parfois des résultats en bonne concordance avec les résultats expérimentaux. Il se peut qu'une différence dans l'évaluation d'un ou plusieurs paramètres cause un écart et que l'ajout de ce facteur vienne corriger cet écart. L'idéal serait de comparer les résultats avec plusieurs autres expérimentations mais aucune autre expérimentation bien documentée avec un vent relatif d'une gouttelette de carburant grand marché n'a été trouvée. Il existe cependant un autre type d'expérimentation avec des gouttelettes de carburant. La différence est qu'il n'y a aucun vent relatif. Afin de voir si le facteur de correction y est pertinent, une étude comparative est présentée dans la prochaine section.

4.5.3 Gouttelette de kérosène avec convection naturelle

Une étude expérimentale sur l'évaporation d'une gouttelette de kérosène avec de la convection naturelle a été présentée par Ghassemi (Ghassemi, Baek et Khan, 2006). Cette étude est intéressante car elle est faite sur une assez grande plage de températures et de pressions. Cependant il est nécessaire d'apporter certaines modifications pour permettre d'évaluer les nombres adimensionnels Nu et Sh .

4.5.3.1 Modèle avec convection naturelle

Dans le cas où la convection est naturelle, il n'est plus recommandé d'utiliser les modèles présentés dans la section précédente. Comme il n'y a pas de vent relatif imposé, le nombre de Reynolds théorique devient nul. Dans de tel cas, on évalue plutôt le nombre de Grashof. Dans le cas d'une gouttelette qui s'évapore (donc avec transfert de masse), le nombre de Grashof s'évalue avec l'équation 4.24 (Incropera et DeWitt, 2002).

$$Gr_{ref} = \frac{d_g^3 \cdot \rho_{ref} \cdot g \cdot (\rho_s - \rho_\infty)}{\mu_{ref}^2} \quad (4.24)$$

Encore une fois il existe plus d'une corrélation pour évaluer Nu et Sh. Comme cette section est insérée seulement à des fins de validation, un seul modèle est présenté. Il s'agit des corrélations utilisées lors des premiers calculs effectués avec le modèle DC (Chin, 1994). Elles se résument à :

$$Sh = 2 + 0.5 \cdot Sc_{ref}^{1/4} \cdot Gr_{ref}^{1/4} \quad (4.25)$$

$$Nu = 2 + 0.4 \cdot Pr_{ref}^{1/4} \cdot Gr_{ref}^{1/4} \quad (4.26)$$

En incorporant les équations 4.24, 4.25 et 4.26 dans la procédure de calcul présentée à la figure 4.1, il devient possible de calculer l'évolution d'une gouttelette qui s'évapore dans un environnement avec convection naturelle.

4.5.3.2 Présentation des cas étudiés

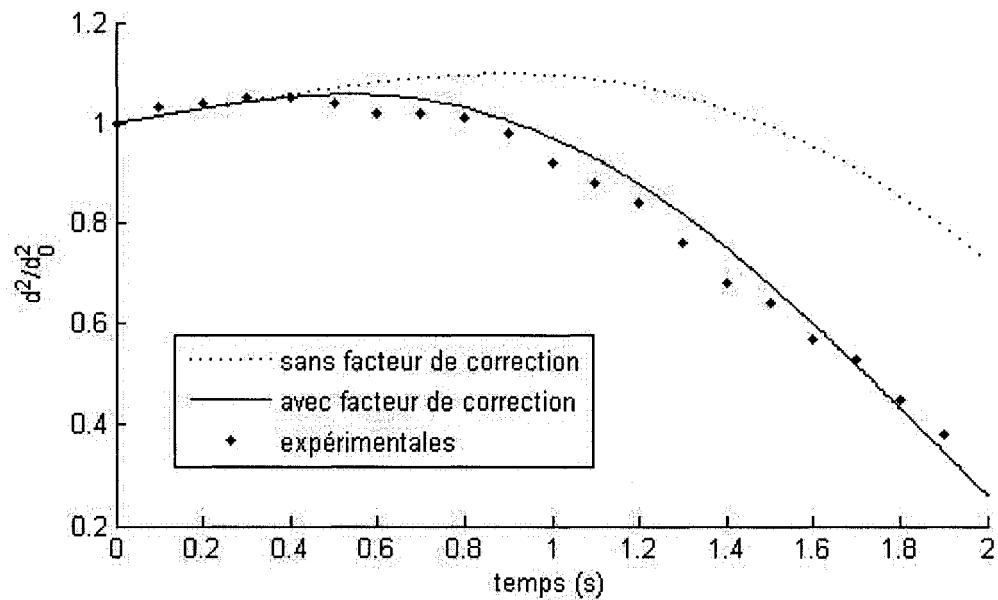
Afin de ne pas alourdir inutilement le mémoire, seulement deux cas sont présentés. Les conditions ambiantes et initiales de ces cas sont résumées au tableau 4.3 (Ghassemi, Baek et Khan, 2006).

Tableau 4.3

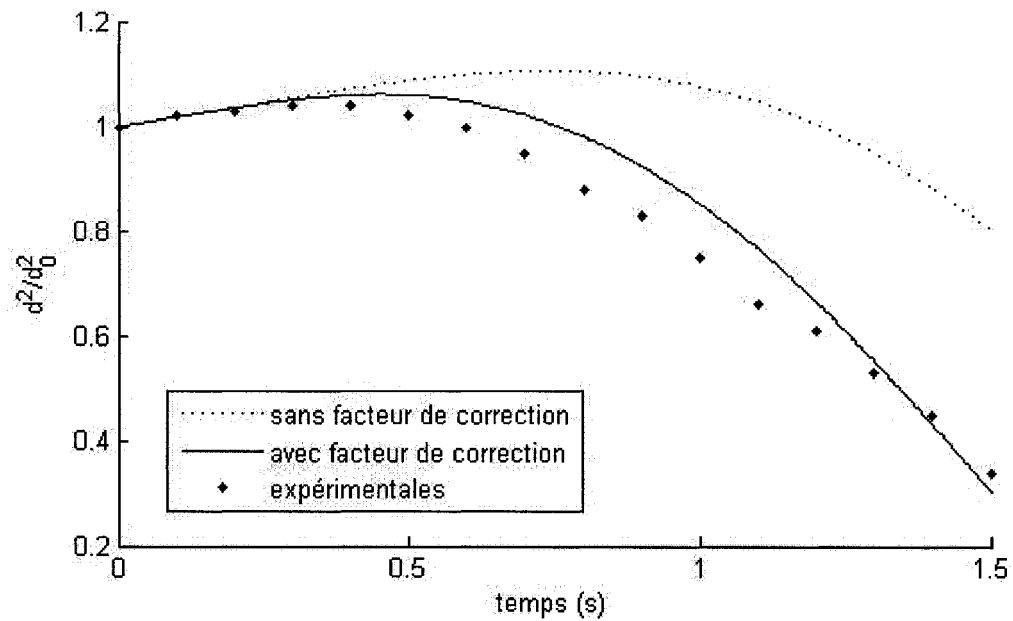
Conditions ambiantes et initiales de l'expérimentation
avec convection naturelle

Conditions	Cas 1	Cas 2
Température ambiante	773 K	873 K
Pression ambiante	1 MPa	1 MPa
Température initiale de la gouttelette	300 K	300 K
Diamètre initial de la gouttelette	1 mm	1 mm

Ces deux cas sont retenus car l'évolution du diamètre adimensionnel de la gouttelette par rapport au temps est disponible (Ghassemi, Baek et Khan, 2006). Afin d'évaluer si le facteur de correction présenté à l'équation 4.22 est toujours pertinent, les graphiques 4.6 et 4.7 présentent les résultats obtenus avec et sans ce facteur pour les deux cas étudiés.



Graphique 4.6 *Comparaison entre le diamètre obtenu par calculs et le diamètre mesuré expérimentalement (Ghassemi, Baek et Khan, 2006) $P = 1$ MPa et $T = 773$ K.*



Graphique 4.7 *Comparaison entre le diamètre obtenu par calculs et le diamètre mesuré expérimentalement (Ghassemi, Baek et Khan, 2006) $P = 1 \text{ MPa}$ et $T = 873 \text{ K}$.*

On peut voir que dans les deux cas, le facteur de correction améliore de beaucoup les résultats calculés. Cette constatation ne démontre pas hors de tout doute que l'ajout du facteur de correction est nécessaire pour toutes les plages de conditions mais à défaut d'avoir plus de données expérimentales, il est retenu pour le reste du présent mémoire. Chose certaine, avec les corrélations pour évaluer les propriétés (chapitre 3) et la procédure de calculs (chapitre 4), ce facteur améliore les résultats des calculs indépendamment du modèle utilisé pour quantifier le transfert de masse et de chaleur dans les trois cas étudiés.

4.6 Conclusion du chapitre

Le but premier de ce chapitre était de valider le modèle DC. En second lieu, le but était de déterminer le meilleur modèle pour quantifier le transfert de masse et de chaleur à utiliser avec le modèle DC. La procédure de calcul implantée dans Matlab 7 semble bien fonctionner avec l'ajout du facteur de correction proposé à l'équation 4.22. Les trois

modèles utilisés pour quantifier le transfert de masse et de chaleur donnent des résultats forts semblables et on ne peut pas choisir avec conviction l'un plutôt que l'autre. Dû à un manque de données expérimentales avec de la convection forcée, des calculs avec le modèle DC ont aussi été comparés à des résultats expérimentaux pour une gouttelette sujette à de la convection naturelle. Encore une fois, l'ajout du facteur de correction proposé à l'équation 4.22 donne de meilleurs résultats. Le prochain chapitre présente différents cas de gouttelettes s'évaporant dans des conditions retrouvées dans l'injection d'un moteur diesel afin d'étudier l'influence du modèle DC dans de telles conditions.

CHAPITRE 5

Application du modèle DC dans des conditions de moteurs diesel

5.1 Introduction

Tel que spécifié lors des précédents chapitres, il a été impossible de trouver des résultats expérimentaux d'une gouttelette de diesel isolée s'évaporant dans des conditions se rapprochant de celle trouvée dans un moteur diesel. La raison est simple : une gouttelette de diesel dans une injection directe évolue dans des conditions très difficiles à reproduire expérimentalement. Premièrement les vitesses relatives y sont très importantes. Les pressions ambiantes peuvent être de l'ordre de 50 à 100 bar. Les températures ambiantes quant à elles peuvent être aussi élevées que 2200 K dans les zones où l'on retrouve de la combustion.

Pour une gouttelette de carburant injectée dans un moteur diesel, les conditions ambiantes évoluent tout au long du parcours de la gouttelette. Il est très difficile de déterminer expérimentalement ce genre de conditions. Généralement, lors d'expérimentations effectuées avec des moteurs diesel, seule la pression dans le cylindre est mesurée. Ce chapitre propose premièrement une méthode pour déterminer numériquement les conditions ambiantes de moteur diesel dans lesquelles une gouttelette évolue. Deuxièmement, la procédure de calcul présentée au chapitre 4 est adaptée pour pouvoir tenir compte de ces conditions. Finalement les résultats des calculs sont présentés et analysés. Le but premier est de vérifier si le modèle DC, tel que programmé, influence l'évaporation dans de telles conditions.

5.2 Simulation de moteur diesel avec un logiciel CFD

Les simulations de moteur diesel existent déjà depuis quelques temps. Une quantité appréciable d'articles ont déjà été publiés (Choi et Reitz, 1999 ; Kong, Han et Reitz, 1995 ; Kong, Ricart et Reitz, 1995 ; Yong et Reitz, 2003) sur ce sujet. L'avantage de ces simulations est de pouvoir observer les distributions spatiales de diverses quantités physiques telle que la vitesse, la température, la génération de polluant, etc. Afin de déterminer avec un bon ordre de grandeur les conditions dans lesquelles évoluent les gouttelettes de carburant dans un moteur diesel, une simulation a été réalisée à l'aide du logiciel Fluent 6.2. Cette section présente seulement un survol des notions de base des moteurs diesel et des simulations de ces derniers afin de mieux comprendre d'où viennent les conditions ambiantes qui seront imposées aux gouttelettes par la suite.

5.2.1 Choix du moteur à modéliser

Le moteur choisi pour réaliser la simulation est une version modifiée du Caterpillar 3401. Ce choix s'est avéré le plus simple car bon nombres d'articles sont publiés contenant des distributions de pression mesurée expérimentalement ainsi que plusieurs informations nécessaires à la réalisation de la simulation (Choi et Reitz, 1999 ; Kong, Han et Reitz, 1995 ; Kong, Ricart et Reitz, 1995 ; Yong et Reitz, 2003).

5.2.1.1 Description générale du moteur

Cette version modifiée du Caterpillar 3401 est un moteur diesel monocylindre qui peut produire 54 kW à une vitesse de rotation de 2100 rpm (Choi et Reitz, 1999). Un attrait important est que sa chambre à combustion est conçue de façon à avoir très peu de tourbillon et de turbulence. La figure 5.1 présente un schéma du moteur avec les dimensions de ce dernier.

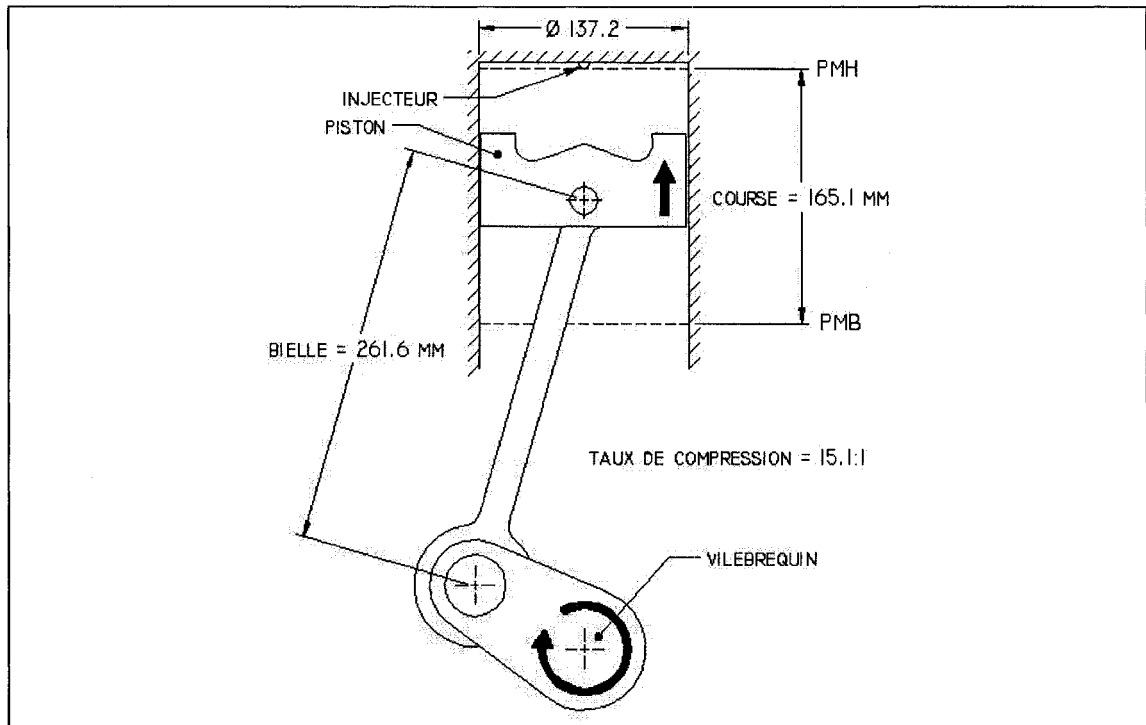


Figure 5.1 *Dimensions et paramètres importants du Caterpillar 3401*

Le piston se déplace entre le Point Mort Haut (PMH) et le Point Mort Bas (PMB). Le temps moteur montré à la figure 5.1 est la compression. La simulation débute au PMB. La compression est simulée intégralement (jusqu'au PMH) et une partie de la détente (lorsque le piston redescend). L'injection débute peu avant le PMH lorsque le piston monte et arrête peu après le PMH lorsque le piston redescend.

5.2.1.2 Description de l'injecteur

L'injecteur installé sur ce moteur est de type « injecteur à trous ». Il compte 6 trous distribués uniformément sur la circonférence. L'angle du cône des trous d'injection est de 125° et le diamètre des trous est de 0.26 mm. La figure 5.2 présente un schéma de l'extrémité de l'injecteur se retrouvant dans la chambre à combustion.

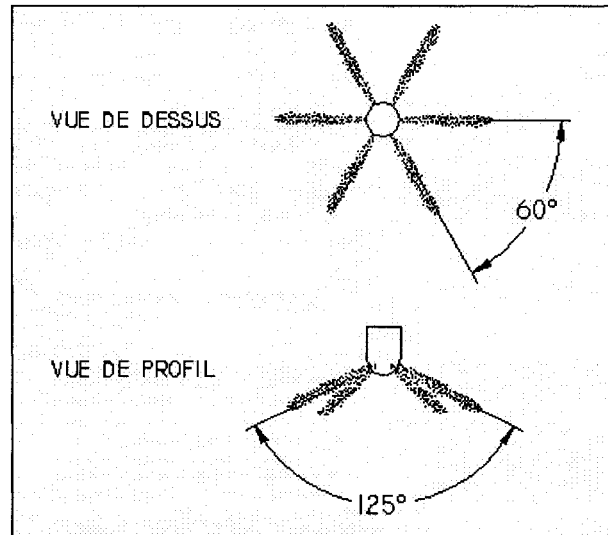


Figure 5.2 Schéma de l'injection du Caterpillar 3401

5.2.1.3 Génération du maillage

Le maillage généré pour la simulation est inspiré d'article déjà publié (Kong, Han et Reitz, 1995 ; Yong et Reitz, 2003). Comme la solution est périodique et que les temps de calculs sont de très grande durée, seulement un sixième du cylindre est reproduit. De cette façon, un seul des six jets de l'injecteur (voir figure 5.2) est modélisé. Le maillage a été réalisé à l'aide du logiciel Gambit 2.2.30. La figure 5.3 présente le maillage du cylindre utilisé lors de la simulation. Certains détails importants doivent être précisés. Premièrement le maillage doit être adaptable à la fonction de maillage dynamique de Fluent. Pour ce faire, une surface intermédiaire entre deux volumes est créée. De cette façon, seulement un des volumes (volume du bas) nécessite un remaillage lors du déplacement du piston. Ceci permet de fixer le maillage présent dans la région où se produit l'injection. Une attention particulière a été consacrée au maillage de cette zone comme il est recommandé de faire (Stiesch, 2003). La figure 5.4 présente une vue de coupe du maillage où l'on peut observer la délimitation entre les deux volumes du maillage ainsi que la zone où se produit l'injection.

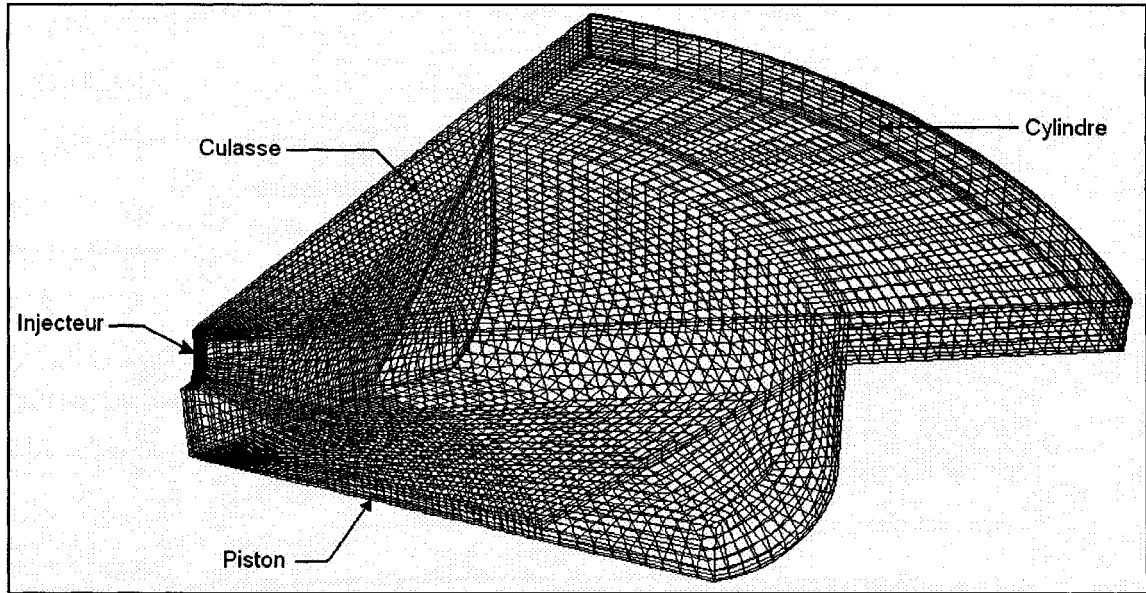


Figure 5.3 *Maillage utilisé lors de la simulation du Caterpillar 3401.*

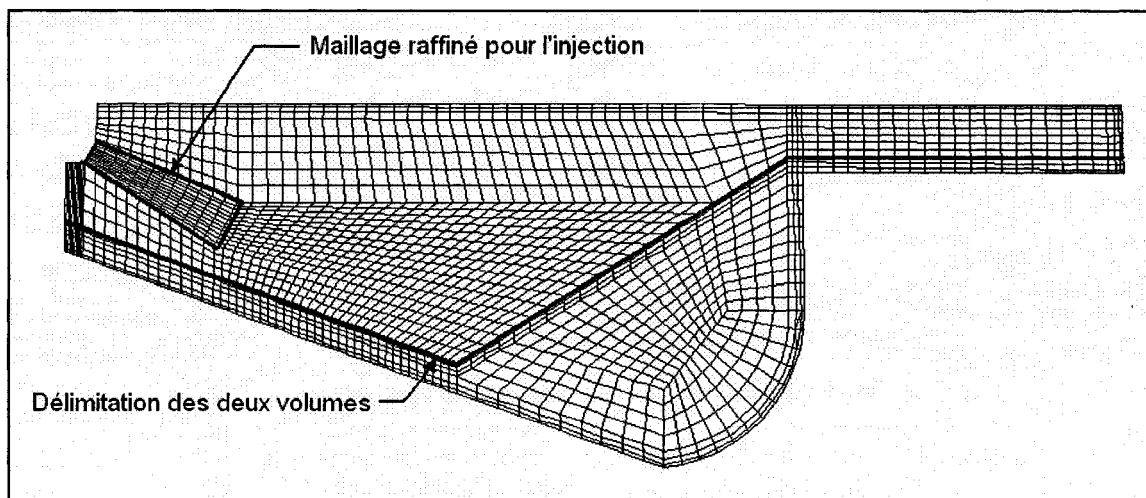


Figure 5.4 *Vue de coupe du maillage permettant de voir la délimitation entre les deux volumes et le raffinement du maillage pour l'injection.*

5.2.2 Simulation du moteur avec Fluent 6.2

La simulation du Caterpillar 3401 est réalisée à l'aide du logiciel Fluent 6.2. Comme le but premier de cette simulation est seulement d'obtenir une distribution spatiale de la

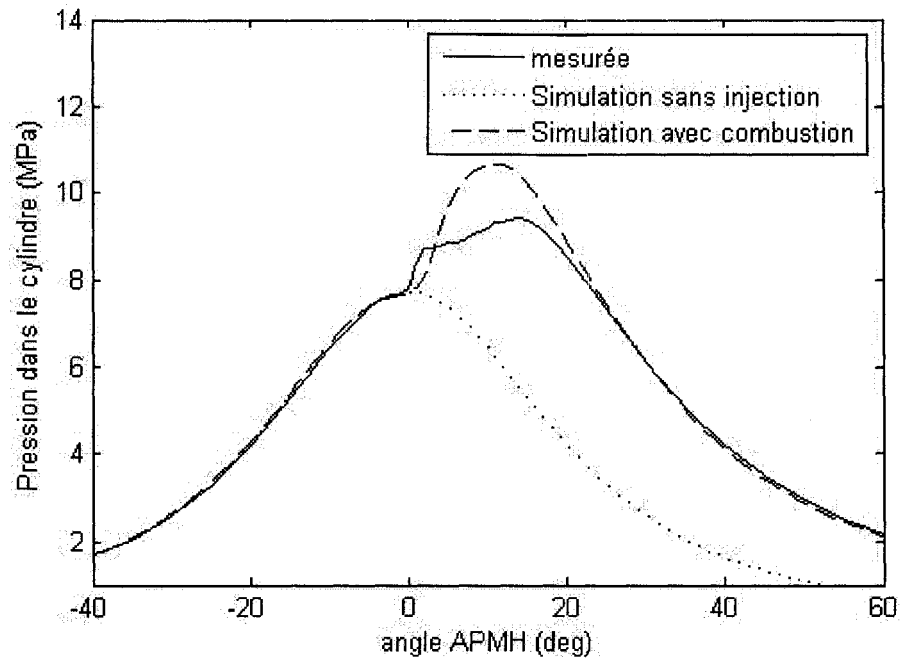
température, de la pression, du champ de vitesse et de la fraction molaire de carburant avec un bon ordre de grandeur, tous les modèles utilisés sont ceux déjà compris dans Fluent 6.2.

Les principaux sont :

- Solveur 3D en régime transitoire
- Maillage dynamique option « in-cylinder »
- Modèle de turbulence k-epsilon RNG (Kong, Han et Reitz, 1995)
- Gabarit du mélange « gasoil-air » utilisé pour le transport des espèces
- Phase discrète pour l'injection de gouttelettes de « gasoil »
- Modèle de combustion volumétrique hybride « Laminar finit rate / Eddy dissipation »

Les résultats obtenus lors de la simulation ne sont pas tous détaillés. Cependant, afin de montrer une certaine validité des ordres de grandeur des résultats, le graphique 5.1 présente une comparaison entre la pression dans le cylindre mesurée expérimentalement et la pression obtenue avec la simulation. Les résultats sont présentés dans des unités typiques rencontrées dans l'étude des moteurs. Au lieu de prendre le temps en abscisse, on utilise plutôt les degrés de vilebrequin. L'angle APMH que l'on retrouve en abscisse et signifie « Après le Point Mort Haut ». En d'autre terme, l'angle APMH est négatif lorsque le piston n'a pas atteint la limite supérieure de son déplacement (durant la compression). $APMH = 0$ lorsque le piston atteint le PMH et il devient positif lorsque le piston redescend par la suite (durant la détente).

On peut voir au graphique 5.1 que les résultats dévient de façon assez importante entre $APMH = 0$ et $APMH = 20$. Cette divergence est due à une mauvaise modélisation de la combustion. Plusieurs tentatives ont été réalisées pour améliorer les résultats mais sans grand succès. Comme le but de cette recherche n'est pas l'étude des modèles de combustion mais plutôt l'étude des modèles d'évaporation des gouttelettes, ces résultats ont été jugés acceptables pour la suite.



Graphique 5.1 *Comparaison entre la distribution de pression du cylindre mesurée expérimentalement (Choi et Reitz, 1999) et les résultats de la simulation.*

5.3 Adaptation de la procédure de calcul dans Matlab 7

Afin d'inclure les résultats obtenus lors des simulations dans la procédure de calcul d'une seule gouttelette, une adaptation a dû être faite. Au lieu de fixer les conditions ambiantes comme la température ou le vent relatif, il faut maintenant permettre à ces derniers de changer selon la position de la gouttelette dans l'espace. Pour y parvenir, deux variables doivent être ajoutées. Il s'agit de la vitesse et de la position de la gouttelette.

5.3.1 Simplification du problème

La vitesse et la position d'une gouttelette envoyée dans un certain domaine sont des grandeurs vectorielles. L'intégration de telles variables en trois dimensions devient assez

lourde car il est nécessaire d'intégrer trois grandeurs scalaires pour la position (x,y,z) et trois pour la vitesse (V_x,V_y,V_z). Cependant, il est possible de simplifier le problème.

On peut dire que l'on quantifie l'allure d'un jet avec deux variables soit l'angle du cône du jet et la pénétration (Borman et Ragland, 1998 ; Stiesch, 2003). La solution d'un jet peut être ramenée à une solution axisymétrique autour de l'axe du trou d'injection s'il n'y a pas de vent latéral ou des effets de convection naturelle. Les variables pour définir le domaine sont l'angle θ par rapport à l'axe et la distance de pénétration par rapport à l'origine tels que présentés à la figure 5.5

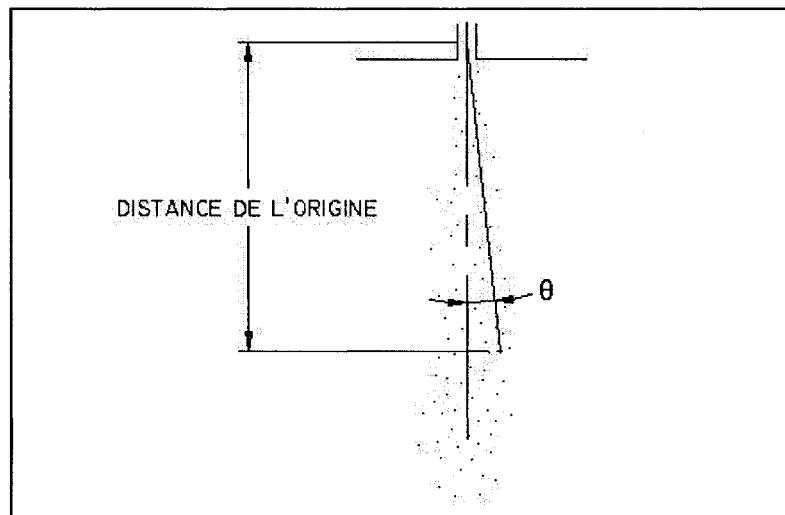


Figure 5.5 Variables utilisées pour définir le domaine d'un jet axisymétrique.

Si l'on observe des images d'injection réalisées par des trous simples comme les trous que l'on retrouve sur l'injecteur installé sur le Caterpillar 3401, on réalise que l'angle total du cône formé par la vapeur de carburant est de l'ordre de 10-12°. De plus, si l'on regarde seulement l'angle formé par la phase liquide, l'angle devient inférieur à 10°. Les mesures d'angle ont été réalisées à l'aide de la figure 5.6 (Siebers, 1998). On peut y voir la phase liquide en blanc et la phase vapeur en noir. La température du milieu ambiant est de 1000

K et la pression du milieu ambiant est de 2,12 MPa ($\rho_a = 7,3 \text{ kg/m}^3$), 4,29 MPa ($\rho_a = 14,8 \text{ kg/m}^3$) et 8,76 MPa ($\rho_a = 30,2 \text{ kg/m}^3$).

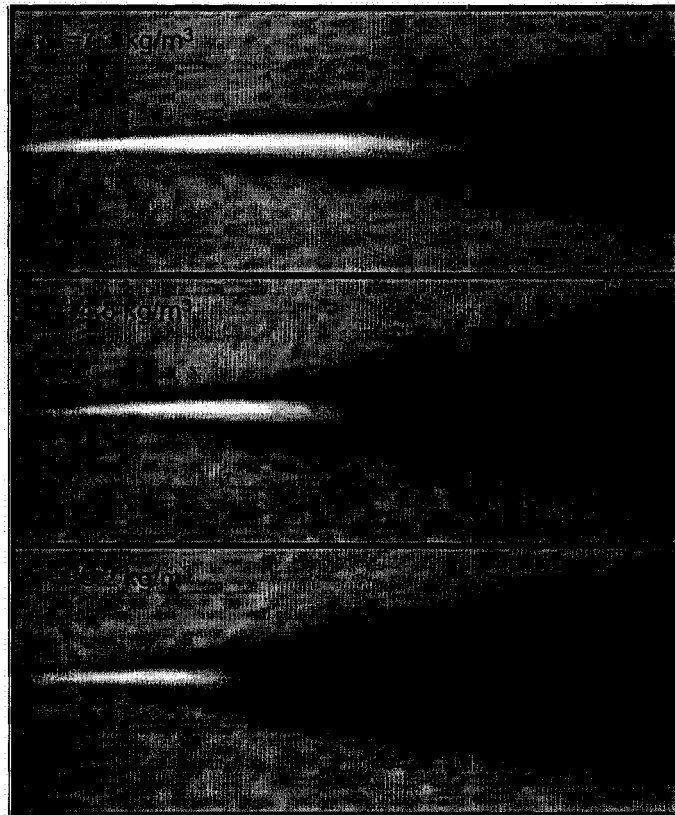


Figure 5.6 *Image représentant des injections dans un milieu de plus en plus dense.*
(Tirée de (Siebers, 1998))

Le problème peut se simplifier à une seule dimension si on fixe l'angle et que l'on utilise seulement la distance suivant cet angle. Cette simplification est apportée dans la procédure de calcul. L'angle θ (voir figure 5.5) choisi est 0° . L'origine est, quant à elle, placée à la sortie du trou. Ceci revient à dire que la gouttelette étudiée dans la procédure de calcul suit une ligne droite. Cette ligne est équivalente à l'axe du trou d'injection. La vitesse de la gouttelette est toujours orientée dans la direction de cette ligne et la position de la gouttelette suit aussi cette ligne. Il faut donc extraire les distributions de température, de

pression, de vitesse de l'air et de fraction molaire de la vapeur de carburant de la simulation moteur suivant l'axe du trou d'injection.

5.3.2 Détermination des conditions ambiantes

Les conditions ambiantes extraites des résultats de la simulation sont tirées directement de Fluent selon la ligne d'axe du trou de l'injecteur. La figure 5.7 présente un exemple où l'on voit la distribution de température au temps -5 APMH. La distribution est présentée sur un plan coupant l'axe du trou d'injection et l'axe du cylindre.

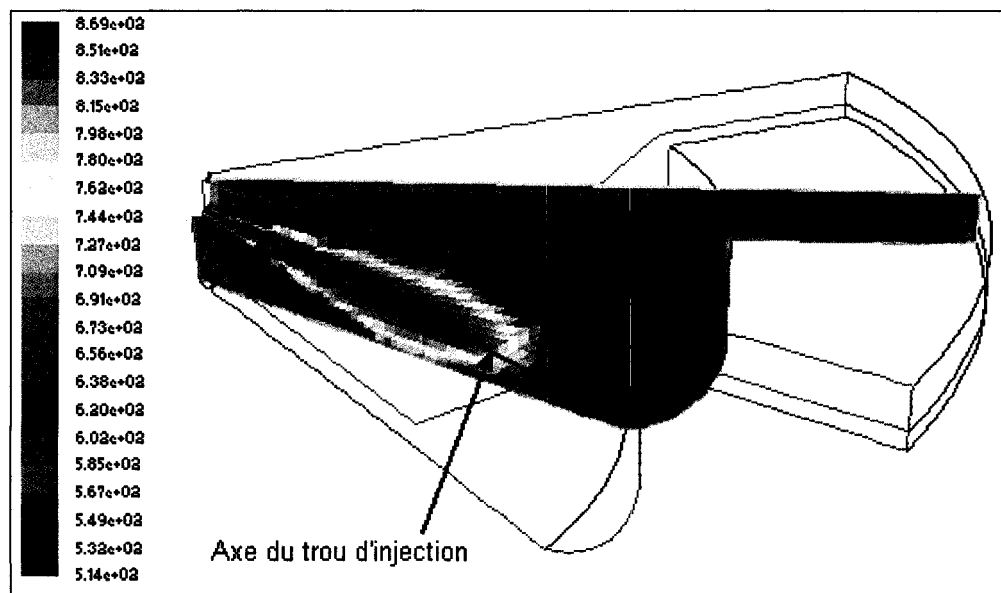
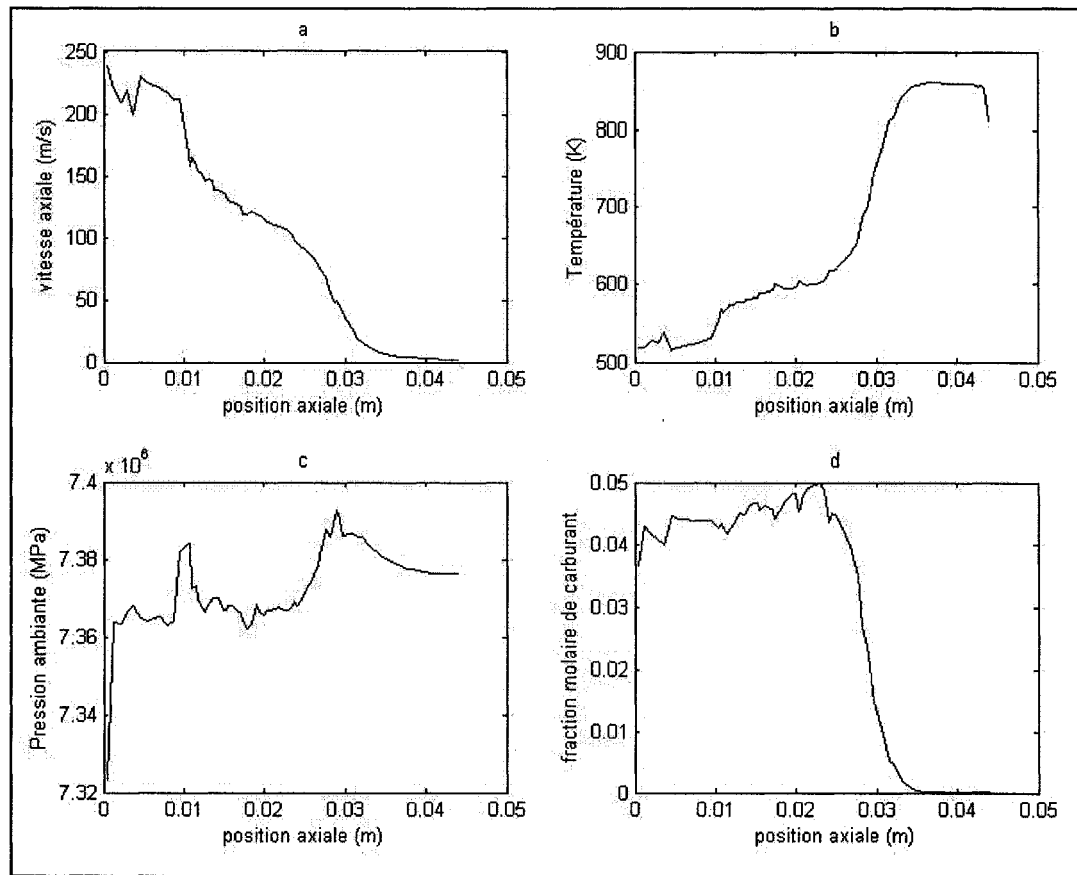


Figure 5.7 *Représentation de l'axe du trou d'injection d'où sont tirées les conditions ambiantes.*

Une fois les données de position, de vitesse, de température, de pression et de fraction molaire extraites, elles sont toutes réorganisées en différents vecteurs de même longueur pour représenter les distributions d'un système de coordonnées unidimensionnel suivant l'axe du trou. La position 0 est la sortie du trou. Comme la vitesse est vectorielle et qu'il peut y exister de petites composantes perpendiculaires à l'axe du trou d'injection, le

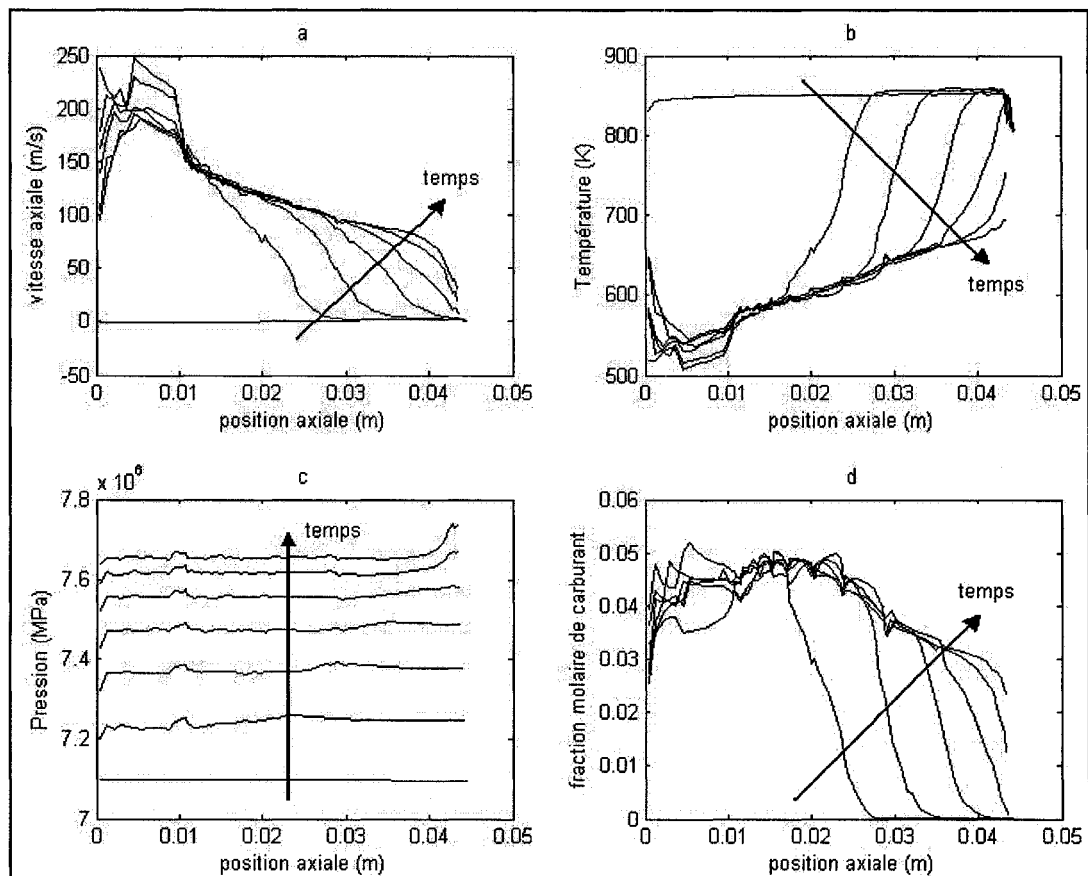
produit scalaire entre les vecteurs de vitesse et un vecteur unitaire orienté dans la direction de l'axe est fait afin d'extraire seulement une composante dans la bonne direction. Une fois le tout terminé, l'on obtient une distribution de chaque condition ambiante selon la distance axiale. Le graphique 5.2 présente les distributions associées au temps -5 APMH.



Graphique 5.2 Représentations des conditions ambiantes au temps APMH = -5.

On peut voir au graphique 5.2 l'évolution des conditions ambiantes selon la distance axiale du trou d'injection jusqu'à ce que l'axe du trou atteigne la surface du piston. Ces courbes pourraient être lissées mais afin de voir si les modèles sont capables de bien fonctionner dans de telles conditions, aucune modification n'a été apportée. On peut voir des fluctuations dans la courbe de pression (graphique 5.2c) mais si l'on observe l'échelle, on

remarque que se sont de faibles fluctuations dues seulement au résidu de calculs lors des itérations pour converger la solution. On peut catégoriser l'évolution des conditions ambiantes en deux groupes. Avant le PMH et du PMH jusqu'à la fin de l'injection. Le graphique 5.3 présente l'évolution des conditions ambiantes du début de l'injection (APMH = -7) jusqu'à APMH = -1 par pas d'un degré.

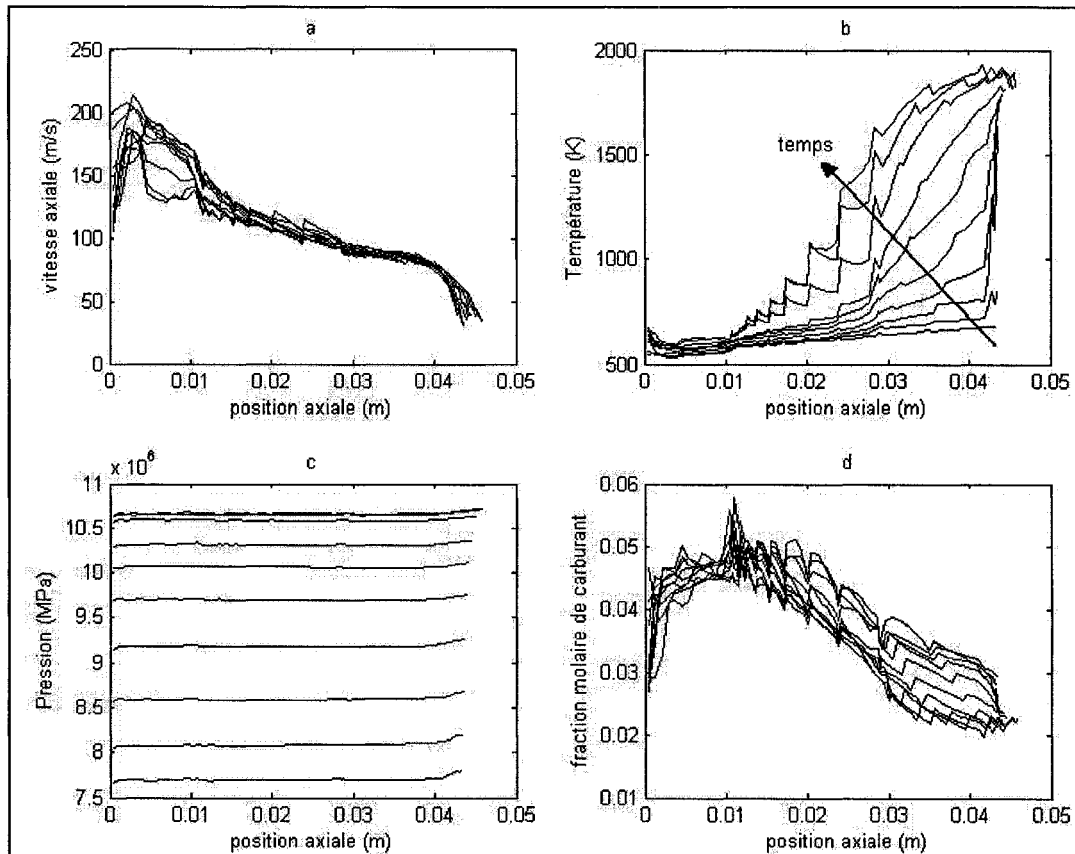


Graphique 5.3 *Évolution des conditions ambiantes dans le temps avant le début de la combustion.*

On peut voir au graphique 5.3 qu'avec le temps qui avance, il se construit un domaine stable au niveau de la vitesse axiale, de la température et de la fraction molaire de carburant. La pression quant à elle augmente constamment comme l'on peut voir sur la distribution de pression présentée au graphique 5.3c. On peut aussi voir que la

stabilisation des conditions se fait assez rapidement près de l'injecteur et de moins en moins rapidement le long de la distance axiale. Il se produit une chute de température assez importante due au fait que les gouttelettes de carburant absorbent une bonne partie de la chaleur pour se réchauffer et pour s'évaporer. La fraction molaire de carburant est initialement nulle (on ne peut pas observer la ligne car elle est confondue avec l'abscisse) et augmente assez radicalement par la suite. Au niveau de la vitesse, on peut voir qu'initialement, elle est pratiquement nulle. Ceci est normal car à $APMH = -7$ le piston est pratiquement immobilisé. À ce point, la vitesse est même négative (vers le trou) car il y a une petite composante qui fait remonter l'air (due au mouvement du piston). Ceci permet de voir que les vitesses générées par l'injection sont beaucoup plus importantes (de deux ordres de grandeur) par rapport aux vitesses dues au déplacement du piston pendant l'injection.

L'évolution des conditions ambiantes du PMH jusqu'à la fin de l'injection est caractérisée par une augmentation importante de la température telle que représentée au graphique 5.4. Il est intéressant de noter que malgré la combustion, la température à la sortie du trou, et pour une distance de l'ordre du centimètre, demeure pratiquement constante à environ 550 K. Pour le reste de la position axiale, elle augmente de plus en plus. La vitesse axiale et la fraction molaire demeure relativement stables et la pression continue d'augmenter.



Graphique 5.4 *Évolution dans le temps des conditions ambiantes après le début de l'injection.*

Il suffit maintenant de choisir un des temps présentés aux graphiques 5.3 et 5.4 pour définir les conditions ambiantes imposées dans la procédure de calcul. Cependant pour pouvoir les importer correctement, la vitesse et la position de la gouttelette doivent être connues. Ceci nécessite des modifications de la procédure de calcul.

5.3.3 Modifications apportées à la procédure de calcul

Les modifications apportées à la procédure de calcul sont surtout au niveau de la dynamique de la gouttelette. La vitesse et la position de la gouttelette doivent maintenant être intégrées pour évaluer correctement les conditions ambiantes et la vitesse relative à l'air.

5.3.3.1 Dynamique de la gouttelette

La dynamique d'une gouttelette peut être représentée par les mêmes équations de mouvement qu'une particule. Les équations employées sont résumées ci-dessous (Borman et Ragland, 1998 ; Stiesch, 2003) :

$$\frac{dx}{dt} = V_g \quad (5.1)$$

$$m_g \cdot \frac{dV_g}{dt} = F_D \quad (5.2)$$

$$F_D = -\frac{1}{2} \cdot \rho_\infty \cdot V_{rel}^2 \cdot \frac{\pi \cdot d_g^2}{4} \cdot C_D \quad (5.3)$$

$$V_{rel} = V_g - V_a \quad (5.4)$$

$$C_D = 27 \cdot Re^{-0.84} \quad \text{pour } Re < 80 \quad (5.5)$$

$$C_D = 0.271 \cdot Re^{-0.217} \quad \text{pour } Re > 80 \quad (5.6)$$

où le nombre de Reynolds est celui calculé avec l'équation 4.1 sauf que la vitesse relative (V_{rel}) est employée au lieu de V_∞ . Les termes x , V_g et V_a représente respectivement la distance axiale, la vitesse de la gouttelette et la vitesse de l'air dans un système d'axe inertiel. Le terme C_D représente le coefficient de traînée. Plusieurs corrélations peuvent être employées pour déterminer ce dernier mais cette étude ne fait pas partie des objectifs de cette recherche. Les équations 5.5 et 5.6 sont donc utilisées pour tous les cas étudiés.

5.3.3.2 Nouvelle procédure de calcul

La nouvelle procédure de calcul doit inclure à la fois les conditions ambiantes définies à la section et 5.3.2 ainsi que les équations 5.1 à 5.6. La figure 5.8 présente la nouvelle procédure de calcul.

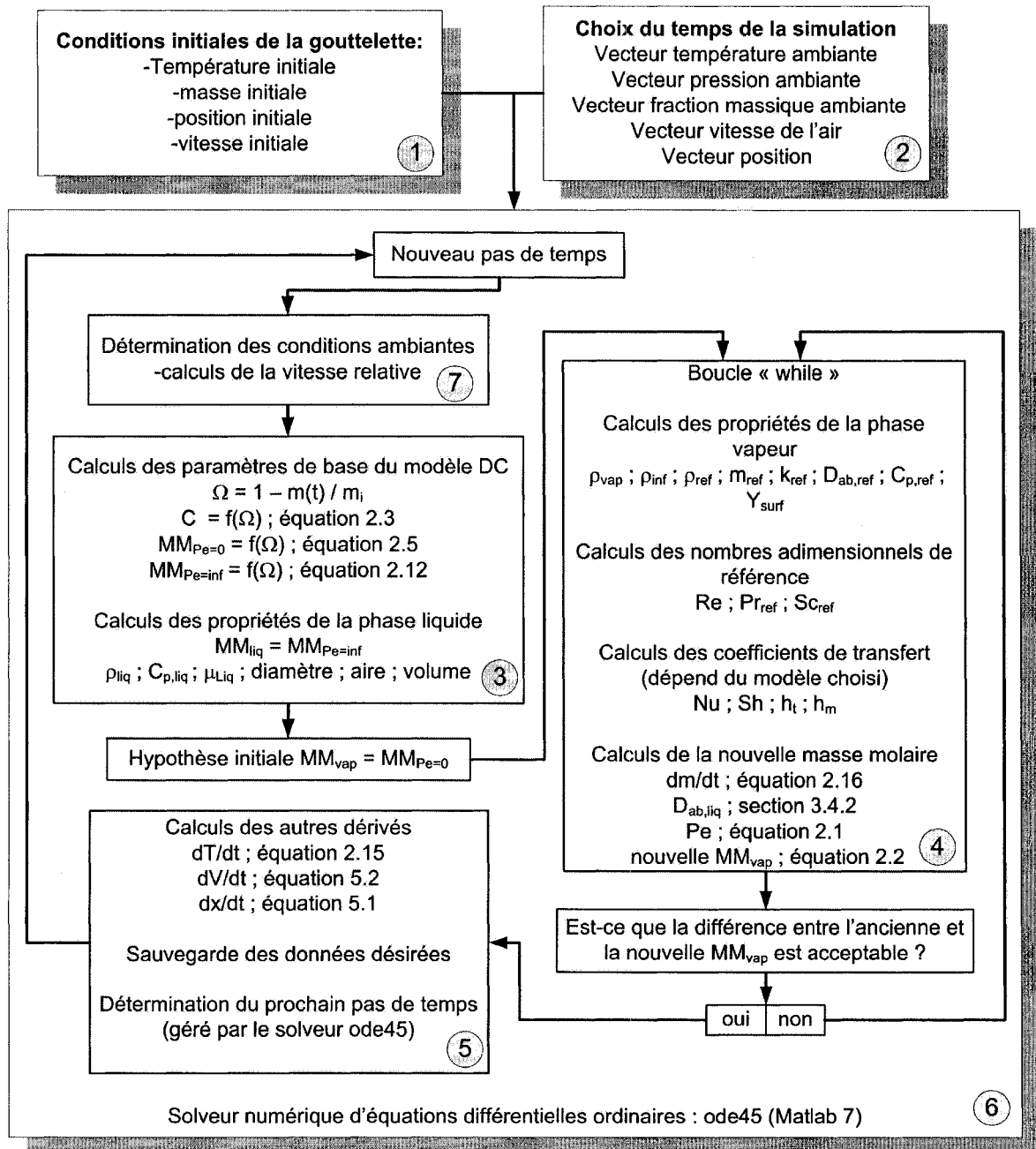


Figure 5.8 Nouvelle procédure de calcul adaptée pour contenir les vecteurs de conditions ambiantes et la dynamique de la gouttelette.

La nouvelle procédure de calcul s'apparente beaucoup à la première. Deux nouvelles conditions initiales se retrouvent dans le bloc 1 soient la vitesse et la position initiale. Pour

faciliter les comparaisons, une masse initiale est maintenant imposée au lieu du diamètre. Le choix du temps moteur doit être fait au bloc 2 afin de déterminer quels vecteurs de conditions ambiantes sont utilisés pour les calculs. Un nouveau bloc (bloc 7) est ajouté qui permet, selon la position axiale de la gouttelette, d'interpoler les conditions ambiantes à l'aide des vecteurs. Finalement, un ajout est fait au bloc 5. Il s'agit des calculs de la variation de la vitesse et de la position à l'aide des équations 5.1 à 5.6.

5.3.4 Détermination des conditions initiales

Quatre conditions initiales doivent être maintenant fournies pour effectuer les calculs. La position initiale est simple à déterminer ($x_i = 0$). Pour les autres conditions initiales de la gouttelette, certaines hypothèses ont dû être faites.

5.3.4.1 Température initiale de la gouttelette

La température de la gouttelette est un paramètre difficile à évaluer avec précision. Une valeur de température de carburant est disponible dans la littérature (Siebers, 1998) mais il s'agit d'une étude sur les injections seulement. Il est rapporté que la température du carburant avant l'injection se situe entre 375 K et 440 K. Il est logique que le carburant soit plus chaud que 300 K car en régime permanent, la température de la culasse où se retrouve l'injecteur est de l'ordre de 450 K (Seers, 2006). Le choix de la température initiale de la gouttelette est donc fixé à 400 K. De plus, cette température est celle utilisée dans la simulation.

5.3.4.2 Masse initiale de la gouttelette

Une masse initiale est imposée au lieu du diamètre car la masse volumique du carburant liquide employée par les modèles qui seront présentés à la section 5.3.5 n'est pas toujours la même. De cette façon, chaque gouttelette a la même quantité de carburant à évaporer.

Cette masse initiale est fixée à $4,5e-13$ kg. À une température de 400 K, la masse volumique du diesel calculée avec les équations décrites à la section 3.4.5 est de 744 kg/m^3 . Si l'on calcule le diamètre de la gouttelette avec les conditions définies ci-dessus, on obtient un diamètre initial de $10,5$ μm . Comme la grosseur du trou de l'injecteur est de 260 μm et qu'il y a normalement une première atomisation des gouttelettes à la sortie de ce dernier, un diamètre initial d'environ 10 μm est un bon choix. De plus, plus une gouttelette est grosse, plus elle risque de subir une atomisation secondaire. Comme cet effet n'est pas tenu en compte, il est préférable de choisir une petite gouttelette.

5.3.4.3 Vitesse initiale de la gouttelette

La vitesse initiale de la gouttelette est basée sur le débit massique fourni au trou de l'injecteur. Le débit massique utilisé durant la simulation est de $0,013875$ kg/s . La masse volumique du diesel calculée à 400 K est de 744 kg/m^3 .

$$V_m = \frac{\dot{m}_{\text{liq}}}{\rho_{\text{liq}} \cdot \frac{\pi \cdot d_{\text{trou}}^2}{4}} = \frac{0.013875}{744 \cdot \frac{\pi \cdot 0.00026^2}{4}} \cong 350 \text{ m/s} \quad (5.7)$$

Cette vitesse sera la vitesse initiale utilisée pour les calculs de la gouttelette. Le tableau 5.1 résume les conditions initiales utilisées.

Tableau 5.1

Conditions initiales de la gouttelette

Conditions	Valeur
Position initiale	0 m
Température initiale	400 K
Masse initiale	$4,5e-13$ kg
Vitesse initiale	350 m/s

5.3.5 Modèles étudiés

Trois nuances du modèle de Ranz et Marshall (section 4.3.1) sont étudiées dans ce chapitre. Comme tous les modèles présentés au dernier chapitre donnent pratiquement les mêmes résultats, le plus simple a été retenu pour cette section. Afin d'éviter les confusions, chaque nuance de modèle est nommée. Il s'agit des modèles DCP, P et FL.

5.3.5.1 Description du Modèle DCP

Le modèle DCP est le seul à être utilisé avec le modèle DC. La lettre P est ajoutée car ce modèle utilise les corrélations de propriétés présentées au chapitre 3. Il est le modèle le plus exigeant numériquement de ce chapitre. Ce modèle est basé sur toutes les équations présentées aux chapitres 2 et 3.

5.3.5.2 Description du modèle P

Le modèle P est exactement le même que le modèle DCP sauf que le modèle DC n'y est pas incorporé. La masse molaire de la gouttelette est fixée à un n-alcane précis. Un n-alcane souvent utilisé pour représenter du diesel est le n-tétradécane (Choi et Reitz, 1999). Même si la masse molaire est fixée, il est possible de déterminer les propriétés avec les corrélations présentées au chapitre 3. En comparant ces deux modèles, il devient possible de déterminer si l'utilisation du modèle DC influence de façon substantielle les résultats.

5.3.5.3 Description du modèle FL

Le modèle FL est basé sur le modèle de la phase discrète de Fluent 6.2. Bien que les calculs soient effectués sur MatLab, le modèle FL est une reproduction des calculs de l'évolution des gouttelettes intégrés dans Fluent. Les propriétés utilisées sont celle

proposées par défaut dans Fluent (pour du « gasoil » liquide) sauf pour quelques exceptions. Bien que les corrélations de Ranz et Marshall soient utilisées dans les trois modèles (DCP, P, et FL) le modèle FL diffère beaucoup des deux autres. Premièrement, l'approche utilisée est molaire telle que présentée à la section 4.3.1. De plus, lors de son évolution dans le temps, une gouttelette passe à travers différents états nommés « loi ». Le passage d'une loi à l'autre est basé principalement sur la température de la gouttelette.

Loi 1 : Réchauffement et refroidissement de la gouttelette.

En premier lieu, la gouttelette ne fait que se réchauffer ou se refroidir. En d'autres mots, lorsqu'une gouttelette se retrouve dans la loi 1, il n'y a pas de transfert de masse. Seul le transfert de chaleur est considéré. Cette loi est active jusqu'au moment où la gouttelette atteint sa température d'évaporation. Cette température n'a aucune représentation physique, elle est seulement le point où une gouttelette passe de la loi 1 à la loi 2 (Fluent, 2005).

Loi 2 : Évaporation de la gouttelette.

Lorsque la gouttelette a atteint sa température d'évaporation, elle se retrouve dans la loi 2. Cette loi est comme la loi 1 sauf qu'on commence à prendre en compte le transfert de masse. Pour le « gasoil » liquide de Fluent, la température d'évaporation est de 352 K. Comme la température initiale de la gouttelette déterminée à la section 5.3.4.1 est de 400 K, la gouttelette est déjà assez chaude pour être dans la loi 2. Lorsqu'une gouttelette se retrouve dans la loi 2, sa température et sa masse change avec le temps de la même façon que les autres modèles à l'exception des propriétés qui demeurent fixes (Fluent, 2005).

Loi 3 : Ébullition de la gouttelette.

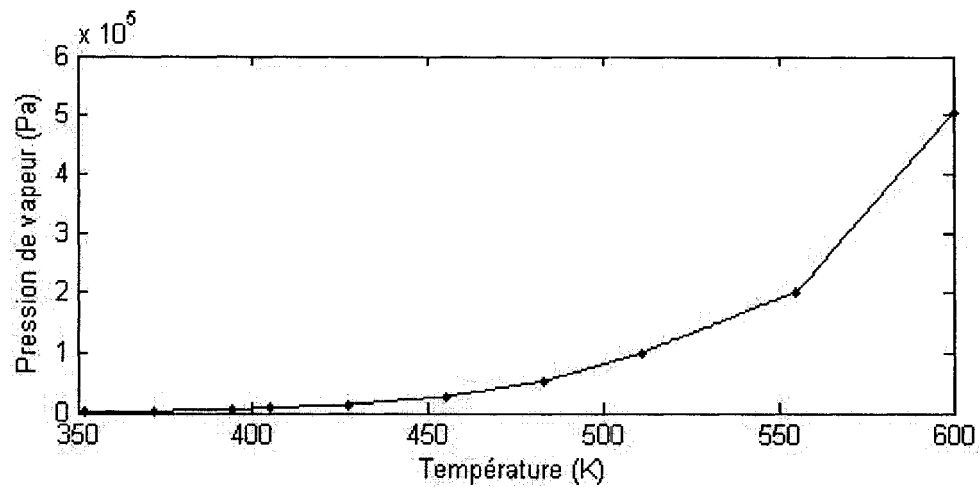
Si la gouttelette s'échauffe assez, elle atteint sa température d'ébullition. Au moment où la gouttelette atteint ce point, la température demeure inchangée et la gouttelette ne fait que perdre de la masse. La vitesse d'ébullition dépend du taux de transfert de chaleur toujours calculé avec la corrélation de Ranz et Marshall. Tel que mentionné au chapitre 3, aux pressions rencontrées dans les moteurs diesel, les carburants ne passent pas par un mode d'ébullition. Cependant, il n'est pas possible de changer directement la façon dont Fluent fait évoluer ces gouttelettes. La température d'ébullition fixée au « gasoil » liquide est de 600 K (Fluent, 2005).

Les propriétés du « gasoil » liquide de Fluent utilisées pour la simulation moteur et dans la procédure de calcul sont résumées au tableau 5.2.

Tableau 5.2

Propriété du « gasoil » de Fluent

Propriétés	Valeur
Masse molaire	221,16 kmol/kg
Masse volumique	830 kg/m ³
Chaleur spécifique	2050 J/(kg/K)
Chaleur latente	180 000 J/kg
Température d'évaporation	352 K
Température d'ébullition	600 K
Coefficient de diffusion binaire	3,79e-6 m ² /s
Pression de saturation	f(T)



Graphique 5.5 *Pression de saturation fonction de la température du « gasoil » de Fluent.*

Le graphique 5.5 présente la pression de saturation en fonction de la température déjà implantée dans Fluent. La pression de vapeur du « gasoil » est fixée par défaut mais il est recommandé (Fluent, 2005) de la rendre fonction de la température. Des points sont utilisés pour interpoler linéairement la pression de vapeur en fonction de la température.

Ceci conclut la présentation des trois modèles qui seront étudiés dans ce chapitre. Le tableau 5.3 résume les nuances entre chacun des trois.

Tableau 5.3

Résumé des nuances entre les modèles étudiés

Nuances	modèle DCP	modèle P	modèle FL
Modèle DC (chapitre 2)	√		
Corrélations pour les Propriétés (chapitre 3)	√	√	
Modèle basé sur la phase discrète de Fluent 6.2			√

Une remarque importante à faire est que le modèle de gouttelettes de Fluent ne permet pas un gain de masse. En d'autres termes, aucune condensation ne peut avoir lieu. Il est vrai que tous les modèles présentés jusqu'à présent sont basés sur le fait que les gouttelettes ne font que s'évaporer. Cependant il pourrait advenir un moment où la concentration de vapeur dans une cellule est telle que les calculs prédisent de la condensation. Comme il n'y a aucune certitude que les corrélations sont aussi applicables dans le cas où la gouttelette gagne de la masse, cette règle est appliquée pour les trois modèles étudiés dans cette section.

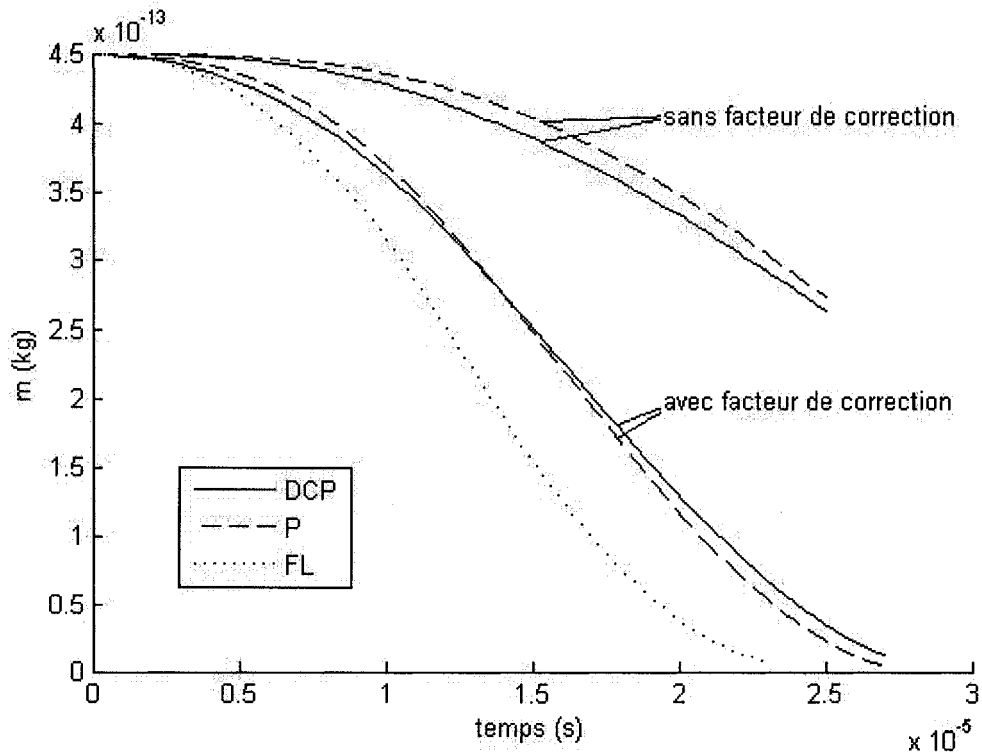
Finalement, il reste à établir si le facteur de correction présenté à la section 4.5.2 est pertinent à ajouter. Ce choix est difficile à faire car aucune valeur expérimentale ne peut valider son utilisation dans les conditions présentées ici. Les premiers résultats présentés à la prochaine section porteront sur ce sujet. À noter que ce facteur n'est pas utilisé avec le modèle FL car ce dernier est une reproduction la plus fidèle possible du modèle implanté dans Fluent et utilisé lors de la simulation.

5.4 Résultats des calculs

Cette section présente les résultats de la nouvelle procédure de calcul pour les trois modèles étudiés. Quatre temps moteur APMH = -7, -5, 0 et 5 sont choisis comme conditions ambiantes. Seules les variations de la température, de la masse, de la vitesse et de la position sont présentées car la comparaison entre les propriétés ou les nombres adimensionnels ne permet aucune conclusion pertinente autre que de montrer qu'ils sont différents. Ceci est dû au fait qu'ils ne sont pas évalués de la même façon entre les modèles DCP et P et le modèle FL. Une plus grande attention est plutôt donnée à la variation de la masse et de la température car en bout de ligne, ce sont ces variations qui sont les sujets d'études de cette recherche. Plus précisément, cette section tente d'évaluer si l'effet multicomposants du modèle DC est pertinent à utiliser dans des conditions ambiantes d'une injection directe dans un moteur diesel.

5.4.1 Cas 1 : Injection à APMH = -7

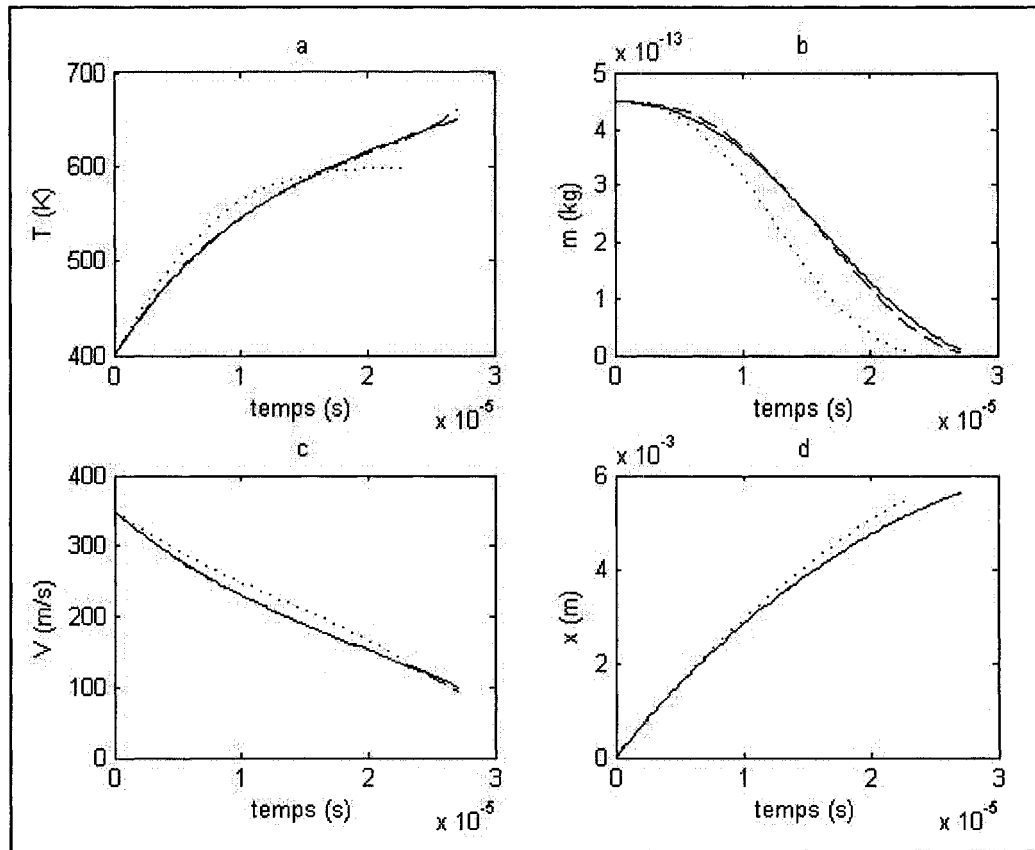
Le premier cas étudié est celui de la première gouttelette injectée dans le moteur. Les conditions ambiantes utilisées sont celles recueillies à APMH = -7. À ce moment, il n'y a pas de vapeur de carburant dans l'air, le champ de vitesse est pratiquement nul et les températures sont assez élevées. Toutes les conditions sont favorables pour que la gouttelette s'évapore très rapidement. Afin de déterminer si le facteur de correction est à utiliser, le graphique 5.6 présente l'évolution de la masse de la gouttelette pour chaque modèle. Les modèles DCP et P sont utilisés avec et sans le facteur de correction.



Graphique 5.6 *Évolution de la masse de la gouttelette au temps moteur APMH = -7.*

On voit que le facteur de correction influence de façon substantielle les résultats. Ces résultats ne valident pas l'utilisation du facteur de correction mais une chose est certaine, c'est que si on ne l'utilise pas, les résultats entre le modèle FL et les modèles DCP et P

sont très différents. Comme l'utilisation du facteur de correction a donné de meilleurs résultats lorsque comparés aux données expérimentales et que la différence entre les résultats du modèle FL et les modèle DCP et P est trop importante sans son utilisation, il a été retenu pour le reste de ce chapitre. Le graphique 5.7 présente l'évolution des quatre variables suivies.



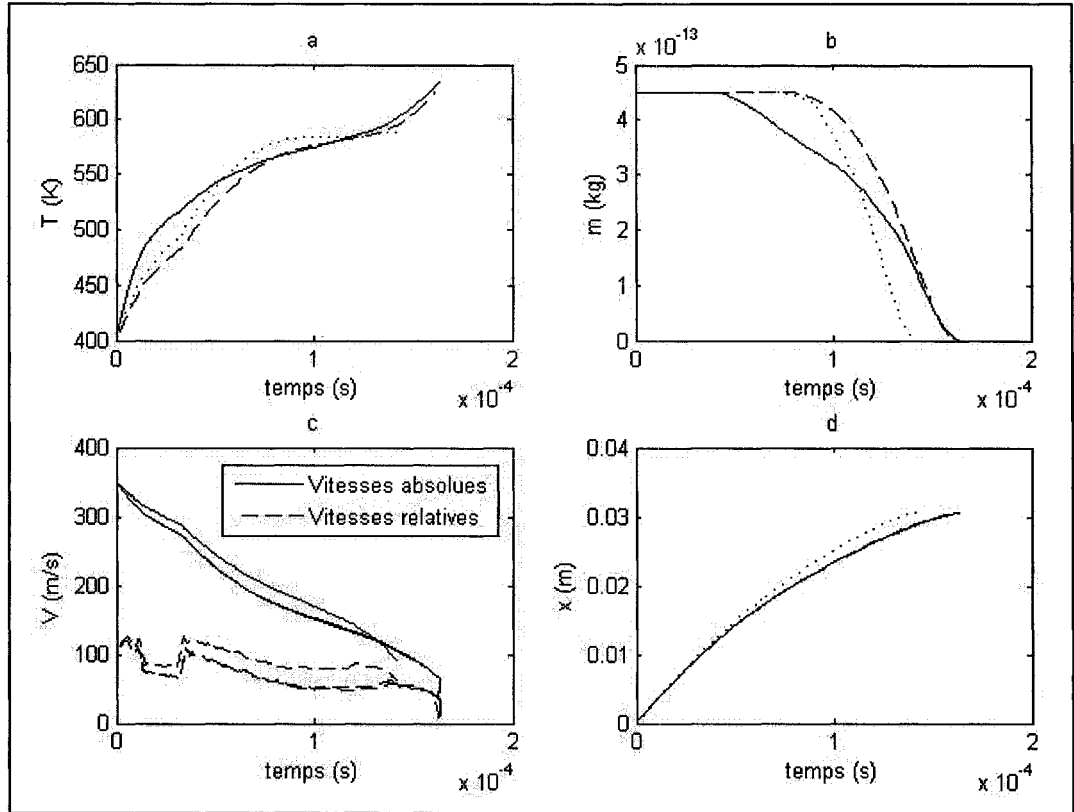
Graphique 5.7 *Évolution de la température, de la masse, de la vitesse et de la position de la gouttelette au temps moteur APMH = -7 (—DCP ; --- P ; FL).*

Pour la vitesse et la position, la différence est très faible entre les trois modèles. Ceci est normal car les mêmes équations sont utilisées au niveau de la dynamique de la gouttelette (équation 5.1 à 5.6). Les légères différences entre le modèle FL et les deux autres sont dues au fait que l'évaluation du nombre de Reynolds est différente et que les diamètres ne

sont pas calculés avec les mêmes masses volumiques. On peut voir que la gouttelette pénètre seulement de quelques millimètres dans le domaine. Au niveau de la température, on voit que le modèle FL se stabilise au environ de 600 K car c'est sa température d'ébullition alors que les deux autres ne se stabilisent pas. Finalement, on voit une différence non négligeable au niveau de l'évolution de la masse. Il est important de noter que la différence entre le modèle DCP et le modèle P est pratiquement nulle pour les quatre variables présentées au graphique 5.7. La plus grande différence est au niveau de la masse. On voit un léger effet multicomposants car le modèle DCP s'évapore plus rapidement au début (évaporation des parties plus volatiles) et moins rapidement vers la fin.

5.4.2 Cas 2 : Injection à $APMH = -5$

Le prochain cas étudié est $APMH = -5$. Les conditions ambiantes de ce cas se retrouvent au graphique 5.2. À ce temps moteur, il commence à y avoir un domaine plus froid avec une bonne quantité de vapeur de carburant contrairement au cas précédent où la température était assez élevée et qu'il n'y avait aucune fraction massique de carburant dans le milieu ambiant. L'évolution des quatre variables est présentée au graphique 5.8.



Graphique 5.8 *Évolution de la température, de la masse, de la vitesse et de la position de la gouttelette au temps moteur APMH = -5 (— DCP ; --- P ; FL).*

On peut voir premièrement que pour une bonne partie du parcours, la gouttelette pour les trois modèles ne s'évapore pas. Le débit massique calculé est donc négatif. Ceci vient du fait que la fraction massique de vapeur de carburant dans le milieu ambiant est plus élevée que celle à la surface de la gouttelette. En toute logique, une certaine condensation devrait se produire mais il n'est pas possible de déterminer si les corrélations utilisées fonctionnent toujours dans de tels cas. De plus, dans une injection, la zone à la sortie de l'injecteur est souvent caractérisée par un cône liquide (Borman et Ragland, 1998) où les gouttelettes ne sont pas encore formées. La partie la plus avancée du cône se situe sur l'axe du trou. Comme la trajectoire des gouttelettes étudiées ici suit cet axe, il est normal que ces dernières ne s'évaporent pas avant un certain temps tel que constaté au graphique 5.8. La question suivante se pose alors : si les gouttelettes ne s'évaporent pas, d'où vient la vapeur

de carburant présente? Deux raisons peuvent expliquer cette situation. Premièrement, comme toutes les gouttelettes de carburant ne suivent pas l'axe du trou, certaines se retrouvent plus au pourtour du jet. Dans cette zone, l'évaporation se produit à un rythme beaucoup plus important car la température y est plus élevée et la fraction molaire du carburant moins élevée. La vapeur de carburant générée peut se diffuser vers le centre. Deuxièmement, dû aux grandes vitesses du jet, il se produit un effet d'entraînement d'air qui aspire le mélange environnant vers le centre du jet (Borman et Ragland, 1998). La figure 5.9 présente la valeur des termes sources de vapeur de carburant sur un plan coupant l'axe du trou et l'axe du cylindre au temps $APMH = -5$.

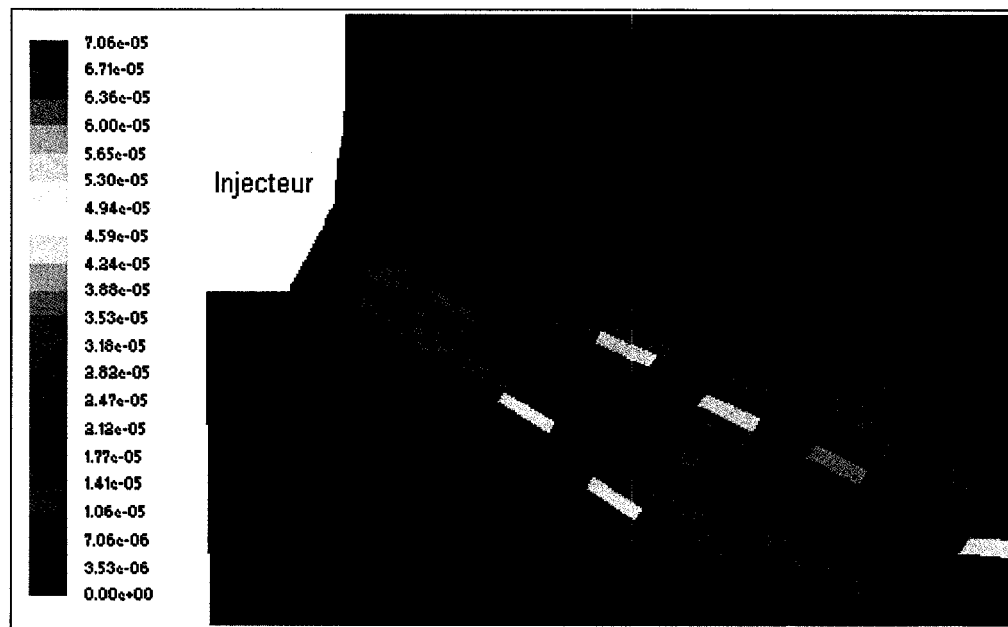


Figure 5.9 *Distribution des valeurs des termes sources causés par l'évaporation des gouttelettes près de l'injecteur.*

Les unités sont en kg/s. Ces termes sources sont générés par la phase discrète de Fluent utilisée lors de la simulation. On voit clairement que très peu de cellules touchant à l'axe du trou (ligne noire) ont une valeur supérieure à zéro. Les termes sources de ces dernières sont probablement dus à des gouttelettes redirigées vers l'intérieur du jet par l'aspiration et/ou dus à des gouttelettes redirigées vers l'intérieur du jet suite à une atomisation

secondaire. La figure 5.10 présente la pdistribution de la fraction molaire de vapeur de carburant au temps $APMH = -5$.

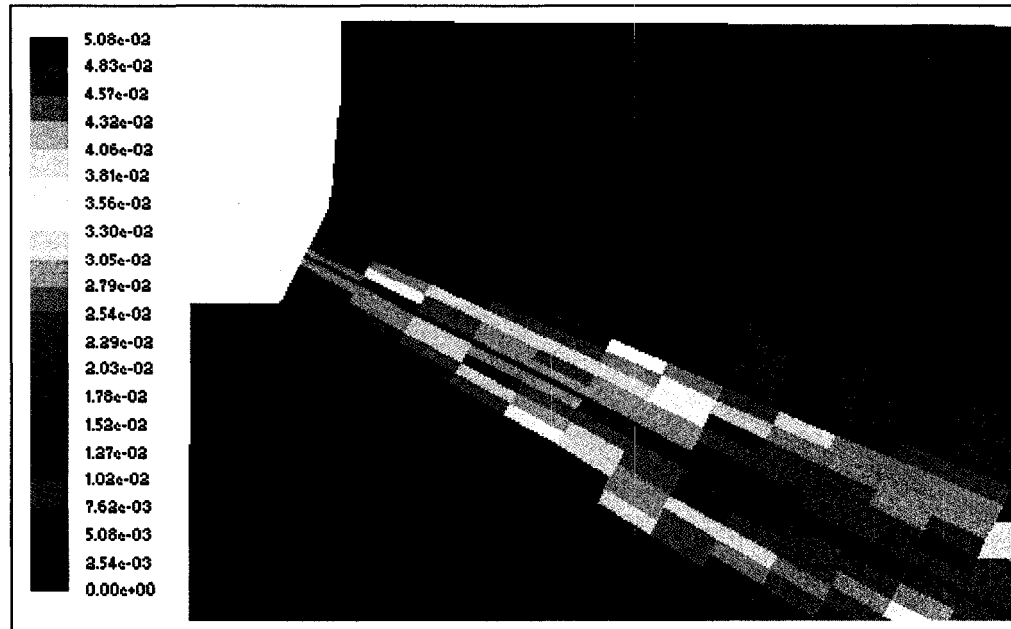
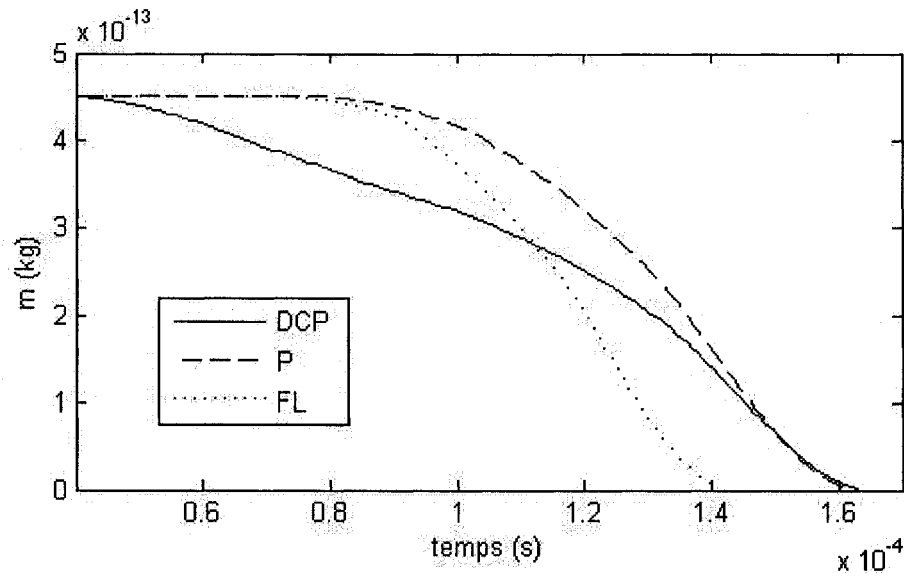


Figure 5.10 *Distribution de la fraction molaire de carburant près de l'injecteur.*

On peut voir que même si les termes sources sont pratiquement nuls aux abords de l'axe du trou, la fraction molaire y est élevée. Cette vapeur de carburant doit donc nécessairement être arrivée à ces cellules par transport (diffusion et/ou convection).

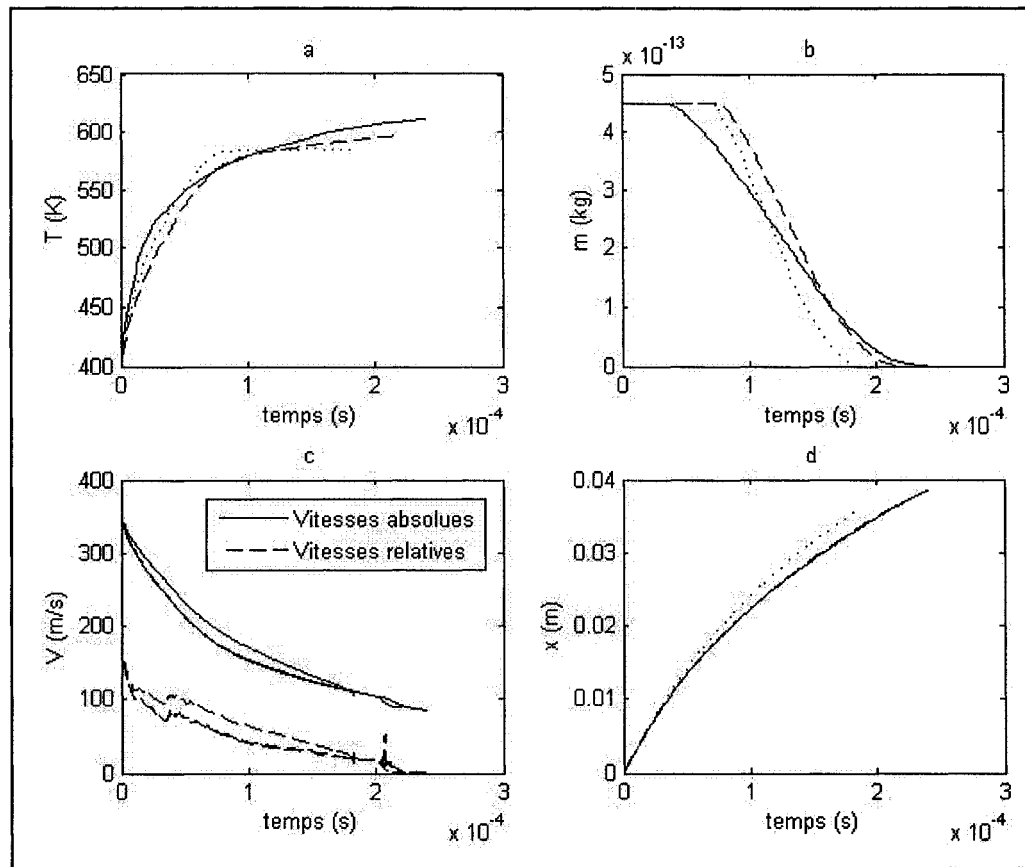
Le graphique 5.9 présente une vue agrandie de l'évolution de la masse de la gouttelette (graphique 5.8b). On peut clairement voir l'effet multicomposants. En examinant la courbe du modèle DCP, on remarque que les parties plus volatiles du carburant commencent à s'évaporer bien avant que l'évaporation débute pour les gouttelettes à substance pure (modèle P et FL). De ce fait, la distribution spatiale de la fraction molaire de carburant dans la phase vapeur devrait être influencée, du moins au niveau de l'axe du trou, à ce temps moteur.



Graphique 5.9 *Évolution de la masse de la gouttelette au temps moteur APMH = -5.*

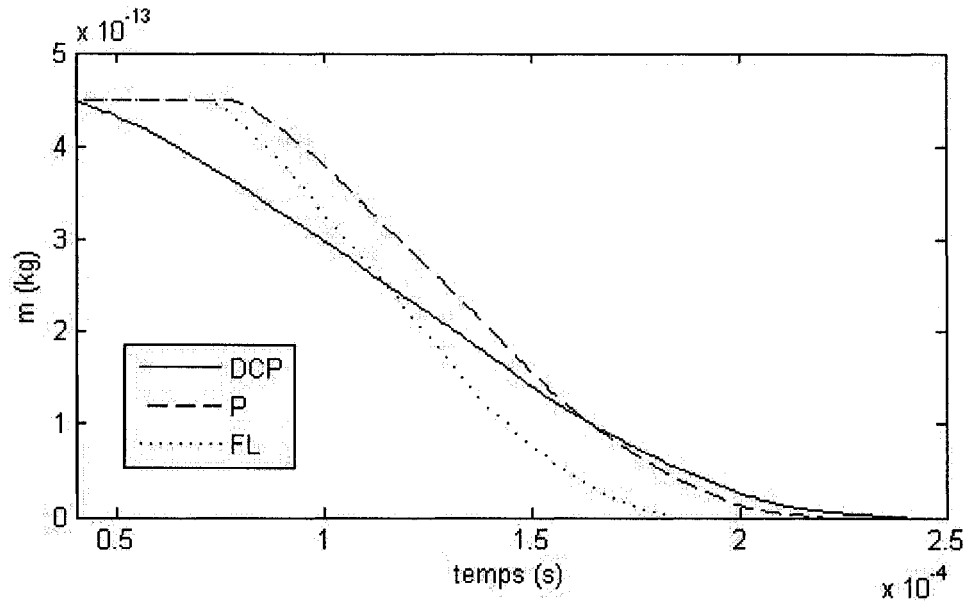
5.4.3 Cas 3 : Injection à APMH = 0

Le prochain cas étudié est APMH = 0. Ce temps moteur survient lorsque le piston atteint le PMH. À ce temps moteur, la combustion n'a pas encore commencé et les distributions de vitesse et de fraction molaire de carburant sont devenues plus stables. Le graphique 5.10 présente l'évolution des différentes variables.



Graphique 5.10 *Évolution de la température, de la masse, de la vitesse et de la position de la gouttelette au temps moteur APMH = 0 (— DCP ; - - - P ; ... FL)*

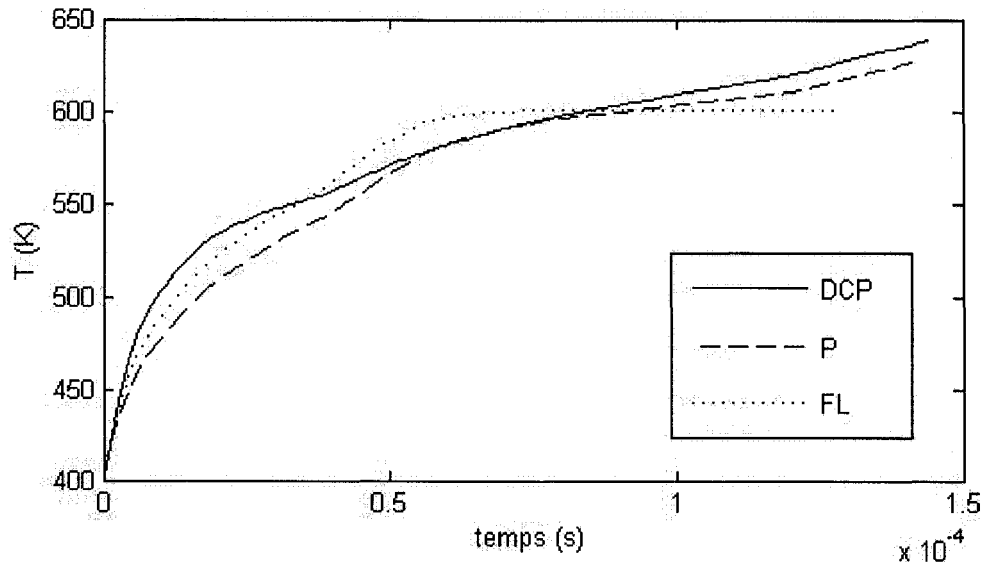
Bien que la gouttelette parcourt une plus grande distance que celle étudiée à $APMH = -5$, il existe une certaine similitude entre les deux cas. Fait intéressant, on peut encore observer l'effet multicomposants sur l'évolution de la masse de la gouttelette. Le graphique 5.11 présente une vue agrandie de l'évolution de la masse. En observant la courbe du modèle DCP, on observe une évaporation des éléments plus volatils en premier. De plus, on voit clairement que la courbe de la gouttelette du modèle DCP croise celle du modèle P. Donc les éléments les moins volatils retardent l'évaporation en fin de parcours. Afin de voir si le modèle DCP crée un effet notable lors du temps moteur durant la combustion, un dernier cas est présenté.



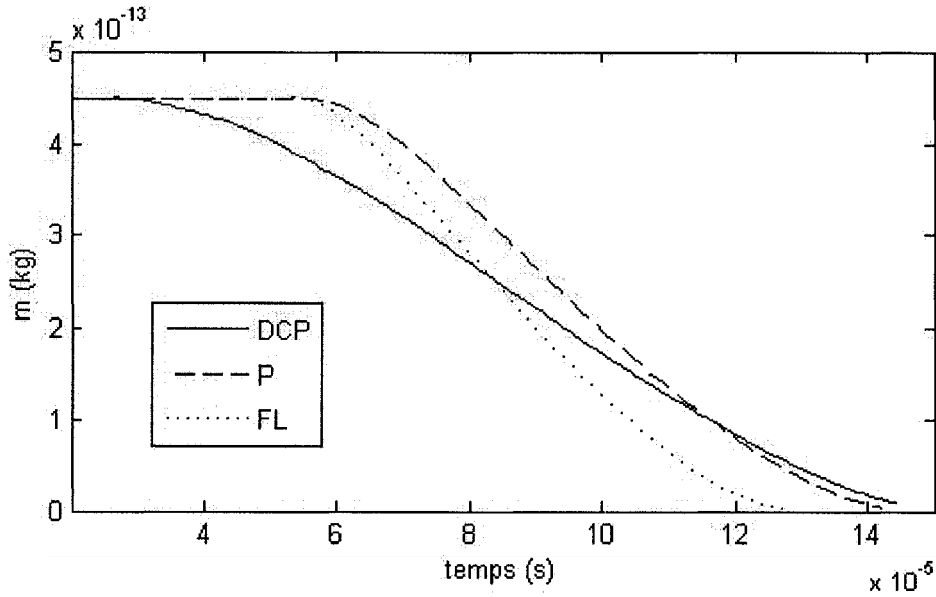
Graphique 5.11 *Évolution de la masse de la gouttelette au temps*
moteur APMH = 0.

5.4.4 Cas 4 : Injection à APMH = 5

Pour ne pas répéter inutilement la majorité des constatations déjà discutées, seule l'évolution de la température et de la masse de la gouttelette sont présentées en format agrandi. Les graphiques 5.12 et 5.13 présentent respectivement l'évolution de la température et de la masse de la gouttelette pour les trois modèles étudiés. Même lors de la combustion qui se produit à l'extérieur du jet, on peut observer une influence très notable du modèle DC sur l'évolution de la gouttelette.



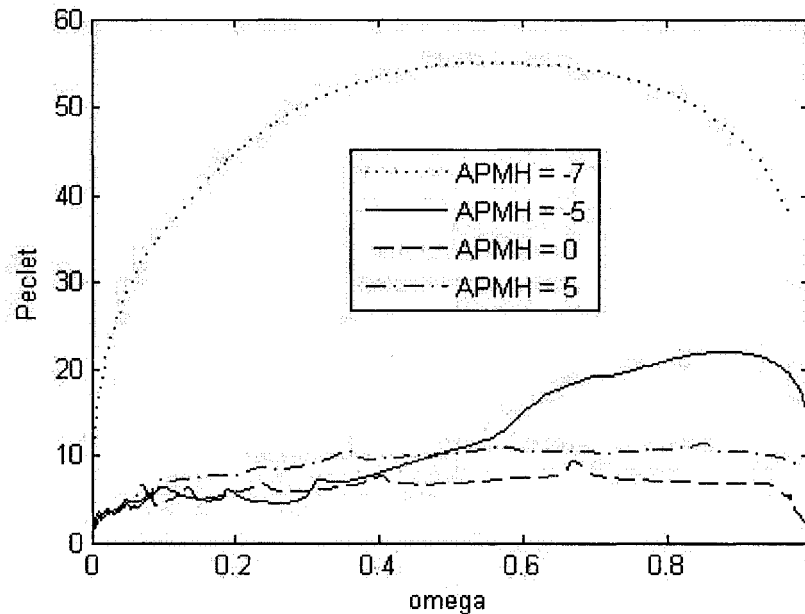
Graphique 5.12 *Évolution de la température de la gouttelette au temps moteur APMH = 5.*



Graphique 5.13 *Évolution de la masse de la gouttelette au temps moteur APMH = 5.*

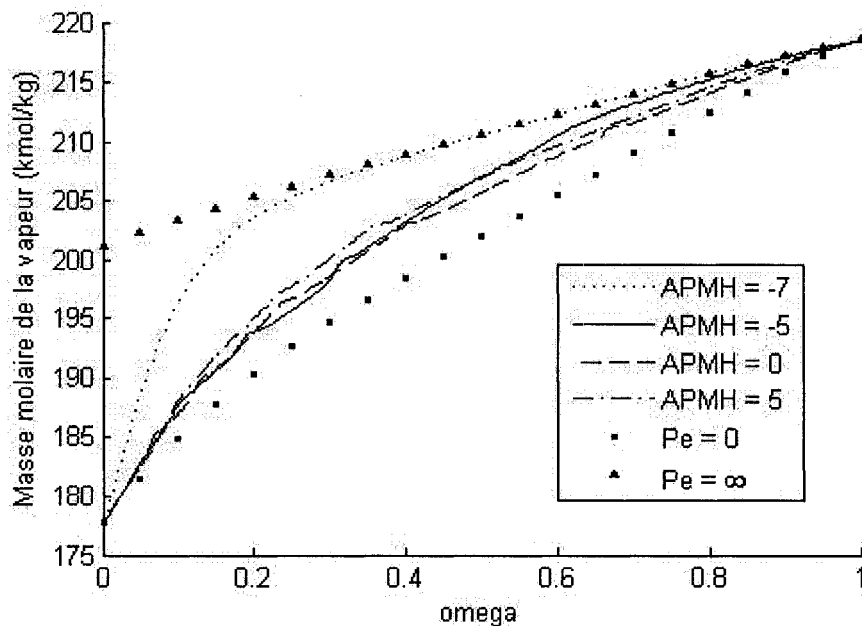
5.5 Discussion sur le modèle DC

Des quatre cas étudiés à la section précédente, trois temps moteur (APMH = -5, 0 et 5) présentent une influence notable du modèle DC sur les résultats. On ne peut cependant pas observer d'influence notable au temps APMH = -7. Il faut rappeler que le temps APMH = -7 représente seulement les conditions ambiantes que subissent les quelques premières gouttelettes injectées. Comme une influence est déjà notable au temps APMH = -5, seulement une partie des gouttelettes injectées entre ces deux temps ne seront pas vraiment influencées. Les graphiques 5.14 et 5.15 présentent l'évolution du nombre de Peclet et de la masse molaire de la vapeur de carburant en fonction de la fraction massique Ω tels que calculés par le modèle DCP pour les quatre cas étudiés.



Graphique 5.14 *Évolution du nombre de Peclet selon la fraction massique évaporée Ω pour les quatre temps moteur étudiés dans ce chapitre (modèle DCP).*

On peut voir au graphique 5.14 qu'il y a une nette différence entre les valeurs du nombre de Peclet calculé à $APMH = -7$ et les trois autres temps moteur. Ceci est dû au fait que la vitesse d'évaporation des premières gouttelettes injectées dans le domaine est très importante. Plus la vitesse d'évaporation est grande par rapport à la vitesse de diffusion des éléments volatils, plus le nombre Pe est élevé. À l'inverse, plus le nombre Pe est petit, plus l'effet multicomposants devient notable car les éléments volatils ont le temps de diffuser vers la surface et de s'évaporer en premier. On peut même voir que l'effet multicomposants est à son maximum au temps $APMH = 0$ car le nombre de Pe y est à son plus bas niveau. Le graphique 5.15 présente l'évolution de la masse molaire du n-alcane équivalent de la phase vapeur.



Graphique 5.15 *Évolution de la masse molaire de la vapeur selon la fraction massique évaporée Ω pour les quatre temps moteur étudiés dans ce chapitre (modèle DCP).*

Pour le temps $APMH = -7$, la masse molaire atteint son maximum très rapidement ce qui explique la diminution de l'effet multicomposants. Pour les trois autres cas, la masse molaire se retrouve toujours entre les deux limites.

Pour terminer, les résultats présentés dans ce chapitre montrent que le modèle DC influence l'évolution de la masse de la gouttelette. Cette observation pousse à croire que l'utilisation de ce dernier dans la simulation aurait une influence sur la distribution de la fraction molaire de carburant dans le domaine de calcul. Comme les modèles de combustion sont influencés entre autre par la fraction molaire de carburant dans les cellules où les vitesses de réaction sont calculées, il est fort possible que l'intégration du modèle DC influencerait les résultats du moins au niveau des distributions spatiales.

5.6 Conclusion du chapitre

Ce chapitre a présenté une analyse sur les effets du modèle DC sur l'évaporation des gouttelettes de carburant dans des conditions ambiantes retrouvées dans une injection directe d'un moteur diesel. En premier lieu, une description d'une simulation de moteur diesel a été présentée. Par la suite, les conditions ambiantes ont été extraites des résultats de la simulation selon l'axe du trou d'injection. En troisième lieu, la procédure de calcul présentée au chapitre 4 a été adaptée pour permettre l'utilisation de ces conditions ambiantes. Deux nouvelles variables ont été ajoutées lors des calculs de l'évolution de la gouttelette. Il s'agit de la vitesse et de la position de la gouttelette suivant l'axe du trou d'injection. Trois nuances du modèle de Ranz et Marshall ont été implémentées pour déterminer si le modèle de gouttelette de Fluent est comparable à ceux décrits jusqu'à présent et aussi pour déterminer si l'effet multicomposants du modèle DC a un effet notable sur l'évolution de la masse et la température de la gouttelette. Finalement, les résultats des calculs pour quatre temps moteur ($APMH = -7, -5, 0$ et 5) ont été présentés. Le facteur de correction présenté au chapitre 4 a été utilisé car sans son utilisation, les résultats entre l'évolution du modèle FL (Fluent) et ceux des deux autres modèles (DCP et

P) étaient trop différents pour des fins de comparaisons. L'influence du modèle DC s'est avérée notable sur l'évolution de la masse de la gouttelette pour trois des quatre temps moteur (APMH -5, 0 et 5) étudiés ce qui porte à croire que l'intégration du modèle DC dans Fluent 6.2 pourrait changer la distribution spatiale de fraction molaire de vapeur de carburant.

CONCLUSION

L'objectif de cette recherche visait à déterminer si l'utilisation d'un modèle multicomposants comme le modèle DC était pertinent dans les simulations de moteurs diesel. Ce dernier a été retenu car il est plus simple à utiliser que les autres modèles multicomposants.

Par la suite, le modèle DC a été présenté. Ce dernier est basé sur les courbes de distillation des différents carburants grands marchés. Il permet de calculer la masse molaire du n-alcane équivalent de la phase vapeur et de la phase liquide. Pour la phase vapeur, l'évaluation est basée sur le nombre de Pe et la fraction massique évaporée Ω .

Par la suite, des méthodes pour l'évaluation des propriétés sont présentées. Les propriétés de la phase vapeur sont évaluées avec plusieurs corrélations qui permettent d'inclure l'effet de la température, de la pression et de la fraction molaire d'un n-alcane équivalent. Les propriétés de la phase liquide sont aussi évaluées mais seulement en fonction de la température. Finalement, une alternative à la loi de Raoult est présentée pour calculer la fraction molaire de vapeur de carburant à la surface de la gouttelette

Par la suite, le modèle DC a été validé. Une procédure de calcul a été implantée dans Matlab 7. L'ajout d'un facteur de correction était nécessaire pour que les résultats calculés soient en bonne concordance avec les résultats expérimentaux. Les trois modèles utilisés pour quantifier le transfert de masse et de chaleur donnent des résultats fort semblables et on ne peut pas choisir avec conviction l'un plutôt que l'autre.

Finalement une analyse sur les effets du modèle DC sur l'évaporation des gouttelettes de carburant dans des conditions ambiantes retrouvées dans une injection directe d'un moteur diesel a été présentée. La procédure de calcul déjà présentée a été adaptée pour permettre

l'utilisation de ces conditions ambiantes tirées d'une simulation de moteur diesel. L'influence du modèle DC s'est avérée notable sur l'évolution de la masse de la gouttelette pour trois des quatre temps moteur (APMH -5, 0 et 5) étudiés. La particularité de ces trois temps moteurs est qu'il y a présence de carburant dans le milieu ambiant. Ceci porte à croire que l'intégration du modèle DC dans Fluent 6.2 pourrait changer la distribution spatiale de fraction molaire de vapeur de carburant.

RECOMMANDATIONS

Suite aux différentes observations sur l'étude de l'évaporation des gouttelettes dans des conditions ambiantes se rapprochant de celles rencontrées dans un moteur diesel, certaines recommandations ont été formulées. Ces dernières sont :

1. Premièrement, tenter de reproduire expérimentalement l'évolution d'une gouttelette dans des conditions ambiantes regroupant les trois variables suivantes : Température, pression et vent relatif. Le but étant de valider ou non si l'utilisation du facteur de correction est nécessaire et pourquoi.
2. Deuxièmement, tenter d'intégrer le modèle DC dans une simulation moteur pour voir si l'on peut noter une différence au niveau des distributions spatiales des différentes variables. Sur ce point, une première tentative a été faite avec Fluent 6.2 mais l'emploi des termes sources dans l'intégration s'est avéré très ardu. Une intégration totale du modèle DC nécessiterait une assez grande période de temps (de l'ordre d'une maîtrise).
3. Troisièmement, avec plus de résultats expérimentaux, des études sur d'autres phénomènes se produisant au niveau de la gouttelette pourraient être entreprises dont : la distribution de la température à l'intérieure de la gouttelette, l'atomisation secondaire et la radiation pour ne nommer que ceux-là. Tous ces phénomènes pourraient influencer plus ou moins les taux de transfert de masse et de chaleur. Cependant, sans résultats expérimentaux, ces études ressembleraient à tant d'autres déjà publiées.

ANNEXE I

Liste des propriétés de référence des n-alcane de 2 à 20 carbones

Nom	Formule chimique	Masse molaire	T _c (K)	P _c (bar)	ω (-)
Éthane	C ₂ H ₆	30,07	305,32	48,72	0,099
Propane	C ₃ H ₈	44,094	369,8	42,5	0,152
Butane	C ₄ H ₁₀	58,124	425,12	37,96	0,2
Pentane	C ₅ H ₁₂	72,151	469,7	33,7	0,252
Hexane	C ₆ H ₁₄	86,178	507,6	30,25	0,3
Heptane	C ₇ H ₁₆	100,205	540,2	27,4	0,35
Octane	C ₈ H ₁₈	114,232	568,8	24,9	0,399
Nonane	C ₉ H ₂₀	128,259	594,6	22,9	0,445
Decane	C ₁₀ H ₂₂	142,286	617,7	21,1	0,49
Undecane	C ₁₁ H ₂₄	156,313	639	19,8	0,537
Dodecane	C ₁₂ H ₂₆	170,34	658	18,2	0,576
Tridecane	C ₁₃ H ₂₈	184,367	675	16,8	0,618
Tetradecane	C ₁₄ H ₃₀	198,394	693	15,7	0,644
Pentadecane	C ₁₅ H ₃₂	212,421	708	14,8	0,685
Hexadecane	C ₁₆ H ₃₄	226,448	723	14	0,718
Heptadecane	C ₁₇ H ₃₆	240,475	736	13,4	0,753
Octadecane	C ₁₈ H ₃₈	254,504	747	12,9	0,8
Nonadecane	C ₁₉ H ₄₀	268,529	755	11,6	0,845
Eicosane	C ₂₀ H ₄₂	282,556	768	10,7	0,865

Nom	V_c (cm ³ /mol)	Z_c (-)	$V_{l,ref}$ (cm ³ /mol)	Δh_{evap} (KJ/mol)	T_{evap} (K)
Éthane	145,5	0,279	46,15	14,7	184,6
Propane	200	0,276	74,87	19,04	231,1
Butane	255	0,274	100,48	22,44	272,7
Pentane	311	0,268	115,22	25,79	309,2
Hexane	368	0,264	131,59	28,85	341,9
Heptane	428	0,261	147,47	31,77	371,6
Octane	492	0,259	163,53	34,41	398,8
Nonane	555	0,257	179,7	36,91	424
Decane	624	0,256	195,95	38,75	447,3
Undecane	689	0,257	212,24	41,2	469,1
Dodecane	754	0,251	228,59	43,4	489,5
Tridecane	823	0,246	244,94	45,65	508,6
Tetradecane	894	0,244	261,32	47,61	526,7
Pentadecane	966	0,243	277,71	49,45	543,8
Hexadecane	1034	0,241	294,11	51,21	560
Heptadecane	1103	0,242	310,45	52,89	575,2
Octadecane	1189	0,247	326,66	54,46	589,5
Nonadecane	-	-	343,25	56,02	603,1
Eicosane	-	-	361,18	57,49	617

ANNEXE II

Validation des corrélations de propriété

1. Corrélations pour la phase gazeuse

Comparaison entre les valeurs calculées et expérimentales de conductivité thermique

Substance	T (K)	P (bar)	Calculée (W/(m·K))	Expérimentale (W/(m·K))	Erreur (%)
n-hexane	373	1	0.0202	0.0201	0,5
n-hexane	433	1	0.0271	0.0273	-0,7

Comparaison entre le coefficient de diffusion binaire calculé et expérimental

Substance	T (K)	P (bar)	Calculé (m ² /s)	Expérimental (m ² /s)	Erreur (%)
Air n-hexane	294	1	7.8e-6	8.1e-6	-4,1
Air n-hexane	328	1	9.4e-6	9.4e-6	0,2

2. Corrélation pour la phase liquide

Comparaison entre la viscosité des liquides calculée et expérimentale

Substance	T (K)	Calculée (N·s/m ²)	Expérimentale (N·s/m ²)	Erreur (%)
n-hexane	273	3.70e-4	3.81e-4	-2,8
n-hexane	343	1.93e-4	2.05e-4	-5,7
n-heptane	293	4.08e-4	4.18e-4	-2,3
n-heptane	373	2.01e-4	2.09e-4	-3,8

Comparaison entre le coefficient de diffusion binaire des liquides
calculé et expérimental

Soluté	Solvent	T (K)	Calculé (m^2/s)	Expérimental (m^2/s)	Erreur (%)
Propane	n-hexane	298	5.48e-9	4.87e-9	12,6
n-hexane	n-hexane	298	3.74e-9	4.21e-9	-11,3
n-Dodécane	n-hexane	298	2.38e-9	2.73e-9	-12,3

ANNEXE III

Effet du mélange et de la pression sur la conductivité du mélange gazeux

Le calcul de la conductivité thermique d'un mélange gazeux à basse pression peut se calculer à l'aide de l'équation proposée premièrement par Wassiljewa et améliorée par Mason et Saxena (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001).

$$k_m = \sum_i \frac{x_i \cdot k_i}{\sum_j x_j \cdot A_{ij}}$$

$$A_{ij} = 1 \text{ si } i = j$$

$$A_{ij} = \frac{\left(1 + \left(k_{r_i}/k_{r_j}\right)^{1/2} \left(MM_i/MM_j\right)^{1/4}\right)^2}{\left(8 \cdot \left(1 + MM_i/MM_j\right)\right)^{1/2}} \text{ si } i \neq j$$

$$\frac{k_{r_i}}{k_{r_j}} = \frac{\Gamma_j \left(\exp(0.0464 \cdot T_{r_i}) - \exp(-0.2412 \cdot T_{r_i}) \right)}{\Gamma_i \left(\exp(0.0464 \cdot T_{r_j}) - \exp(-0.2412 \cdot T_{r_j}) \right)}$$

où k_m est la conductivité du mélange. Pour inclure l'effet de la pression sur le mélange, la procédure de Stiel et Thodos (Poling, Prausnitz et O'Connell, 2001) est employée. Cette procédure fut développée a priori pour les substances pures. Leurs corrélations sont basées sur l'hypothèse que la différence entre la conductivité thermique à haute pression et celle à pression ambiante est fonction de la masse volumique.

$$k - k^\circ = \frac{1.22 \times 10^{-2} \cdot (\exp(0.535 \cdot \rho_r) - 1)}{\Gamma \cdot Z_c^5} \quad \rho_r < 0.5$$

$$k - k^\circ = \frac{1.14 \times 10^{-2} \cdot (\exp(0.67 \cdot \rho_r) - 1.069)}{\Gamma \cdot Z_c^5} \quad 0.5 < \rho_r < 2.0$$

$$k - k^\circ = \frac{2.60 \times 10^{-3} \cdot (\exp(1.155 \cdot \rho_r) + 2.016)}{\Gamma \cdot Z_c^5} \quad 2.0 < \rho_r < 2.8$$

$$\rho_r = \frac{\rho}{\rho_c} = \frac{V_c}{V}$$

Pour utiliser ces équations avec un mélange, on calcul premièrement la conductivité du mélange à basse pression k_m° à l'aide de l'équation proposée premièrement par Wassiljewa et améliorée par Mason et Saxena. Par la suite, on calcule l'effet de la pression avec la procédure de Stiel et Thodos en utilisant les paramètres suivants :

$$T_{cm} = \frac{\sum_i \sum_j x_i \cdot x_j \cdot V_{cij} \cdot T_{cij}}{V_{cm}}$$

$$V_{cm} = \sum_i \sum_j x_i \cdot x_j \cdot V_{cij}$$

$$\omega_m = \sum_i x_i \cdot \omega_i$$

$$Z_{cm} = 0.291 - 0.08 \cdot \omega_m$$

$$P_{cm} = \frac{Z_{cm} \cdot R \cdot T_{cm}}{V_{cm}}$$

$$MM_m = \sum_i x_i \cdot MM_i$$

$$T_{cij} = T_{ci} \quad \text{si } i = j$$

$$T_{cij} = (T_{ci} \cdot T_{cj})^{1/2} \quad \text{si } i \neq j$$

$$V_{cij} = V_{ci} \quad \text{si } i = j$$

$$V_{cij} = \frac{(V_{ci}^{1/3} + V_{cj}^{1/3})^3}{8} \quad \text{si } i \neq j$$

La méthode de Stiel et Thodos pour déterminer la conductivité thermique à haute pression nécessite l'évaluation du volume molaire à une certaine pression et température. Cette évaluation est faite avec la loi des gaz parfaits.

ANNEXE IV

Table de Lee et Kesler pour calculs de la chaleur spécifique des gaz

Tel que présenté dans la section 3.3.4, on peut calculer l'effet de la pression avec les équations suivantes :

$$C_{Pm} = C_{Pm}^{\circ} + \Delta C_{Pm}$$

$$\Delta C_{Pm} = (\Delta C_P)^{(0)} + \omega \cdot (\Delta C_P)^{(1)}$$

$$(\Delta C_P)^{(0)} = f(T_r, P_r)$$

$$(\Delta C_P)^{(1)} = f(T_r, P_r)$$

Lee et Kesler n'utilisent pas exactement les mêmes équations. La seule différence est qu'ils divisent chaque terme par la constante universelle des gaz.

$$\frac{C_{Pm}}{R} = \frac{C_{Pm}^{\circ}}{R} + \frac{\Delta C_{Pm}}{R}$$

$$\frac{\Delta C_{Pm}}{R} = \left(\frac{\Delta C_P}{R} \right)^{(0)} + \omega \cdot \left(\frac{\Delta C_P}{R} \right)^{(1)}$$

Les chiffres fournis dans les deux tables suivantes sont donc une évaluation des termes :

$$\left(\frac{\Delta C_P}{R} \right)^{(0)} : \text{voir première table}$$

$$\left(\frac{\Delta C_P}{R} \right)^{(1)} : \text{voir seconde table}$$

On peut calculer la chaleur spécifique en kJ/(kg·K) en utilisant l'équation suivante :

$$C_{Pm} = \frac{C_{Pm}^{\circ} + \left(\left(\frac{\Delta C_P}{R} \right)^{(0)} \cdot R + \omega_m \cdot \left(\frac{\Delta C_P}{R} \right)^{(1)} \cdot R \right)}{MM_m}$$

où C_{pm}° est la chaleur spécifique en J/(mol·K) du mélange sous la forme de gaz parfait.

Les cases ombragées sont celles où une valeur est ajoutée ou modifiée. (voir section 3.3.4)

$$\left(\frac{\Delta C_P}{R}\right)^{(0)}$$

T _r	P _r														
	0.010	0.050	0.100	0.200	0.400	0.600	0.800	1.000	1.200	1.500	2.000	3.000	5.000	7.000	10.000
0.30	2.805	2.807	2.809	2.814	2.83	2.842	2.854	2.866	2.878	2.896	2.927	2.989	3.122	3.257	3.466
0.35	2.808	2.81	2.812	2.815	2.823	2.835	2.844	2.853	2.861	2.875	2.897	2.944	3.042	3.145	3.313
0.40	2.925	2.926	2.928	2.933	2.935	2.94	2.945	2.951	2.956	2.965	2.979	3.014	3.085	3.164	3.293
0.45	2.989	2.99	2.99	2.991	2.993	2.995	2.997	2.999	3.002	3.006	3.014	3.032	3.079	3.135	3.232
0.50	3.006	3.005	3.004	3.003	3.001	3	2.998	2.997	2.996	2.995	2.995	2.999	3.019	3.054	3.122
0.55	0.118	3.002	3	2.997	2.99	2.984	2.978	2.973	2.968	2.961	2.951	2.938	2.934	2.947	2.988
0.60	0.089	3.009	3.006	2.999	2.986	2.974	2.963	2.952	2.942	2.927	2.907	2.874	2.84	2.831	2.847
0.65	0.069	0.387	3.047	3.036	3.014	2.993	2.973	2.955	2.938	2.914	2.878	2.822	2.753	2.72	2.709
0.70	0.054	0.298	0.687	3.138	3.099	3.065	3.033	3.003	2.975	2.937	2.881	2.792	2.681	2.621	2.582
0.75	0.044	0.236	0.526	3.351	3.284	3.225	3.171	3.122	3.076	3.015	2.928	2.795	2.629	2.537	2.469
0.80	0.036	0.191	0.415	1.032	3.367	3.537	3.44	3.354	3.277	3.176	3.038	2.838	2.601	2.473	2.373
0.85	0.03	0.157	0.336	0.794	4.404	4.158	3.957	3.79	3.647	3.47	3.24	2.931	2.599	2.427	2.292
0.90	0.025	0.131	0.277	0.633	1.858	5.679	5.095	4.677	4.359	4	3.585	3.096	2.626	2.399	2.227
0.93	0.023	0.118	0.249	0.56	1.538	4.208	6.72	5.766	5.149	4.533	3.902	3.236	2.657	2.392	2.195
0.95	0.021	0.111	0.232	0.518	1.375	3.341	9.316	7.172	6.01	5.05	4.18	3.351	2.684	2.391	2.175
0.97	0.02	0.104	0.217	0.48	1.24	2.778	9.585	10.011	7.451	5.785	4.531	3.486	2.716	2.393	2.159
0.98	0.019	0.101	0.21	0.463	1.181	2.563	7.35	13.27	8.611	6.279	4.743	3.56	2.733	2.395	2.151
0.99	0.019	0.098	0.204	0.447	1.126	2.378	6.038	21.948	10.362	6.687	4.983	3.641	2.752	2.398	2.144
1.00	0.018	0.095	0.197	0.431	1.076	2.218	5.156	26	13.281	7.686	5.255	3.729	2.773	2.401	2.138
1.01	0.018	0.092	0.191	0.417	1.029	2.076	4.516	22.295	18.967	8.708	5.569	3.821	2.794	2.405	2.131
1.02	0.017	0.089	0.185	0.403	0.986	1.951	4.025	13.184	31.353	10.062	5.923	3.92	2.816	2.408	2.125
1.05	0.016	0.082	0.169	0.365	0.872	1.648	3.047	6.458	20.234	16.457	7.296	4.259	2.891	2.425	2.11
1.10	0.014	0.071	0.147	0.313	0.745	1.297	2.168	3.649	6.51	13.256	9.787	4.927	3.033	2.462	2.093
1.15	0.012	0.063	0.128	0.271	0.612	1.058	1.67	2.553	3.885	6.985	9.094	5.535	3.186	2.508	2.083
1.20	0.011	0.055	0.113	0.237	0.525	0.885	1.345	1.951	2.758	4.43	6.911	5.71	3.326	2.555	2.079
1.30	0.009	0.044	0.089	0.185	0.4	0.651	0.946	1.297	1.711	2.458	3.85	4.793	3.452	2.628	2.077
1.40	0.007	0.036	0.072	0.149	0.315	0.502	0.711	0.946	1.208	1.65	2.462	3.573	3.282	2.626	2.068
1.50	0.006	0.029	0.06	0.122	0.255	0.399	0.557	0.728	0.912	1.211	1.747	2.647	2.917	2.525	2.038
1.60	0.005	0.025	0.05	0.101	0.21	0.326	0.449	0.58	0.719	0.938	1.321	2.016	2.508	2.347	1.978
1.70	0.004	0.021	0.042	0.086	0.176	0.271	0.371	0.475	0.583	0.752	1.043	1.586	2.128	2.13	1.889
1.80	0.004	0.018	0.036	0.073	0.15	0.229	0.311	0.397	0.484	0.619	0.848	1.282	1.805	1.907	1.778
1.90	0.003	0.016	0.031	0.063	0.129	0.196	0.265	0.336	0.409	0.519	0.706	1.06	1.538	1.696	1.656
2.00	0.003	0.014	0.027	0.055	0.112	0.17	0.229	0.289	0.35	0.443	0.598	0.893	1.132	1.505	1.531
2.20	0.002	0.011	0.021	0.043	0.086	0.131	0.175	0.22	0.265	0.334	0.446	0.661	0.998	1.191	1.292
2.40	0.002	0.009	0.017	0.034	0.069	0.104	0.138	0.173	0.208	0.261	0.347	0.51	0.779	0.956	1.086
2.60	0.001	0.007	0.014	0.028	0.056	0.084	0.112	0.14	0.168	0.21	0.278	0.407	0.624	0.78	0.917
2.80	0.001	0.006	0.012	0.023	0.046	0.07	0.093	0.116	0.138	0.172	0.227	0.332	0.512	0.647	0.779
3.00	0.001	0.005	0.01	0.02	0.039	0.058	0.078	0.097	0.116	0.144	0.19	0.227	0.427	0.545	0.668
3.50	0.001	0.003	0.007	0.013	0.027	0.04	0.053	0.066	0.079	0.098	0.128	0.187	0.289	0.374	0.472
4.00	0	0.002	0.005	0.01	0.019	0.029	0.038	0.048	0.057	0.071	0.093	0.135	0.209	0.272	0.35
10.00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

$$\left(\frac{\Delta C_p}{R}\right)^{(1)}$$

T _r	P _r															
	0,010	0,050	0,100	0,200	0,400	0,600	0,800	1,000	1,200	1,500	2,000	3,000	5,000	7,000	10,000	
0,30	8,462	8,445	8,424	8,381	8,281	8,192	8,102	8,011	7,92	7,785	7,588	7,103	6,27	5,372	4,02	
0,35	9,775	9,762	9,746	9,713	9,646	9,568	9,499	9,43	9,36	9,256	9,08	8,728	8,013	7,29	6,285	
0,40	11,494	11,484	11,471	11,438	11,394	11,343	11,291	11,24	11,188	11,11	10,98	10,709	10,17	9,625	8,803	
0,45	12,651	12,643	12,633	12,613	12,573	12,532	12,492	12,451	12,409	12,347	12,243	12,029	11,592	11,183	10,533	
0,50	13,111	13,106	13,099	13,084	13,055	13,025	12,995	12,964	12,933	12,886	12,805	12,639	12,288	11,946	11,419	
0,55	0,511	13,035	13,03	13,021	13,002	12,981	12,961	12,939	12,917	12,882	12,823	12,695	12,407	12,103	11,673	
0,60	0,345	12,679	12,675	12,668	12,653	12,637	12,62	12,589	12,574	12,55	12,506	12,407	12,165	11,905	11,526	
0,65	0,242	1,518	12,148	12,145	12,137	12,128	12,117	12,105	12,092	12,06	12,026	11,943	11,728	11,494	11,141	
0,70	0,174	1,026	2,698	11,557	11,564	11,563	11,559	11,553	11,536	11,524	11,495	11,416	11,208	10,985	10,661	
0,75	0,129	0,726	1,747	10,967	10,955	11,011	11,019	11,024	11,022	11,012	10,986	10,898	10,677	10,448	10,132	
0,80	0,097	0,532	1,212	3,511	10,49	10,536	10,566	10,583	10,59	10,587	10,556	10,466	10,176	9,917	9,591	
0,85	0,075	0,399	0,879	2,247	9,999	10,153	10,245	10,297	10,321	10,324	10,278	10,111	9,74	9,433	9,075	
0,90	0,058	0,306	0,658	1,563	5,486	9,793	10,18	10,349	10,409	10,401	10,279	9,94	9,389	8,999	8,592	
0,93	0,05	0,263	0,56	1,289	3,89	10,5	10,285	10,769	10,875	10,801	10,523	9,965	9,225	8,766	8,322	
0,95	0,046	0,239	0,505	1,142	3,215	9,389	9,993	11,42	11,607	11,387	10,865	10,055	9,136	8,621	8,152	
0,97	0,042	0,217	0,456	1,018	2,712	6,588	11,2	13,001	11,8	12,498	11,445	10,215	9,061	8,485	7,986	
0,98	0,04	0,207	0,434	0,962	2,506	5,711	11,7	13,2	11,6	12,8	11,856	10,323	9,037	8,42	7,905	
0,99	0,038	0,198	0,414	0,911	2,324	5,027	11,6	13,1	11,2	12,7	12,388	10,457	9,011	8,359	7,826	
1,00	0,037	0,189	0,394	0,863	2,162	4,477	10,511	12,5	10,7	12,4	13,081	10,617	8,99	8,293	7,747	
1,01	0,035	0,181	0,376	0,819	2,016	4,026	8,437	11,7	10,1	11,9	13,7	10,805	8,973	8,236	7,67	
1,02	0,034	0,173	0,359	0,778	1,884	3,648	7,044	10,6	9,5	11,2	14,1	11,024	8,96	8,182	7,595	
1,05	0,03	0,152	0,313	0,669	1,559	2,812	4,679	7,173	7,2	8,5	14,3	11,852	8,939	8,018	7,377	
1,10	0,024	0,123	0,252	0,528	1,174	1,968	2,919	3,877	4,002	3,927	12,1	13,2	8,933	7,759	7,031	
1,15	0,02	0,101	0,205	0,424	0,91	1,46	2,048	2,587	2,844	2,236	7,716	12,812	8,849	7,504	6,702	
1,20	0,016	0,083	0,168	0,345	0,722	1,123	1,527	1,881	2,095	1,962	2,965	9,494	8,508	7,206	6,634	
1,30	0,012	0,058	0,116	0,235	0,476	0,715	0,938	1,129	1,264	1,327	1,288	3,855	6,758	6,365	5,735	
1,40	0,008	0,042	0,083	0,166	0,329	0,484	0,624	0,743	0,833	0,904	0,905	1,652	4,524	5,193	5,035	
1,50	0,006	0,03	0,061	0,12	0,235	0,342	0,437	0,517	0,58	0,639	0,666	0,907	2,823	3,944	4,289	
1,60	0,005	0,023	0,045	0,089	0,173	0,249	0,317	0,374	0,419	0,466	0,499	0,601	1,755	2,871	3,545	
1,70	0,003	0,017	0,034	0,068	0,13	0,187	0,236	0,278	0,312	0,349	0,38	0,439	1,129	2,06	2,867	
1,80	0,003	0,013	0,027	0,052	0,1	0,143	0,18	0,212	0,238	0,267	0,296	0,337	0,764	1,483	2,287	
1,90	0,002	0,011	0,021	0,041	0,078	0,111	0,14	0,164	0,185	0,209	0,234	0,267	0,545	1,085	1,817	
2,00	0,002	0,008	0,017	0,032	0,062	0,088	0,11	0,13	0,146	0,166	0,187	0,217	0,407	0,812	1,466	
2,20	0,001	0,005	0,011	0,021	0,04	0,057	0,072	0,085	0,096	0,11	0,126	0,15	0,256	0,492	0,941	
2,40	0,001	0,004	0,007	0,014	0,028	0,039	0,049	0,058	0,066	0,076	0,089	0,109	0,18	0,329	0,644	
2,60	0,001	0,003	0,005	0,01	0,02	0,028	0,035	0,042	0,048	0,056	0,066	0,084	0,137	0,289	0,466	
2,80	0	0,002	0,004	0,008	0,014	0,021	0,026	0,031	0,036	0,042	0,051	0,067	0,11	0,187	0,356	
3,00	0	0,001	0,003	0,006	0,011	0,016	0,02	0,024	0,028	0,033	0,041	0,055	0,092	0,153	0,285	
3,50	0	0,001	0,002	0,003	0,005	0,009	0,012	0,015	0,017	0,021	0,026	0,038	0,067	0,108	0,19	
4,00	0	0,001	0,001	0,002	0,004	0,006	0,008	0,01	0,012	0,015	0,019	0,029	0,054	0,085	0,146	
10,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

BIBLIOGRAPHIE

- Abramzon, B., et W. A. Sirignano. 1989. « Droplet vaporization model for spray combustion calculations ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 32, n° 9, p. 1605-1618.
- Abramzon, B., et S. Sazhin. 2005. « Droplet vaporization model in the presence of thermal radiation ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 48, n° 9, p. 1868-1873.
- Aggarwal, Suresh K. 1987. « Modeling of a dilute vaporizing multicomponent fuel spray ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 30, n° 9, p. 1949-1961.
- Borman, Gary L., et Kenneth W. Ragland. 1998. *Combustion engineering*. Boston: McGraw-Hill, xxv, 613 p.
- Burger, M., R. Schmehl, K. Prommersberger, O. Schafer, R. Koch et S. Wittig. 2003. « Droplet evaporation modeling by the distillation curve model: accounting for kerosene fuel and elevated pressures ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 46, n° 23, p. 4403-4412.
- Chin, J. S. 1994. « An Engineering Calculation Method for Multi-Component Stagnant Droplet Evaporation With Finite Diffusivity ». In *International Gas Turbine and Aeroengine Congress and Exposition* (13-16 juin 1994). Hague, Holland: ASME.
- Choi, C. Y., et R. D. Reitz. 1999. « A Numerical Analysis of the Emissions Characteristics of Biodiesel Blended Fuels ». *ASME Journal of Gas Turbines and Power*, vol. 121, p. 31-37.
- Fluent. 2005. *Fluent 6.2, User's guide*.
- Gauthier, J. E. D., M. F. Bardon et V. K. Rao. 1991. « Combustion Characteristics of Multicomponent Fuels under Cold Starting Condition in a Gas Turbine ». In *International Gas Turbine and Aeroengine Congress and Exposition* (3-6 juin 1991). Orlando, US: ASME.

- Ghassemi, Hojat, Seung Wook Baek et Qasim Sarwar Khan. 2006. « Experimental study on evaporation of kerosene droplets at elevated pressures and temperatures ». *Combustion Science and Technology*, vol. 178, n° 9, p. 1669-1684.
- Incropera, Frank P., et David P. DeWitt. 2002. *Fundamentals of heat and mass transfer*, 5th. New York: J. Wiley, xix, 981 p.
- Knapp, H. 1982. *Vapor-liquid equilibria for mixtures of low-boiling substances*. Coll. «Chemistry data series ; v. 6. ». [Frankfurt/Main, Federal Republic of Germany]Great Neck, NY: Dechema ;Distributed by Scholium International, 4 v.
- Kong, Song-Chang, Zhiyu Han et Rolf D. Reitz. 1995. « The Development and Application of a Diesel Ignition and Combustion Model for Multidimensional Engine Simulation ». In *International Congress and Exposition*. Coll. « SAE Technical Paper Series ». Detroit, Michigan, US.
- Kong, Song-Chang, Laura M. Ricart et Rolf D. Reitz. 1995. « In-Cylinder Diesel Flame Imaging Compared with Numerical Computations ». In *International Congress and Exposition*. Coll. « SAE Technical Paper Series ». Detroit, Michigan, US.
- Kuo, Kenneth K. 1986. *Principles of combustion*. New York: Wiley, xxiii, 810 p.
- Makino, A., et C. K. Law. 1988. « On the controlling parameter in the gasification behavior of multicomponent droplets ». *Combustion and Flame*, vol. 73, n° 3, p. 331-336.
- MathWorks, The. 2005. *Matlab 7 user guide*.
- Matlosz, R. L., S. Leipziger et T. P. Torda. 1972. « Investigation of liquid drop evaporation in a high temperature and high pressure environment ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 15, n° 4, p. 831-846.
- Poling, Bruce E., J. M. Prausnitz et John P. O'Connell. 2001. *The properties of gases and liquids*, 5th. New York: McGraw-Hill, 1 v.

- Prommersberger, K., G. Maider et S. Wittig. 1998. « Validation and Application of a Droplet Evaporation Model for Real Aviation Fuel ». In *RTO AVT Symposium on "Gas Turbine Engine Combustion, Emissions and Alternative Fuels* (12-16 octobre 1998). Lisbon, Portugal: .
- Ranz, W. E., et Jr W. R. Marshall. 1952. « Evaporation from drops ». *Chemical Engineering Progress*, vol. 48, n° 4, p. 173-180.
- Reid, Robert C., J. M. Prausnitz et Bruce E. Poling. 1987. *The properties of gases and liquids*, 4th. New York: McGraw-Hill, x, 741 p.
- Runge, T., et M. Teske. 1998. « Low-temperature vaporization of JP-4 and JP-8 fuel droplets ». *Atomization and Sprays*, vol. 8, p. 25-40.
- Sazhin, S. S., P. A. Krutitskii, W. A. Abdelghaffar, E. M. Sazhina, S. V. Mikhalovsky, S. T. Meikle et M. R. Heikal. 2004. « Transient heating of diesel fuel droplets ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 47, n° 14-16, p. 3327-3340.
- Sazhin, S. S., W. A. Abdelghaffar, E. M. Sazhina et M. R. Heikal. 2005. « Models for droplet transient heating: Effects on droplet evaporation, ignition, and break-up ». *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 44, n° 7, p. 610-622.
- Seers, Patrice. 2006. *Notes de cours (MEC-737)*.
- Siebers, Dennis L. 1998. « Liquid-Phase Fuel Penetration in Diesel Sprays ». In *International Congress and Exposition*. Coll. « SAE Technical Paper Series ». Detroit, Michigan, US.
- Sirignano, William A. 1993. « Fluid Dynamics of Sprays - 1992 Freeman Scholar Lecture ». *ASME Journal of Fluids Engineering*, vol. 115, p. 345-378.
- Stiesch, Gunnar. 2003. *Modeling engine spray and combustion processes*. Coll. « Heat and mass transfer. ». Berlin ; New York: Springer, xv, 282 p.

- Yong, Yi, et Rolf D. Reitz. 2003. « Modeling the Effect of Primary Atomization on Diesel Engine Emissions ». In *2003 SAE World Congress*. Coll. « SAE Technical Paper Series ». Detroit, Michigan, US.
- Yuen, M. C., et L. W. Chen. 1978. « Heat-transfer measurements of evaporating liquid droplets ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 21, n° 5, p. 537-542.
- Zhu, G. S., et S. K. Aggarwal. 2000. « Transient supercritical droplet evaporation with emphasis on the effects of equation of state ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 43, n° 7, p. 1157-1171.
- Zhu, Guang-Sheng, et Rolf D. Reitz. 2002. « A model for high-pressure vaporization of droplets of complex liquid mixtures using continuous thermodynamics ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 45, n° 3, p. 495-507.
- Zhu, Guang-Sheng, Rolf D. Reitz et Suresh K. Aggarwal. 2001. « Gas-phase unsteadiness and its influence on droplet vaporization in sub- and super-critical environments ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 44, n° 16, p. 3081-3093.