



MODELISATION 1D DE LA COMBUSTION DIESEL APPLICATION A UN MOTEUR AUTOMOBILE

G. Ma

► **To cite this version:**

G. Ma. MODELISATION 1D DE LA COMBUSTION DIESEL APPLICATION A UN MOTEUR AUTOMOBILE. Milieux fluides et réactifs. Ecole Centrale Nantes, 2013. Français. <tel-01207630>

HAL Id: tel-01207630

<https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-01207630>

Submitted on 1 Oct 2015

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Thèse de Doctorat

Guanqin MA

*Mémoire présenté en vue de l'obtention du
grade de Docteur de l'Ecole Centrale de Nantes
sous le label de L'Université Nantes Angers Le Mans*

École doctorale : Sciences pour l'Ingénieur, Géosciences, Architecture

Discipline : Energétique, thermique, combustion

Unité de recherche : Laboratoire de Recherche en Hydrodynamique Énergétique et
Environnement Atmosphérique

Soutenu le 11 Octobre 2013

MODELISATION 1D DE LA COMBUSTION DIESEL APPLICATION A UN MOTEUR AUTOMOBILE

JURY

Présidente : **Mme Céline MORIN**, Professeur, Laboratoire TEMPO Université de Valenciennes et du Hainaut-Cambrésis

Rapporteurs : **M. Pascal HIGELIN**, Professeur, Laboratoire PRISME, Polytech' Orléans
M. Luis LE MOYNE, Professeur, Laboratoire DRIVE ISAT Nevers

Examineurs : **M. Romain LEBAS**, Ingénieur de Recherche, IFP Energie Nouvelles
M. Alain MAIBOOM, Maître de Conférences, LHEEA Ecole Centrale de Nantes

Directeur de Thèse : **M. Xavier TAUZIA**, Maître de Conférences – HDR, LHEEA Ecole Centrale de Nantes

Remerciements

Les travaux de recherche présentés dans ce mémoire ont été effectués au sein de l'équipe Thermodynamique des Systèmes Moteurs (TSM) du Laboratoire de Recherche en Hydrodynamique, Énergétique et Environnement Atmosphérique (LHEEA UMR CNRS 6598) de l'Ecole Centrale de Nantes.

Je voudrais tout d'abord remercier les personnes sans qui cette thèse n'aurait pu voir le jour : M. Pascal Chessé, responsable de l'équipe TSM, pour m'avoir accueilli dans son équipe, M. Xavier Tauzia, qui a initié la thèse et est aussi le directeur de la thèse et M. Alain Maiboom pour avoir participé à l'encadrement de cette thèse.

Je remercie M. Pascal Higelin et M. Luis Le Moyne, pour leurs critiques constructives de mes travaux dont ils ont été les rapporteurs, ainsi que Mme Céline Morin et M. Romain Lebas pour avoir accepté de faire partie du jury.

Je souhaite vivement remercier M. Christian Caillol, Maître de Conférences à l'institut PRISME d'Orléans, pour avoir participé à mon comité de suivi de thèse. J'associe à ces remerciements M. Nicolas Bordet, ancien doctorant de l'institut PRISME et Pascal Higelin, pour les échanges constructifs et leurs nombreux conseils lors du développement du modèle.

Je tiens à adresser mes remerciements à toutes les personnes du LHEEA, qui m'ont aidé dans mes travaux et pour mon séjour en France.

Je tiens également à remercier le Conseil des bourses du gouvernement chinois (CSC), qui m'a fourni l'opportunité d'avoir le financement, et M. Li Guoxiu, professeur de l'Université Jiaotong de Pékin en Chine, qui a dirigé mes études en Chine.

Enfin, toute ma reconnaissance et remerciements particuliers à Xavier Tauzia et Alain Maiboom pour avoir assuré avec rigueur et dynamisme l'encadrement au quotidien de la thèse, et pour le temps considérable qu'ils m'ont consacré.

Mes dernières pensées vont à mes amis, mes parents, et spécialement ma femme, Xi, qui m'a toujours soutenu.

Sommaire

SOMMAIRE	I
NOMENCLATURE	V
INTRODUCTION	XI
CHAPITRE 1 : ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE – CARACTERISATION ET MODELISATION DE LA COMBUSTION DIESEL	1
1.1 GENERALITES SUR LA COMBUSTION DIESEL	2
1.1.1 LE DELAI D’INFLAMMATION	3
1.1.1.1 <i>Les principes fondamentaux de l’auto-inflammation</i>	3
1.1.1.2 <i>Influence des propriétés du carburant sur le délai</i>	4
1.1.1.3 <i>Influence des paramètres « moteurs » sur le délai</i>	5
1.1.2 LE COMPORTEMENT DU SPRAY DE CARBURANT	7
1.1.2.1 <i>L’injection du carburant</i>	7
1.1.2.2 <i>L’atomisation</i>	7
1.1.2.3 <i>La pénétration du spray</i>	8
1.1.2.4 <i>L’évaporation du spray</i>	10
1.1.3 LA COMBUSTION DE PRE-MELANGE	10
1.1.4 LA COMBUSTION DE DIFFUSION	10
1.2 LES MODELES CONCEPTUELS	11
1.2.1 LES MODELES ANCIENS	11
1.2.2 LE MODELE CONCEPTUEL DE DEC [27]	12
1.2.2.1 <i>Développement initial du spray (de 0 à 4.5°V ASI)</i>	14
1.2.2.2 <i>Auto inflammation (de 3 à 5°V ASI)</i>	14
1.2.2.3 <i>Pic de pré mélange (de 4 à 6.5°V ASI)</i>	14
1.2.2.4 <i>Développement de la flamme de diffusion (de 5.5 à 6.5°V ASI)</i>	14
1.2.2.5 <i>Fin du pic de pré mélange (de 7°V ASI à 9°V ASI)</i>	14
1.2.2.6 <i>Combustion diffusives quasi-stabilisée (de 9°V ASI jusqu’à la fin de l’injection)</i>	15
1.2.2.7 <i>Fin de la combustion de diffusion (après la fin de l’injection)</i>	15
1.3 DIFFERENTS MODES DE COMBUSTION A ALLUMAGE PAR COMPRESSION	15
1.3.1 LA COMBUSTION HOMOGENE (HCCI).....	16
1.3.2 LA « COMBUSTION FROIDE »	18
1.3.2.1 <i>Principal général</i>	18
1.3.2.2 <i>Smokeless Rich Combustion</i>	18
1.3.2.3 <i>Combustion MK</i>	19
1.3.2.4 <i>Combustion UNIBUS</i>	19
1.3.2.4 <i>« Part premixed Combustion »</i>	20
1.3.2.5 <i>Combustion Double Pré-mélange</i>	21
1.3.2.6 <i>Etudes de la combustion froide</i>	22
1.4 DIFFERENTS TYPES DE MODELISATION DE LA COMBUSTION DIESEL	28
1.4.1 MODELES DE COMBUSTION SANS DESCRIPTION DES HETEROGENEITES	29
1.4.1.1 <i>Modèles purement mathématiques</i>	29
1.4.1.2 <i>Modèles phénoménologiques simples</i>	29
1.4.2 MODELES DE COMBUSTION AVEC DESCRIPTION DES HETEROGENEITES	31
1.4.2.1 <i>Modèles avec découpage qualitatif, sans calcul de spray</i>	32
1.4.2.2 <i>Modèles avec découpage qualitatif et calcul de spray</i>	37
1.4.2.3 <i>Modèles avec un découpage systématique Lagrangien</i>	43
1.4.2.4 <i>Modèles avec un découpage systématique Eulérien</i>	46
1.4.2.5 <i>Modèles mixtes</i>	49
1.4.2.6 <i>Modèles utilisant des PDF</i>	51
1.5 SOUS MODELES	54

1.5.1 MODELISATION DES SPRAYS	54
1.5.1.1 Modèle Lagrangien de Naber et Siebers	54
1.5.1.2 Modèles Eulérien du CMT.....	58
1.5.1.3 Modèle de Musculus [22].....	63
1.5.2 MODELISATION DE LA CINETIQUE CHIMIQUE.....	65
1.5.2.1 Mécanismes Globaux, Semi-Globaux et Détaillés.....	65
1.5.2.2 Structure de CHEMKIN II	68
CHAPITRE 2 : DEVELOPPEMENT D'UN MODELE PHENOMENOLOGIQUE MULTIZONES DE COMBUSTION 1D	71
2.1 MODELE DE JET 1D INERTE BASE SUR LE MODELE DE MUSCULUS.....	72
2.1.1 DESCRIPTION DU MODELE	72
2.1.2 PREMIERE ANALYSE DE SENSIBILITE AUX PARAMETRES DU MODELE.....	75
2.1.2.1 Impact du profil de spray (paramètres α et β).....	75
2.1.2.2 Impact du nombre de zones	77
2.2 MODELE DE JET 1D INERTE AVEC CALCUL EXPLICITE DE L'ENTRAINEMENT DES GAZ AMBIANTS	79
2.2.1 SUBDIVISION DE LA MASSE.....	80
2.2.2 VALIDATION DU MODELE (CARBURANT EN PHASE LIQUIDE).....	81
2.3 MODELE DE JET 1D VAPORISANT AVEC BILAN D'ENERGIE ET D'ESPECES.....	83
2.3.1 BILAN D'ENERGIE.....	83
2.3.2 BILAN D'ESPECES	85
2.3.3 DISTINCTION ENTRE LA ZONE AMBIANTE ET LE SPRAY	86
2.3.4 CALCUL DES PROPRIETES THERMODYNAMIQUES (CHEMKIN).....	87
2.3.5 DESCRIPTION DE L'EVAPORATION DU CARBURANT	89
2.3.5.1 Présentation du modèle d'évaporation.....	89
2.3.5.2 Effet de la constante du taux d'évaporation	90
2.4 MODELE DE JET 1D BRULANT.....	92
2.4.1 PRISE EN COMPTE DE LA DILATATION DU JET PAR MODIFICATION DE LA SECTION DU SPRAY	92
2.4.2 MODELE DE PERTES THERMIQUES AUX PAROIS DE LA BOMBE.....	94
2.4.3 MODELE DE TAUX D'INTRODUCTION DE CARBURANT.....	94
2.4.4 MODELE DE L'ANGLE DE SPRAY	95
2.4.5 TRAITEMENT NUMERIQUE DES EQUATIONS.....	96
2.4.6 DIFFERENTES APPROCHES POUR LE CALCUL DU TAUX DE REACTION (MODELE DE COMBUSTION).....	97
2.4.6.1 Modèle à chimie détaillée (CD).....	97
2.4.6.2 Modèle à chimie simplifiée à 1 réaction (CS).....	102
2.4.6.3 Modèle à chimie simplifiée et limite de richesse (CS_LR).....	103
2.4.6.4 Modèle sans chimie à délai d'inflammation fixé (SC).....	104
2.4.6.5 Modèle sans chimie avec « micro mélange » (SC_MM).....	105
CHAPITRE 3 : VALIDATION DU MODELE DE COMBUSTION DANS LE CAS D'UN REACTEUR A VOLUME CONSTANT	107
3.1 PRESENTATION DE LA BASE DE DONNEES ECN.....	108
3.2 CONDITIONS EXPERIMENTALES.....	108
3.3 VALIDATION DU MODELE	109
3.3.1 VALIDATION DES SOUS-MODELES ET DETERMINATION DES COEFFICIENTS	109
3.3.1.1 Modèle de taux de l'introduction de carburant	109
3.3.1.2 Modèle d'angle du spray	110
3.3.1.3 Modèle de pertes thermiques.....	111
3.3.1.4 Modèle d'évaporation.....	111
3.3.2 ANALYSE QUALITATIVE DES RESULTATS DU MODELE A CHIMIE DETAILLEE POUR LE CAS 2.....	112
3.4 ETUDE DE SENSIBILITE AUX PARAMETRES DES MODELES	115
3.4.1 MODELE A CHIMIE DETAILLEE.....	115
3.4.1.1 Angle du spray.....	115
3.4.1.2 Nombre de zones.....	116

3.4.1.3 Découpage des zones.....	117
3.4.2 MODELES A CHIMIE SIMPLIFIEE CS ET CS_LR.....	118
3.4.3 MODELES SANS CHIMIE CS ET CS_MM.....	120
3.5 ETUDE DE SENSIBILITE AUX PARAMETRES PHYSIQUES.....	123
3.5.1 MODELE A CHIMIE DETAILLEE.....	123
3.5.1.1 Température ambiante initiale.....	123
3.5.1.2 Fraction massique d'O ₂ ambiante.....	124
3.5.2 MODELE A CHIMIE SIMPLIFIEE (CS ET CS_LR).....	124
3.5.2.1 Température ambiante initiale.....	124
3.5.2.2 Fraction massique d'O ₂ ambiante.....	125
3.5.3 MODELE SANS CHIMIE (SC ET SC_MM).....	125
3.5.3.1 Température ambiante initiale.....	126
3.5.3.2 Fraction massique d'O ₂ ambiante initiale.....	126
CHAPITRE 4 : VALIDATION DU MODELE DE COMBUSTION DANS LE CAS D'UN MOTEUR	129
4.1 ADAPTATION DU MODELE POUR LE CAS VOLUME VARIABLE	130
4.1.1 VOLUME DU CYLINDRE.....	130
4.1.2 MODELE DE SECTION DES ZONES.....	131
4.1.3 MODELE DE PERTES THERMIQUES.....	132
4.1.4 MODELE D'IMPACT AUX PAROIS.....	132
4.1.5 MODELE DE TAUX D'INTRODUCTION DU CARBURANT.....	133
4.1.6 MODELE D'ANGLE DU SPRAY.....	134
4.2 DONNEES EXPERIMENTALES ET DE SIMULATION	134
4.2.1 MOTEUR.....	134
4.2.2 CHAMBRE DE COMBUSTION.....	135
4.2.3 SYSTEME D'INJECTION.....	136
4.2.4 COMPOSITION INITIALE DES GAZ ENFERMES DANS LE CYLINDRE.....	136
4.2.5 CARBURANT.....	138
4.2.6 CONDITIONS DE FONCTIONNEMENT ETUDIEES.....	139
4.3 ETUDES DE SENSIBILITE AUX PARAMETRES DES MODELES.....	140
4.3.1 VALIDATION DU MODELE EN CAS INERTE (POINT DE REFERENCE).....	140
4.3.1.1 Modèle à chimie détaillée (CD).....	141
4.3.1.2 Modèles à chimie simplifiée (CS) et sans chimie (SC).....	143
4.3.2 ANALYSE DES RESULTATS DANS LE CAS REACTIF (POINT DE REFERENCE).....	144
4.3.2.1 Modèle à chimie détaillée (CD).....	144
4.3.2.2 Modèle à chimie simplifiée à 1 réaction (CS).....	148
4.3.2.3 Modèle sans chimie (SC).....	151
4.3.3 ETUDE DE SENSIBILITE AUX PARAMETRES DU MODELE CD.....	155
4.3.3.1 Mécanisme cinétique chimique.....	155
4.3.3.2 Nombre de zones du spray.....	157
4.3.3.3 Découpage en zones.....	159
4.3.3.4 Coefficient d'évaporation.....	162
4.3.3.5 Température du carburant.....	163
4.3.3.6 Température de paroi.....	164
4.3.3.7 Coefficient C ₃ du modèle de Woschni.....	166
4.3.3.8 Coefficient C _{jet} du modèle d'angle de spray.....	168
4.3.3.9 Impact du spray sur la paroi.....	170
4.3.4 ETUDE DE SENSIBILITE AUX PARAMETRES DU MODELE A CHIMIE SIMPLIFIEE (CS).....	171
4.3.4.1 Nombre de zones.....	171
4.3.4.2 Paramètres du mécanisme simplifié.....	172
4.3.4.3 Limites de richesse (Modèle SC_LR).....	174
4.3.5 ETUDE DE SENSIBILITE AUX PARAMETRES DU MODELE SANS CHIMIE.....	177
4.3.5.1 Nombre de zones.....	178
4.3.5.2 Délai d'inflammation fixé.....	179
4.3.5.3 Paramètres de modèle SC.....	180
4.3.5.4 Paramètres du modèle SC_MM.....	181
4.4 ETUDE DE SENSIBILITE AUX PARAMETRES PHYSIQUES.....	183

4.4.1	MODELE A CHIMIE DETAILLEE.....	183
4.4.1.1	<i>Influence de l'EGR</i>	183
4.4.1.2	<i>Influence de la pression d'injection</i>	185
4.4.2	MODELE A CHIMIE SIMPLIFIEE (INJECTION SIMPLE)	186
4.4.2.1	<i>Influence de l'EGR</i>	186
4.4.2.2	<i>influence de la pression d'injection</i>	188
4.4.2.3	<i>Influence de la pression d'admission</i>	189
4.4.3	MODELE SANS CHIMIE (INJECTION SIMPLE)	190
4.4.3.1	<i>Influence de l'EGR</i>	190
4.4.3.2	<i>Influence de la pression d'injection</i>	192
4.4.3.3	<i>Influence de la pression d'admission</i>	192
4.4.4	MODELE A CHIMIE SIMPLIFIEE (MULTI INJECTIONS).....	193
4.4.4.1	<i>Analyse d'un point de référence</i>	193
4.4.4.2	<i>Influence de l'EGR</i>	196
4.4.4.3	<i>Influence de la température d'admission</i>	197
4.4.4.4	<i>Influence du délai entre les injections</i>	198
4.4.5	MODELE SANS CHIMIE (MULTI INJECTIONS).....	199
4.4.5.1	<i>Analyse d'un point représentatif</i>	200
4.4.5.2	<i>Influence de l'EGR</i>	202
4.4.5.3	<i>Influence de la température d'admission</i>	204
4.4.5.4	<i>Influence du délai entre les injections</i>	205
4.5	SYNTHESE	206
	CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES	209
	ANNEXES	211
	ANNEXE 1 : POINTS DE FONCTIONNEMENT MOTEUR	211
	ANNEXE 2 : RESULTATS DETAILLES SUR L'INFLUENCE DU NOMBRE DE ZONES	216
	REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	219

Nomenclature

Symboles latins

m	masse (g)
M	quantité de mouvement (g/s)
X	fraction volumique
A	aire (cm ²)
i	indice de zone
r	coordonnée radiale (cm)
r_m	largeur de spray (cm)
u	vitesse (cm/s)
V	volume (cm ³)
Z	Coordonnée axiale (cm)
ΔZ	longueur de la zone (cm)
Z'	coordonat axial relatif (cm)
Cd	coefficient de décharge
Ca	coefficient de contraction de section
t	temps (s)
Δt	pas de temps (s)
Am	aire moyenne (cm ²)
Y	fraction massique
R	constante universelle des gaz parfaits (J.K ⁻¹ .mol ⁻¹)
T	température (K)
P	pression (bar)
W	masse molaire (g/mol)
C_v	coefficient de vitesse
k	indice d'espèce
KK	nombre d'espèces
w	travail échangé (J)
Q	dégagement de chaleur (J)
U	énergie interne (J)
e	énergie interne massique (J.kg ⁻¹)
c_v	capacité calorifique à volume constant (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)
h	enthalpie massique (J.kg ⁻¹)
c_p	capacité calorifique à pression constante (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)
L_{vap}	chaleur latente de vaporisation (J/kg)
C_p	capacité spécifique à pression constant (J.mol ⁻¹ .K ⁻¹)
C_v	capacité spécifique à volume constant (J.mol ⁻¹ .K ⁻¹)
H	enthalpie (J.mol ⁻¹)
S	entropie (J.mol ⁻¹ .K ⁻¹)

v	rapport stœchiométrique massique de carburant et O ₂
v'	coefficient stœchiométrique dans la réaction
v''	coefficient stœchiométrique dans la réaction
r_{evap}	coefficient de taux d'évaporation (s ⁻¹)
$h_{éch}$	coefficient d'échange (W.m ⁻² .K ⁻¹)
\dot{Q}	débit d'injection (g/s)
c	coefficient empirique (modèle de l'angle)
a	accélération (g.s ⁻²)
Q_c	dégagement de chaleur par la combustion (J)
Q_p	pertes thermiques (J)
b_1	coefficient adimensionnel
b_2	coefficient adimensionnel
NZ	nombre de zones
N_{noz}	nombre de trous
t_{inj}	durée d'injection (s)
q	vitesse de progrès (mol.cm ⁻³ .s ⁻¹)
k_f	constante de vitesse directe
k_r	constante de vitesse inverse
Kc	constante d'équilibre ((mol.cm ⁻³) ^{power} , dépend de la réaction)
Kp	constante d'équilibre ((mol.cm ⁻³) ^{power} , dépend de la réaction)
A_a	facteur pré exponentiel (s ⁻¹)
E_a	énergie d'activation (kJ.mol ⁻¹)
k_a	constante de vitesse de la loi d'Arrhenius
n	facteur de puissance
L	position radiale (cm)
c_f	capacité calorifique de carburant (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)
c_m	vitesse moyenne de piston (m/s)
r_{reac}	coefficient de réaction (s ⁻¹)
f_{mix}	fréquence de mélange (s ⁻¹)
k_{diff}	coefficient empirique
c_G	coefficient empirique
c_k	coefficient empirique
C_{spray}	coefficient empirique
C_{diss}	coefficient empirique
d_0	diamètre de trou (cm)
kin	densité de l'énergie de la turbulence (m ² .s ⁻²)
$E_{cin,spray}$	production de turbulence par injection (kg.m ² .s ⁻²)
D	alésage du moteur (cm)
C	course du moteur (cm)
l	longueur de bielle (cm)
V_m	volume mort (cm ³)

V_s	cylindrée unitaire du moteur (cm ³)
C_3	coefficient empirique
N	régime moteur (tr.min ⁻¹)
P_0	pression cylindre pour un cycle sans combustion (bar)
C_1	coefficient empirique
C_2	coefficient empirique
X_{EGR}	taux d'EGR
H_{bol}	hauteur du bol (cm)
D_{bol}	diamètre du bol (cm)
X_{pis}	position du haut du piston (cm)

Symboles grecs

ρ	densité (g/cm ³)
ζ	ratio de coordonnée radiale
α	facteur du profil radial de spray
β	facteur du profil radial de spray
θ	angle de spray (deg)
Φ	richesse (rapport carburant - air)
Φ^*	richesse (rapport carburant - O ₂)
$\dot{\omega}$	taux de réaction (mol.cm ⁻³ .s ⁻¹)
χ	symbole chimique
ε	rapport de compression
λ	rapport bielle-manivelle
φ	angle vilebrequin (deg)
ω_{rot}	vitesse angulaire du moteur (deg/s)
λ_{AF}	excès d'air
ζ	nombre d'atomes de carbone
η	nombre d'atomes d'hydrogène

Symboles divers

\dot{B}	flux du paramètre B
\overline{B}	valeur moyenne du paramètre B
$\overline{\overline{B}}$	valeur moyenne en volume du paramètre B
dB	dérivée du paramètre B
$[B]$	fraction volumique sèche d'espèce B

Indices

<i>in</i>	à l'entrée de la zone
<i>out</i>	à la sortie de la zone
<i>f</i>	fuel (carburant)
<i>c</i>	au centre

<i>0</i>	à la sortie d'injecteur
<i>g</i>	gaz
<i>trsf</i>	transfert entre zones
<i>entr</i>	entraîné des gaz ambiants
<i>inj</i>	injecté
<i>l</i>	phase liquide
<i>v</i>	phase gazeuse
<i>p</i>	pilote
<i>amb</i>	ambiante
<i>tot</i>	total
<i>O</i>	état standard
<i>st</i>	stœchiométrique
<i>ref</i>	référence
<i>reac</i>	réactif
<i>inert</i>	inerte
<i>rail</i>	rampe commune d'injection
<i>trou</i>	trous
<i>non-dim</i>	non dimensionnel
<i>atm</i>	atmosphérique
<i>mix</i>	mélange
<i>lim,r</i>	limite de richesse supérieure
<i>lim,p</i>	limite de richesse inférieure
<i>dispo</i>	disponible
<i>b</i>	brûlé
<i>pis</i>	piston
<i>bru</i>	brûlé
<i>r</i>	état de référence
<i>ch</i>	chambre de combustion
<i>cyl</i>	cylindre
<i>res</i>	résiduel
<i>kk</i>	au sens de keenan et kaye
<i>3</i>	sortie du moteur
<i>2''</i>	après mélange avec les gaz recirculés
<i>_1</i>	calcul 1 ^{ère} étape
<i>_2</i>	calcul 2 ^{ème} étape
<i>e</i>	échappement
<i>a</i>	admission

Abréviations

<i>1D_MRET</i>	Modèle 1D avec remplissage des zones
<i>1D_MRET_SM</i>	Modèle 1D avec calcul explicite des flux massiques aux frontières des zones

<i>CS</i>	chimie simplifiée
<i>CS_LR</i>	chimie simplifiée et limite de richesse
<i>SC</i>	sans chimie
<i>SC_MM</i>	sans chimie avec micro mélange
<i>EOI</i>	fin de l'injection
<i>PCI</i>	pouvoir calorifique inférieure
<i>PMH</i>	point mort haut
<i>PMB</i>	point mort bas
<i>ID</i>	délai d'inflammation
<i>EGR</i>	recirculation des gaz d'échappement
<i>PDF</i>	fonction de densité de probabilité
<i>SOI</i>	début de l'injection
<i>PME</i>	pression moyenne effective

Introduction

Par rapport au moteur à allumage commandé, le moteur Diesel présente l'avantage d'avoir un rendement thermodynamique plus élevé, notamment grâce à son taux de compression plus élevé. Ces dernières années, des améliorations notables sur le moteur Diesel ont été apportées pour satisfaire des normes d'émission de polluants toujours plus drastiques. De nouvelles stratégies de combustion Diesel ont ainsi vu le jour et consistent généralement à augmenter la part de carburant brûlant en pré mélange, voire à prémélanger intégralement le carburant avec l'air (mélange homogène avec le mode HCCI, ou mélange hétérogène avec les modes PCCI).

Parallèlement, les modèles de combustion se voulant prédictifs doivent ainsi être complexifiés pour être capables de modéliser ces différents modes de combustion.

Dans ce cadre, cette thèse a pour objet le développement d'un modèle de combustion Diesel phénoménologique original, en se basant sur une description 1D du spray de carburant. Il devra être capable de décrire le déroulement de la combustion pour des cas pré mélangés et des cas diffusifs. Compte tenu de cet objectif, un couplage du modèle de spray avec un calcul détaillé de chimie est prévu.

Dans cette perspective, cette thèse est conduite en s'appuyant tout d'abord sur un examen bibliographique détaillé de la physique de la combustion Diesel et sa modélisation, où l'accent est mis sur les modèles phénoménologiques existants à ce jour.

Le deuxième chapitre décrit le développement d'un modèle phénoménologique multizone de combustion Diesel 1D original, en se basant sur le modèle de spray de Musculus et al. (modèle inerte sans évaporation). Des compléments sont ainsi apportés, en ce qui concerne notamment le bilan d'espèces chimiques et d'énergie, le calcul explicite de l'entraînement des gaz ambiants par le spray, ou encore la dilation du spray lors de la combustion. Plusieurs approches pour le calcul du taux de combustion à proprement parler sont proposées, allant de la chimie détaillée (couplage avec CHEMKIN) à une approche sans calcul de chimie.

Dans le chapitre 3, les résultats du modèle sont confrontés à des résultats expérimentaux obtenus dans un réacteur à volume constant issus de la base de données ECN. Des études de sensibilité aux paramètres du modèle et aux paramètres physiques (température et concentration en oxygène dans les gaz ambiants) sont réalisées.

Dans le chapitre 4, de nouvelles améliorations sont apportées au modèle pour être capable de modéliser la combustion dans un moteur Diesel, notamment pour tenir compte de la variation de volume et de l'impact des sprays aux parois de la chambre de combustion. Des études de sensibilité aux paramètres du modèle et aux paramètres physiques sont à nouveau réalisées.

Enfin, des conclusions et perspectives sont proposées dans une dernière partie.

Chapitre 1 : Etude Bibliographique – Caractérisation et Modélisation de la combustion Diesel

Le moteur Diesel est un moteur à combustion interne dont l'allumage est spontané, par phénomène d'auto-inflammation. Il jouit d'un rendement favorable mais sa dépollution est plus difficile que celle des moteurs à allumage commandé. Ces dernières années, des améliorations notables ont été réalisées sur le moteur Diesel. En particulier, afin de satisfaire les normes d'émission, plusieurs nouvelles stratégies de combustion Diesel ont été développées.

Compte tenu des objectifs de la thèse, l'étude bibliographique présente tout d'abord les principales connaissances actuelles sur la combustion Diesel, puis propose un état de l'art sur les modélisations phénoménologiques. Elle se décompose en cinq parties :

- *Une première partie traite des généralités sur la combustion Diesel en injection directe. Les différentes phases de combustion Diesel sont discutées séparément.*
- *Une description plus détaillée de la combustion Diesel est alors proposée en s'appuyant notamment sur le modèle conceptuel de Dec.*
- *Un point est ensuite fait sur les évolutions récentes des stratégies et modes de combustion Diesel.*
- *La quatrième partie concerne les modèles phénoménologiques de combustion Diesel qui sont recensés et classés selon le type de description des hétérogénéités.*
- *Enfin, la dernière partie contient une présentation plus détaillée de certains sous-modèles utilisés pour la modélisation de combustion Diesel, en particulier des modèles de spray et de cinétique chimique.*

1.1 Généralités sur la combustion Diesel

Dans les moteurs à allumage commandé, l'air et le carburant sont généralement mélangés dans le collecteur d'admission, puis l'homogénéisation se poursuit dans le cylindre avec le mouvement de piston pendant la compression, et enfin l'inflammation est déclenchée par une bougie d'allumage. En revanche, dans un moteur Diesel conventionnel, le carburant est injecté directement dans la chambre (ou éventuellement la préchambre), en fin de compression, juste avant le point mort haut (PMH). Le carburant s'auto enflamme alors grâce à l'air chaud et comprimé. Le délai d'auto-inflammation est court et laisse peu de temps au carburant pour se mélanger avec l'air. Par conséquent, la combustion Diesel présente les spécificités et limites suivantes:

- il est nécessaire de comprimer suffisamment la charge (l'air contenu dans le cylindre) pour l'amener à haute température et permettre l'inflammation du carburant lorsqu'il est injecté.
- le processus d'évaporation du carburant injecté doit être rapide.
- comme la formation du mélange est interne, elle limite la vitesse d'un moteur Diesel. En conséquence, la vitesse, et également la densité de puissance des moteurs Diesel sont plus petites que les moteurs à essence. La suralimentation, généralisée sur les moteurs automobiles actuels, permet de remédier à ce dernier point.
- Enfin, les moteurs Diesel fonctionnent habituellement et globalement avec un mélange air-carburant pauvre afin de permettre une combustion correcte. Cependant, l'injection directe dans les moteurs Diesel conventionnels conduit à un mélange air/carburant non-homogène. Il existe des zones très pauvres ou stœchiométriques et, en même temps, il y a des zones très riches. La stratification du mélange mène à la formation de polluants, en particulier les particules de suie.

On peut découper la combustion Diesel en plusieurs sous-processus : l'injection, l'évaporation du carburant, le développement du spray, le mélange air/carburant, l'inflammation, la combustion et la formation des émissions polluantes. Parce que ces sous-processus se déroulent essentiellement simultanément et interagissent les uns avec les autres, la modélisation de la combustion Diesel est donc extrêmement complexe. Heywood [1] distingue dans le processus de combustion Diesel (allumage par compression) les étapes suivantes :

- Le délai d'inflammation
- La combustion de pré mélange
- La combustion de diffusion
- La combustion terminale

La Figure 1 illustre ces 4 étapes de la combustion et l'évolution du dégagement instantané de chaleur qui en résulte.

Même si la technologie des moteurs Diesel a fortement évolué ces vingt dernières années, cette description reste globalement valable pour une combustion Diesel classique. Au cours des dernières décennies, de nouveaux modes de combustion ont été proposés, destinés principalement au fonctionnement à faible charge. On peut notamment citer la combustion « modulated kinetics » (MK), la combustion Diesel pré-mélangé (Premixed Charge Compression Ignition : PCCI), et la combustion homogène (Homogeneous Charge Compression Ignition : HCCI)[2]. Ces régimes de combustion visent tous à augmenter le temps de mélange pour fournir un mélange air/carburant partiellement ou totalement pré-mélangé et des températures de combustion limitées, afin d'obtenir des émissions de suie et de NOx très faibles.

Ainsi, les différences entre les moteurs à essence et les moteurs Diesel se réduisent progressivement.

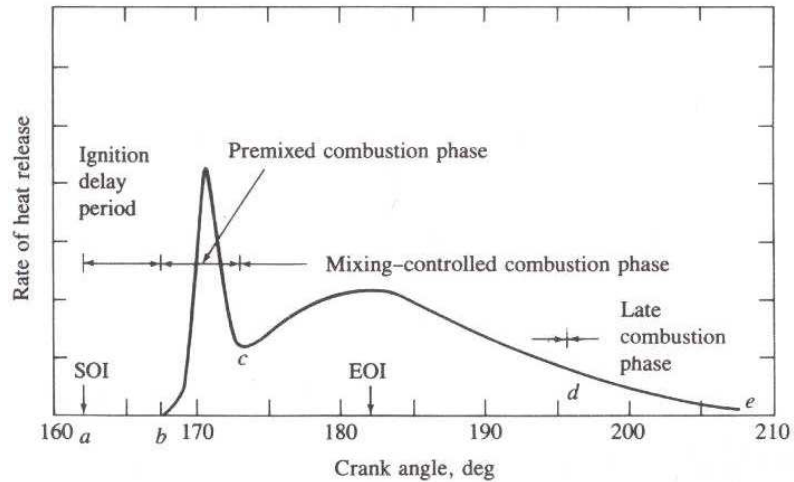


Figure 1: Taux de dégagement de chaleur en fonction de l'angle vilebrequin [1]

1.1.1 Le délai d'inflammation

1.1.1.1 Les principes fondamentaux de l'auto-inflammation

Le délai d'inflammation correspond à la durée entre le début de l'injection et le début de l'inflammation (a→b sur la Figure 1). Le début de l'injection est généralement considéré comme le moment où l'aiguille de l'injecteur décolle de son siège (déterminée par un capteur de levée d'aiguille). Le début de la combustion est plus difficile à déterminer précisément, la localisation de l'auto-inflammation au sein du spray étant variable. L'auto-inflammation du carburant Diesel met en jeu des phénomènes physiques et chimiques, qui sont extrêmement complexes[3]. On distingue généralement le délai d'inflammation physique et le délai d'inflammation chimique. La Figure 2 donne un résumé des étapes physiques et chimiques avant et après l'auto-inflammation.

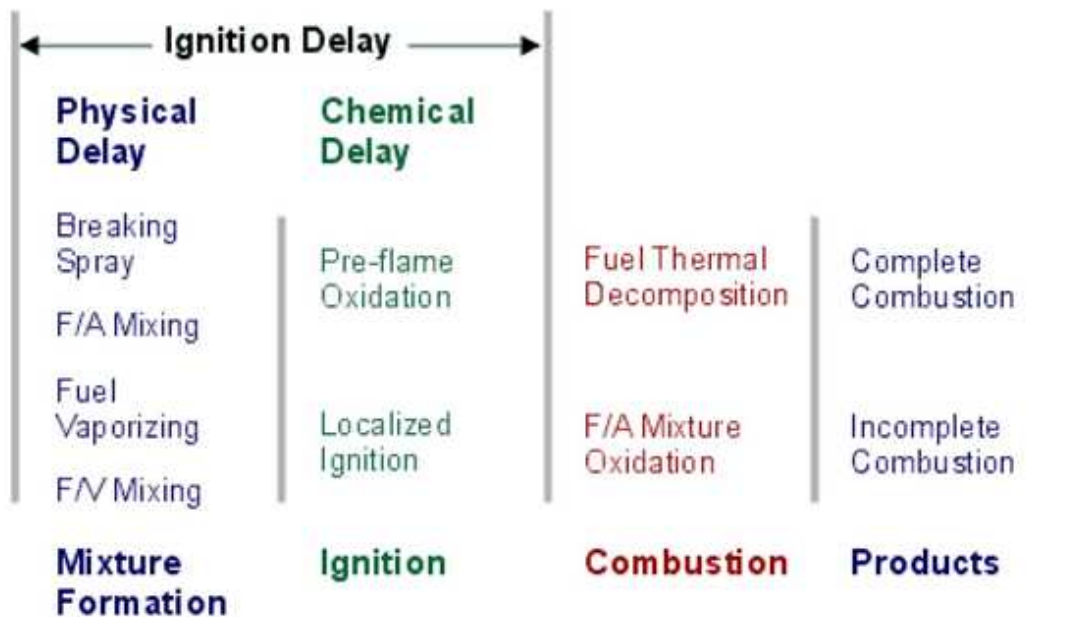


Figure 2 : Résumé des étapes avant et après l'auto-inflammation[4]

Le délai d'inflammation physique comprend les processus d'atomisation du spray, d'évaporation du carburant, et de mélange du carburant vapeur avec l'air qui génère un mélange d'air-carburant inflammable, qui est aussi souvent

désigné comme la formation du mélange. Le délai d'inflammation chimique comprends la période pendant laquelle les radicaux d'inflammation (OH, etc.) sont formés dans les réactions de précombustion, qui se caractérisent par un mécanisme très complexe, puis l'inflammation localisée qui se déroule en plusieurs endroits dans la chambre de combustion. Ces processus sont affectés par la conception des moteurs, les paramètres de fonctionnement, ainsi que par les caractéristiques du carburant.

Kobori et al. [5] ont essayé de quantifier de manière séparée ces deux périodes de délai d'inflammation. Cependant, le plus souvent, compte tenu des interactions entre les deux processus, un seul délai total est estimé. Khair et al.[4] répertorient plusieurs phénomènes caractéristiques du début de la combustion :

- Changements brusques de pression dans le cylindre
- Émission de luminosité à partir des réactions de combustion
- Augmentation de la température due à la combustion
- Combustion d'une quantité définie de carburant
- Un point fixe sur la courbe des taux de dégagement de chaleur

Il y a donc plusieurs façons pour quantifier le délai d'inflammation. Une façon est d'étudier le changement de pente du taux de dégagement de chaleur ou le changement de pente de la pression cylindre. Quand il y a des changements brusques pour ces deux paramètres, on dit que le mélange commence à brûler. Cependant, cette méthode rencontre deux difficultés d'application. Tout d'abord, il est difficile de se donner une valeur de pente limite adaptée à toutes les conditions de combustion. De plus, les mesures de pression cylindre sont naturellement bruitées, et cela est susceptible de fausser l'estimation de la pente.

Une autre définition courante pour le délai d'inflammation est le temps entre le début de l'injection et le moment où le taux de dégagement de chaleur devient positif. A cause de l'échauffement puis de l'évaporation du carburant liquide, le taux de dégagement de chaleur est normalement négatif immédiatement après l'injection. Quand la quantité de chaleur dégagée par la combustion dépasse celle absorbée par ces phénomènes, le taux de dégagement de chaleur devient positif et la période de délai d'inflammation est considérée comme terminée.

En outre, plusieurs chercheurs ont proposé des équations empiriques ou semi-empiriques pour la détermination du délai d'inflammation. En général, les modèles sont basés sur l'équation d'Arrhenius, avec différents choix de coefficients. Merker et al. [6] ont réalisé une étude sur les différents modèles ou équations de délai d'inflammation. Pour des applications dans les moteurs Diesel à des températures élevées, un modèle d'équation unique semble donner de bons résultats. Il décrit le délai d'inflammation à l'aide d'une seule équation d'Arrhenius, qui dépend de la pression p , de la température T , et de la richesse λ :

$$\Delta t_{ID} = A \frac{\lambda}{p^2} \exp\left[-\frac{E}{RT}\right] \quad \text{Éq. 1}$$

1.1.1.2 Influence des propriétés du carburant sur le délai

Le délai d'inflammation recouvrant deux types de processus - physiques et chimiques, l'influence du carburant sur le délai sera liée à ses propriétés physiques et chimiques. L'indice de cétane d'un carburant est couramment utilisé pour quantifier ses caractéristiques vis-à-vis du délai d'inflammation. Le cétane, dont l'indice de cétane est 100, est considéré comme un carburant extrême inflammable. En revanche, on attribue l'indice 0 au méthylnaphtalène à cause de sa difficulté à s'enflammer.

La Figure 3 illustre l'effet de l'indice de cétane sur le délai d'inflammation, réalisé par Heywood. Il apparaît que le carburant qui a l'indice de cétane le plus élevé conduit au délai d'inflammation le plus court, quels que soient la charge et le régime du moteur.

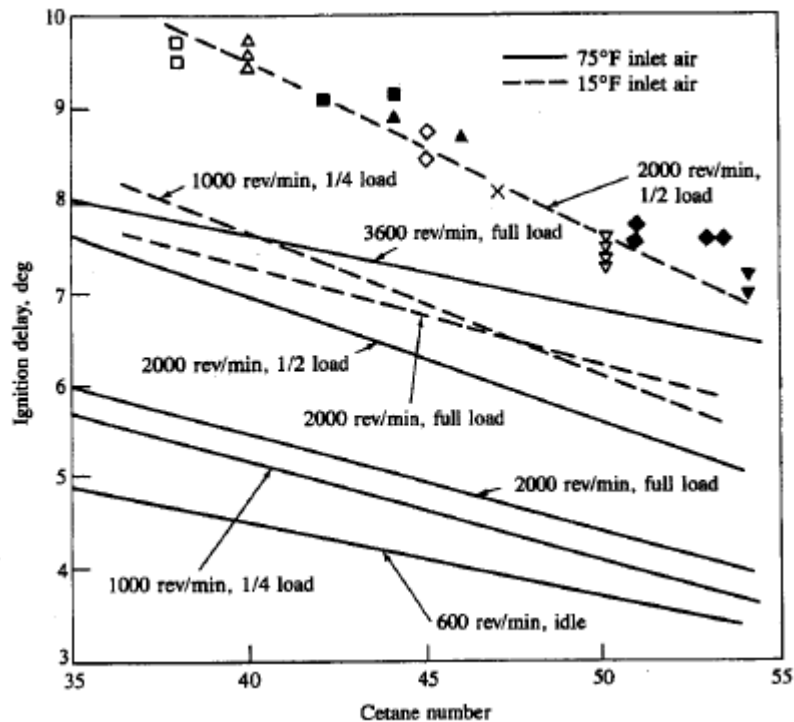


Figure 3: Effet de l'indice de cétane du carburant contre le délai d'inflammation [7]

Les carburants à faible indice de cétane ayant des délais d'inflammation plus longs, une plus grande quantité de carburant est injectée avant l'inflammation du spray, conduisant à la formation d'une quantité importante de mélange. Lors de l'inflammation on observe alors une vitesse de combustion très rapide, accompagnée par un pic de taux de dégagement de chaleur, tous indiquent une forte combustion pré-mélangée. Dans des conditions extrêmes, ce phénomène devient brutal et prend le nom de "Diesel knock". Pour les carburants avec des délais d'inflammation plus courts, l'inflammation commence avant que la plupart du carburant soit injecté. Le taux de dégagement de chaleur est ensuite contrôlé principalement par le taux d'introduction et le processus de mélange air-carburant. La combustion est alors beaucoup plus douce.

Par ailleurs, les caractéristiques physiques du carburant Diesel, comme la densité, la volatilité, la température d'ébullition, etc. peuvent aussi affecter le processus de combustion et la durée du délai d'inflammation. Wong et al. ont fait une étude complète sur les effets des propriétés physiques du carburant sur le délai d'inflammation [8]. Selon Heywood [1], en dehors de cas extrêmes quand le moteur est froid, généralement les propriétés physiques du carburant ne modifient pas sensiblement le délai d'inflammation.

1.1.1.3 Influence des paramètres « moteurs » sur le délai

Physiquement, les facteurs qui peuvent affecter le processus d'atomisation du carburant, d'évaporation du spray, et l'état de la charge d'air (pression, température) influencent le délai d'inflammation. En raison des couplages existant, le choix est fait ici d'étudier les facteurs d'influence du délai d'inflammation en distinguant les différents éléments du système moteur.

1. Système d'injection

Début d'injection: Comme le délai est sensible à la température ou à la pression au moment de l'injection, le début d'injection doit être choisi avec soin. Des niveaux élevés de température et de pression facilitent l'auto-inflammation. Si l'injection commence trop tôt, le piston est encore loin du PMH, donc la température et la pression initiales de l'air sont plus faibles, par conséquent le délai va augmenter. Si l'injection commence trop tard (après PMH), la température et la pression sont initialement un peu plus hautes mais ensuite diminuent rapidement à cause du mouvement de piston. Les conditions les plus favorables pour l'inflammation se situent entre les deux [1].

Pression d'injection: Ce paramètre affecte directement le taux d'introduction et la structure du spray. Une haute pression d'injection favorise l'atomisation du spray en fines gouttes. En suite, avec une pénétration rapide du spray, l'air et le carburant se mélangent mieux. Néanmoins, il convient de limiter la pression d'injection car, si le spray pénètre trop vite, il touchera les parois froides de la chambre, avant l'inflammation. Dans ce cas, le carburant concerné aura beaucoup de difficultés à brûler et cela aura un impact négatif sur les émissions et le rendement [1].

La charge (Quantité injectée): Quand on injecte plus de carburant, la température des gaz résiduels et la température de la paroi augmentent. Il en résulte une température de charge plus haute au début de l'injection, ce qui diminue le délai d'inflammation [1].

Diamètre des trous de l'injecteur: Comme la pression d'injection, le diamètre de l'orifice peut affecter le procédé d'atomisation du carburant et la pénétration de spray. Korobi et al. [5] ont effectué une série de tests sur des injecteurs avec un nombre de trous et des diamètres variables. Ils ont constaté que le délai d'inflammation diminue avec la diminution du diamètre des trous, mais il ne change plus lorsque le diamètre des trous devient inférieur à 0,05 mm. Une analyse plus détaillée peut être trouvée dans [5].

2. Système d'admission

Température et pression: La température et la pression de l'air d'admission ont des effets sur le délai à cause de leur impact direct sur les propriétés thermodynamiques de la charge au moment de l'injection et tout au long du processus de mélange. L'inflammation fondamentale indique une forte dépendance du délai d'inflammation à la température. Par ailleurs, comme une haute température accompagne une haute pression, l'effet de la pression et de la température sont normalement couplés et proportionnels [1].

Utilisation d'EGR: Ces dernières années l'utilisation des gaz résiduels devient plus en plus importante. Avec une augmentation du taux d'EGR, la teneur en oxygène de la charge décroît. Maiboom [9] montre que pour des conditions typiques de moteur Diesel, si le taux d'EGR est plus grand, le délai d'inflammation sera plus long.

3. Conditions dans le cylindre

Régime du moteur: Lorsque la vitesse du moteur augmente à charge constante, l'effet de compression est plus fort, en conséquence, la température et la pression sont plus hautes, et conduisent à un délai plus court [1].

Paroi de la chambre de combustion: L'impact du spray sur la paroi de la chambre de combustion affecte évidemment l'évaporation du carburant et les processus de mélange. La Figure 4 montre l'effet de l'impact sur le délai mesuré dans une bombe de combustion à volume constant, pour une série de pressions et des températures de l'air et pour différentes températures de paroi [10]. Les données montrent que la présence de la paroi réduit le délai quand des pressions et des températures diminuent, mais n'a aucun effet significatif sur les hautes pressions et températures.

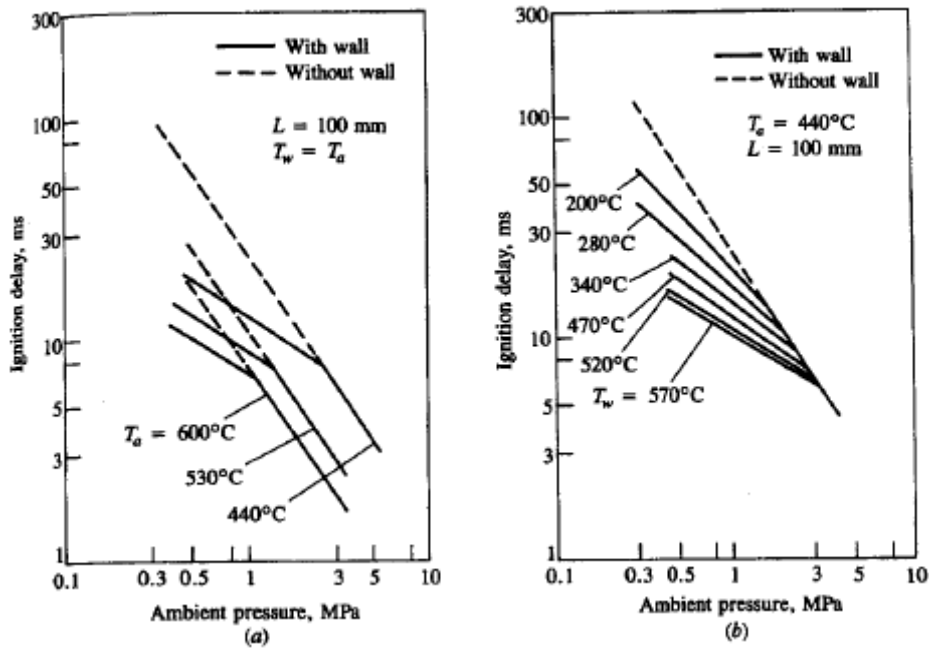


Figure 4: Effets de l'impact avec une paroi sur le délai d'inflammation [10]

Swirl : Les variations du taux de swirl changent l'évaporation du carburant et évidemment les processus de mélange air-carburant, ce qui peut affecter le délai d'inflammation. ^[1]

1.1.2 Le comportement du spray de carburant

1.1.2.1 L'injection du carburant

Le carburant est introduit dans le cylindre d'un moteur Diesel à travers un injecteur avec différents niveaux de pression dans l'orifice de l'injecteur. La pression dans le cylindre au point d'injection est typiquement de 50 à 100 bar. Par contre, les pressions d'injection varient selon les modes d'injection. Pour un système d'injection directe typique, le carburant est injecté avec une pression qui peut atteindre 2000 bar, pour permettre d'atomiser le carburant liquide en petites gouttelettes et avoir une évaporation rapide et pour également permettre au spray de pénétrer la chambre de combustion dans le temps disponible et utiliser pleinement l'air disponible pour brûler. En revanche, pour un système d'injection indirect typique, comme il y a plus de temps pour que le carburant s'évapore et se mélange avec l'air dans la préchambre, les pressions d'injection requises sont beaucoup plus petites, de l'ordre de 400 bar selon Merker et al. [6].

La limitation réglementaire des émissions ainsi que les objectifs de réduction de consommation et de bruit ont conduit au développement des systèmes d'injection électronique à rampe commune qui permettent des pressions d'injection élevées, une grande flexibilité dans le contrôle ainsi qu'une précision accrue pour le début d'injection et la quantité injectée. En outre, ce système permet la multi-injection qui peut évidemment augmenter la température et la pression au début de l'injection principale, et obtenir des conditions plus favorables à la combustion.

1.1.2.2 L'atomisation

Dans les conditions d'injection du moteur Diesel, le jet de carburant est habituellement un spray en forme de cône à la sortie de l'injecteur. La Figure 5 est une représentation schématique d'un spray Diesel typique.

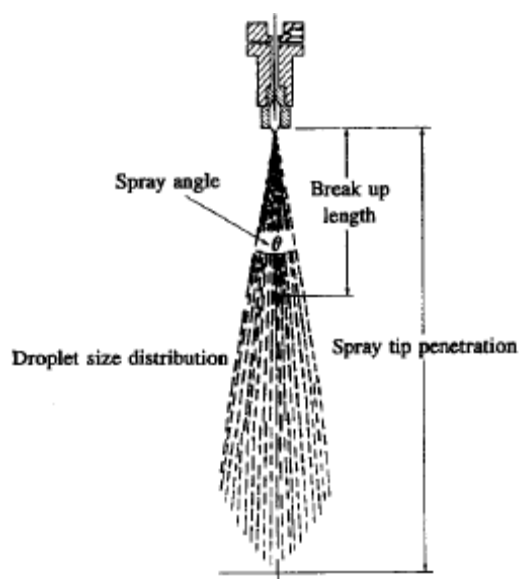


Figure 5: Représentation schématique du spray Diesel

On peut distinguer deux phases dans le processus d'atomisation. Dans la phase d'atomisation primaire qui se passe près de l'injecteur, le spray de liquide continu se désintègre en petites gouttes par l'interaction avec les gaz dans le cylindre. Dans cette phase, selon la vitesse du spray, l'atomisation peut correspondre à différents régimes [1] :

- Régime de Rayleigh : À faible vitesse du spray, l'atomisation est due à la croissance instable des ondes de surface provoquées par la tension de surface du carburant et il en résulte des gouttes de grande taille (supérieure au diamètre du jet).
- Premier Régime d'atomisation induite par l'aérodynamique (« wind induced ») : Pour une vitesse du spray moyenne, les forces dues au mouvement du spray et l'entraînement de l'air augmentent la force de tension de surface, et donc diminuent encore les tailles des gouttes.
- Deuxième Régime d'atomisation induite par l'aérodynamique: pour les vitesses de spray élevées, l'atomisation est contrôlée par la divergence du spray après une longueur intacte ou non-perturbée. Dans cette phase d'atomisation, la croissance instable des ondes courtes produit des gouttes dont la taille moyenne est beaucoup plus petite.
- Régime d'atomisation : pour les vitesses de spray extrêmes, il y a des ruptures sur la surface externe du spray, qui sont causées par l'interaction aérodynamique à l'interface du carburant liquide et de l'air. En conséquence, des gouttes deviennent de plus en plus petites.

Dans la deuxième phase d'atomisation, comme le régime d'atomisation est atteint, la taille moyenne des gouttes devient encore plus petite à cause de l'interaction aérodynamique. Cependant, jusqu'à présent, le processus d'atomisation est toujours considéré comme très complexe, en particulier la distinction entre les différents modes d'atomisation n'est pas toujours très claire. Tonini et al. [11] résument les travaux antérieurs pour ce processus, et proposent différents modes pour la deuxième phase d'atomisation selon la valeur du nombre de Weber des gouttes.

1.1.2.3 La pénétration du spray

Tant que le carburant liquide n'a pas atteint son extension maximale, la phase vapeur ne s'étend pas au-delà de la phase liquide. Une fois que le spray liquide a atteint la pénétration maximale, la phase vapeur continue à pénétrer dans la chambre de combustion. Au délai d'inflammation, la zone du mélange vapeur forme la zone des réactions.

Pour estimer la pénétration du spray, dans les années 60 et 70, plusieurs auteurs ont développé des lois empiriques ou semi-empiriques, qui permettent de prédire la pénétration en fonction de plusieurs paramètres, soit des paramètres d'injection, soit l'angle du spray [1]. Hiroyasu et Arai [12] ont notamment proposé une loi de pénétration qui traite deux cas distincts: avant et après le temps d'atomisation. Plus récemment, Naber et Siebers [13] ont établi une corrélation de pénétration pour le spray non-vaporisant qui suit les analyses de pénétration antérieures mais avec des modifications significatives. Ces modifications comprennent l'estimation de la constante arbitraire qui apparaît dans la corrélation de pénétration. La corrélation de Naber et Siebers est basée sur un bilan de quantité de mouvement suivant la direction axiale. Dos Santos et Le Moyne [14] ont présenté un aperçu et des comparaisons détaillés des différents modèles de spray existants. Ils ont en outre proposé des voies d'amélioration.

Toutes les corrélations mentionnées impliquent les mêmes paramètres (ΔP , Φ_o , ρ_a , t) avec des poids voisins. Les dépendances principales de ces variables trouvées par les différents auteurs peuvent être obtenues en exécutant une analyse dimensionnelle des variables suivantes: la densité du gaz ambiant (ρ_a), le temps depuis le début de l'injection (t) et le flux de quantité de mouvement instantanée (M_o) à travers l'orifice[15]. Le flux de quantité de mouvement instantané rassemble l'effet de la pression d'injection et du diamètre du trou[16][17][18]. Néanmoins, avec cette analyse simple, il n'est pas possible d'obtenir l'estimation de la constante qui apparaît dans la corrélation de la pénétration.

La Figure 6 montre une image de spray transitoire. Comme on peut le constater, il existe deux régions dans le spray: une région de forme conique à environ 70% de la pénétration totale et que l'on appelle la région stable ou permanente, et une autre région de forme elliptique, qui est appelée la région transitoire ou région instable^[19].

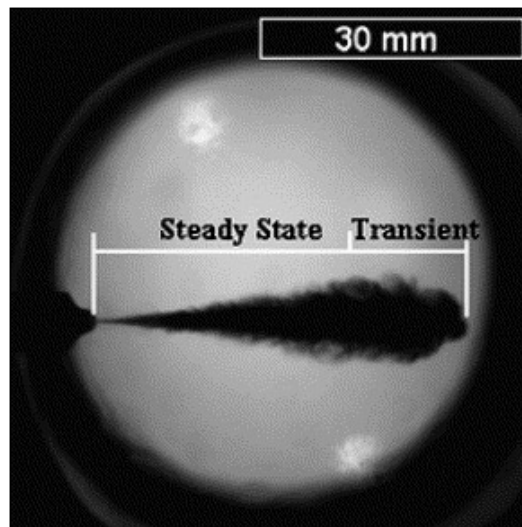


Figure 6: Image de spray transitoire [19]

La région transitoire, située à la pointe de spray, a une structure très compliquée qui la rend difficile à étudier. Il y a beaucoup d'informations disponibles sur ce sujet dans la littérature, mais il n'existe pas de consensus parmi les différents auteurs. Selon A.H. Lefebvre [20], les études de jet sur la zone stable sont déjà difficiles en raison de la complexité des phénomènes impliqués: l'atomisation, l'évaporation, le transfert de masse et quantité de mouvement, etc. En conséquence, beaucoup d'auteurs ont essayé de développer des modèles théoriques et phénoménologiques comme des outils pour comprendre le comportement de spray, en évitant la zone transitoire et en se concentrant sur la région stable. Parmi eux, plusieurs auteurs [12][13] ont supposé que la distribution radiale de la vitesse est identique dans chaque section de spray. Par contre, tout en gardant un angle de spray constant, d'autres auteurs [21][22][23] ont établi des modèles simplifiés incluant des zones avec différents profils radiaux.

1.1.2.4 L'évaporation du spray

Après l'atomisation primaire, le carburant doit s'évaporer le plus rapidement possible, dans la deuxième phase de d'atomisation, afin de fournir plus de vapeur inflammable et de se mélanger avec l'air entraîné avant le délai d'inflammation. Ce processus est influencé par l'énergie cinétique du carburant et donc par la pression d'injection. Une grande vitesse de spray facilite à la fois la création de surfaces libres des gouttes, le transfert de masse et le transfert de chaleur. Les gouttes de carburant sont chauffées par le transfert de chaleur par convection et par radiation en provenance des parois de la chambre qui sont plus chaudes que les gouttes. En plus des propriétés physiques telles que la pression et la température, le taux d'évaporation de carburant est influencé par la taille de la surface des gouttes formées dans les phases d'atomisation primaire et secondaire, ainsi que par la quantité d'air entraînée. Ainsi, meilleure est l'atomisation des gouttes, plus vite la température conduisant à l'évaporation est atteinte à la surface des gouttes [24]. Avec les systèmes d'injection haute pression récents, le paramètre limitant pour l'évaporation du carburant est l'entraînement de gaz chauds par le spray [109]. Pour quantifier avec précision le taux d'évaporation du carburant dans un spray, il faut résoudre les équations de conservation couplées pour les gouttelettes de liquide et l'air dans la chambre de combustion. Selon Merker et al. [25], plusieurs modèles semi-empiriques qui peuvent bien décrire qualitativement l'évaporation de carburant ont été développés (Baumgarten (2006), Ramos (1989), et Stiesch (2003)).

1.1.3 La combustion de pré-mélange

La combustion de pré-mélange est la période juste après le délai d'inflammation. Le carburant qui est mélangé à l'air pendant le délai d'inflammation se met à brûler très rapidement. Pendant cette courte durée, le mélange « prêt à brûler » brûle presque instantanément. Par conséquent, la pression et la température dans le cylindre augmentent rapidement : c'est une des caractéristiques typiques d'une combustion de pré mélange. Selon Hamid [26], la fin de la combustion de pré mélange correspond au début de la baisse de la dérivée de la pression cylindre. Le taux de dégagement de chaleur dans cette phase de combustion est contrôlé par la quantité de mélange air-carburant inflammable à l'issue du délai d'inflammation et par la cinétique chimique. Ainsi, il apparait que cette phase dépend directement de la quantité de carburant injectée durant le délai d'inflammation, c'est à dire en particulier du taux d'introduction du carburant, et du taux de mélange entre l'air et le carburant. Tous les paramètres qui peuvent affecter ces deux processus ont des effets importants sur la combustion de pré mélange.

1.1.4 La combustion de diffusion

Lorsque la première phase de combustion de pré mélange a consommé presque instantanément tout le mélange air-carburant dans la gamme de richesse inflammable, le carburant restant continue à se mélanger avec l'air, accompagné par la propagation de flamme. Dans cette phase, les processus de mélange et de combustion procèdent simultanément, en conséquence, la combustion est contrôlée par les processus de formation du mélange. On appelle ce type de combustion le mode de diffusion.

Dans cette phase, la limite de la vitesse de mélange conduit à une combustion qui a un pic de taux de dégagement de chaleur plus faible mais un processus plus stable et long par rapport à la combustion de pré mélange. La température dans le cylindre continue à augmenter jusqu'à la valeur maximale. Par contre, l'augmentation de pression cylindre est moins marquée, voire la pression diminue en raison de l'expansion du volume de la chambre.

Concernant la structure du spray dans cette phase de combustion, une fois la combustion de diffusion commencée, on peut considérer qu'il y a dans le spray les zones suivantes:

- Un cône de carburant liquide près de l'injecteur (en amont)

- Une zone intermédiaire consistant en des gouttes de carburant et un mélange air-carburant riche (en moyenne)
- Une zone vapeur consistant en un mélange air-carburant pauvre et des produits de combustion. (en aval)
- Une zone de flamme diffusive (autour du spray)

On peut trouver plus de détails sur la structure du spray dans le modèle conceptuel développé par Dec et al. [27], qui sera présenté ci-dessous dans le chapitre 1.2. Ce dernier montre notamment que les deux modes de combustion n'apparaissent pas indépendamment. Ainsi, dans la phase de combustion diffusive le carburant subit d'abord une combustion de pré mélange partielle (riche) avant brûler complètement au niveau de la flamme de diffusions.

En conséquence, il serait plus juste d'appeler cette dernière phase de combustion « contrôlée par le mélange », puisque c'est effectivement le facteur déterminant ce type combustion.

1.2 Les modèles conceptuels

Les modèles conceptuels sont des descriptions qualitatives détaillées de la combustion. Ils ont évolué au cours du temps en fonction de l'avancée des connaissances, liée notamment à la mise en œuvre de techniques de diagnostic optique de plus en plus performantes.

1.2.1 Les modèles anciens

Avant l'accès aux informations produites par les diagnostics basés sur l'imagerie laser, plusieurs modèles ont été proposés pour décrire la nature des procédés de combustion dans les moteurs Diesel. Par exemple, la Figure 7 reproduit par W. Chiu [28], est un exemple typique des ce type de modèles. Elle représente un jet Diesel fait d'un noyau riche en carburant, qui est entouré par le mélange carburant-air progressivement appauvri, réagissant au fur et à mesure que l'air est entraîné dans le spray et que l'oxygène est disponible pour réagir avec le carburant. Ce type de théorie a parfois été utilisée pour décrire le spray dense dans les moteurs Diesel [27].

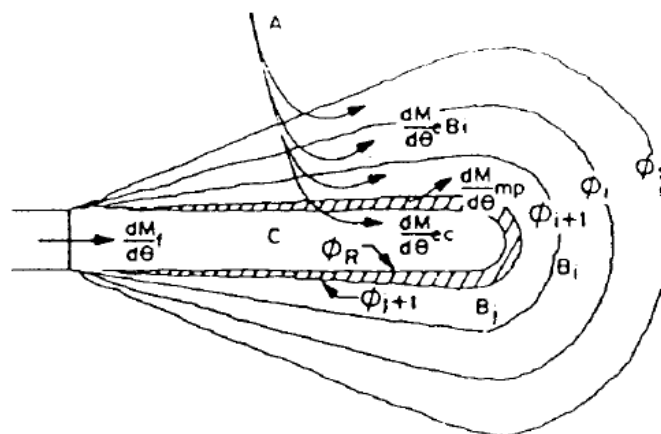


Figure 7: Représentation schématique de la combustion d'après [28]

Un schéma général de ce point de vue ancien sur la partie quasi-permanente de la combustion Diesel est présenté sur la Figure 8, qui montre une coupe dans le plan médian du jet de carburant. Dans ce schéma, la plupart du carburant en phase vapeur est situé avant la zone de flamme. La flamme est présentée comme une surface continue pour la combustion diffusive, et la suie serait formée autour de la périphérie du jet en côté riche de la zone de réaction.

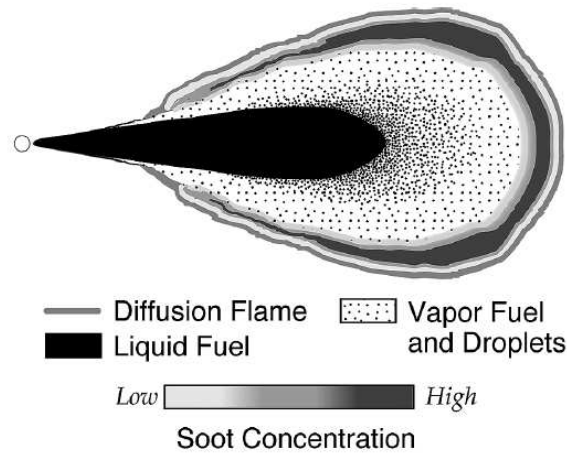


Figure 8: Schéma général de la combustion Diesel suivant une conception ancienne [27]

Les caractéristiques principales de ce modèle sont résumées par Dec ci-dessous [27] :

- Le carburant en phase liquide pénètre avec des gouttelettes de carburant présentes à proximité ou au sein de la zone de combustion.
- La combustion se produit comme une flamme de diffusion et se limite à la région périphérique du spray.
- La suie est produite principalement dans une région en forme de coquille autour de la périphérie du spray.

1.2.2 Le modèle conceptuel de Dec [27]

En s'appuyant sur diverses techniques de visualisation de la combustion menées sur un moteur monocylindre à accès optique au Laboratoire SANDIA, Dec [27] une étude expérimentale détaillée de la combustion et de la formation des suies dans un moteur Diesel poids-lourd. Cette étude a ensuite été complétée par Flynn et al. [29] qui ont notamment ajouté à l'ensemble des simulations de cinétique chimique. La combinaison de ces deux travaux a permis de mettre en place un modèle théorique de la combustion Diesel qui est souvent désigné sous le nom de « Modèle conceptuel de Dec ». Ce modèle est cité par la grande majorité des auteurs et sert donc de base pour la compréhension du développement du jet et de la combustion. L'évolution du jet est représentée sur la Figure 9 (1 degré vilebrequin correspond à 139 μ s). Les schémas montrent un seul cycle idéalisé représenté avec une position et une forme moyenne. Le jet est représenté comme pénétrant à une longueur moyenne (typique), et les limites sont dessinées avec des lignes lisses. Dans un jet réel, il y a toujours une certaine variation d'un cycle à l'autre dans la pénétration et la symétrie du jet, et les frontières sont toujours irrégulières en raison de la turbulence.

La Figure 10 permet d'illustrer la distribution de température et la localisation des polluants dans la flamme pendant la phase quasi permanente de la combustion diffusive (entre l'établissement de la flamme de diffusion et la fin de l'injection).

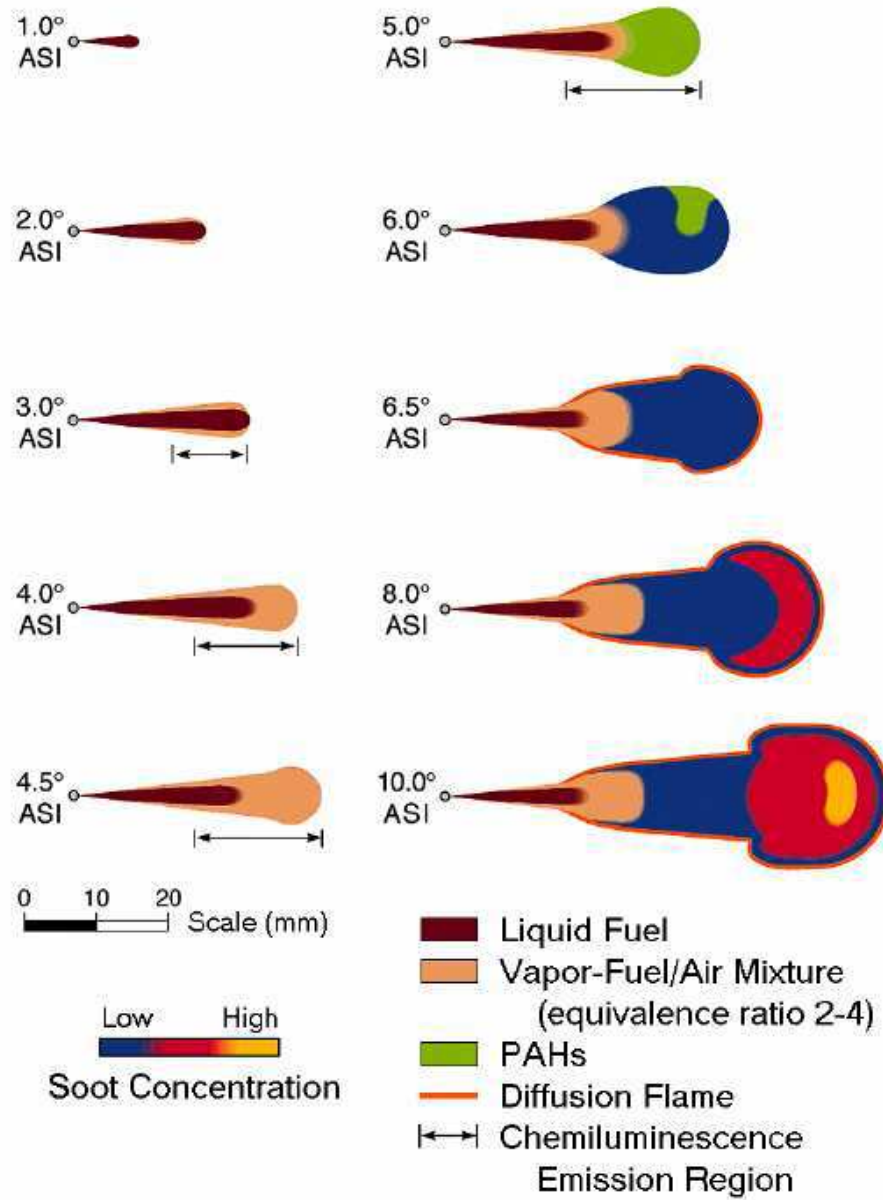


Figure 9: Modèle conceptuel de Dec de la combustion ^[27]

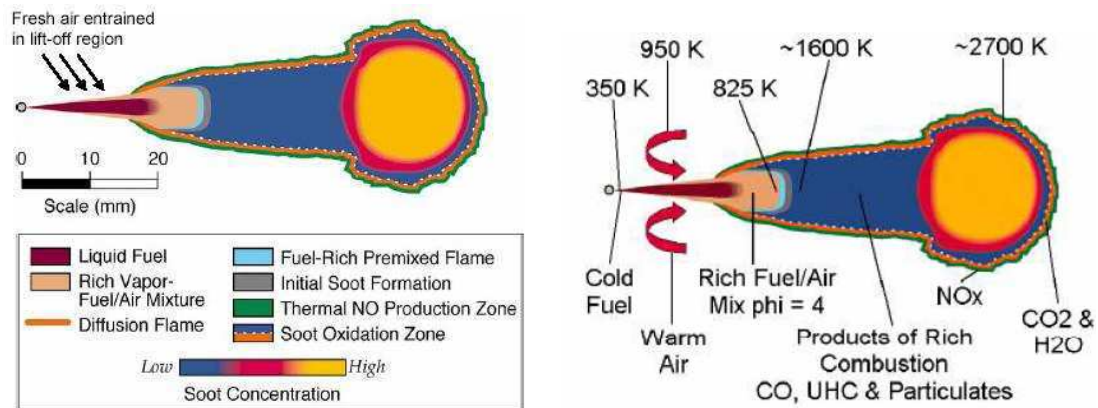


Figure 10: Schéma de la combustion pendant la phase de diffusion quasi-permanente, suivant le modèle de Dec [27]

Dec et al. distinguent les phases suivantes [27][30]:

1.2.2.1 Développement initial du spray (de 0 à 4.5°V ASI)

Les trois premières images de la Figure 9 montrent l'apparition d'un dard liquide qui pénètre dans la chambre au cours de l'introduction de carburant, tandis qu'une enveloppe de carburant évaporé entoure le dard liquide. La région brun foncé montre l'étendue maximale des gouttelettes de carburant liquide (au point où les dernières gouttelettes s'évaporent). À l'injecteur, cette région ne contient que du carburant liquide, mais en aval, l'air est entraîné et le carburant se vaporise, donc ces vapeurs sont présentes en même temps que les gouttelettes de carburant liquide. Initialement, le carburant liquide couvre la section transversale, comme le schéma 1° ASI le montre. Ensuite, une zone de vapeur de carburant commence à se développer au-delà de la frontière des gouttelettes de liquide (2° ASI). Cette région de vapeur sur les flancs devient plus épaisse lorsque le jet continue à pénétrer, car la largeur de la région liquide augmente plus lentement que la largeur du jet d'ensemble. Vers 3° ASI, la partie liquide du jet ne pénètre plus: la pénétration liquide atteint une valeur maximale. En revanche, la partie vapeur continue de pénétrer dans la chambre et de se mélanger à l'air (images 4 et 5). Des études locales quantitatives ont montré que le mélange air - carburant vapeur ainsi formé est généralement riche, d'une richesse de 2 à 4 [27][30][31][32].

1.2.2.2 Auto inflammation (de 3 à 5°V ASI)

L'auto inflammation du mélange air – carburant vapeur ainsi formé est mal définie, que ce soit spatialement (localisation exacte de l'auto inflammation) ou temporellement. Des premières lueurs de rayonnement sont visibles, et correspondraient à l'apparition de radicaux, situées sur les flancs du jet (de 3 à 3.5° ASI). Rapidement, des hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) apparaissent en volume dans la partie air - carburant vapeur en aval du dard liquide (de 4.5 à 5°V ASI). Ils sont les précurseurs des particules, qui apparaissent de 5 à 6° ASI).

1.2.2.3 Pic de pré mélange (de 4 à 6.5°V ASI)

Le pic de pré mélange dans le dégagement instantané de chaleur présenté sur la Figure 1 coïncide avec la période de forte chimiluminescence due à la formation des HAP dans les zones riches, prouvant ainsi que la montée rapide du dégagement de chaleur correspond à une combustion de type pré mélange riche partiellement homogène. Vers 6° ASI, les premières particules apparaissent suite à la formation des HAP. Ces petites particules provenant de la zone riche, se forment pendant la combustion pré-mélangée. À 6.5 ° ASI, la suie se trouve en aval du jet.

1.2.2.4 Développement de la flamme de diffusion (de 5.5 à 6.5°V ASI)

Entre 5.5 et 6.5° ASI, une flamme de diffusion se forme à la périphérie du jet, entre les produits de la combustion riche de pré mélange (qui contiennent une quantité importante de carburant imbrûlé) et les gaz environnants (air et gaz recirculés éventuels). Vers 6.5° ASI (correspondant au pic de pré mélange dans le dégagement de chaleur), la flamme de diffusion encercle complètement la partie aval du jet (en orange sur la figure). Comme le schéma l'illustre, la longueur de carburant-liquide devient environ 2 à 3 mm plus courte que la forme de la flamme de diffusion, probablement en raison de chauffage local par la flamme.

1.2.2.5 Fin du pic de pré mélange (de 7°V ASI à 9°V ASI)

Le jet continue de grossir et de pénétrer dans la chambre. La concentration en particules continue de croître dans le cœur du jet riche en amont de la flamme de diffusion, la concentration étant maximale dans la partie la plus en aval du jet (en rouge – orange sur la figure).

Vers la fin de la combustion pré-mélange, la dernière partie de l'air pré-mélangé est consommée et les petites particules présentes dans toute la section transversale se trouvent à environ 27 mm à partir de l'injecteur. Comme le schéma 8° ASI le montre, en aval de la région de vapeur de carburant, les particules apparaissent brutalement à travers toute la section du jet à 27 mm. Il y n'a pas de suie visible en aval de cette limite avec du carburant faible producteur de suie.

1.2.2.6 Combustion diffusive quasi-stabilisée (de 9° ASI jusqu'à la fin de l'injection)

Comme la combustion est contrôlée uniquement par la diffusion, l'apparence générale du jet ne montre que des changements modérés. C'est probablement parce que le jet était déjà presque dans un mode contrôlé par le mélange lorsque la combustion pré-mélangée s'est achevée. Comme le schéma 10° ASI le montre, le jet pénètre plus loin, et le tourbillon de tête commence à être bien formé. En outre, la concentration de la suie est plus élevée dans le tourbillon de tête (comme indiqué par les couleurs rouge et jaune). Cette phase continue jusqu'à la fin de l'injection. La Figure 10 représente les différentes zones du jet pendant la phase de diffusion quasi-permanente. Ce schéma typique est semblable en apparence à celui de la Figure 9 à 10° ASI, sauf que le jet est un peu plus grand, et la concentration de la suie dans le tourbillon de tête est plus élevée. Les particules dans le tourbillon de tête sont également encore plus grandes. En outre, les limites de jet dans la Figure 10 ont été dessinées avec un aspect déchiqueté pour suggérer l'apparition de turbulence dans un jet Diesel réel. De plus, au nez de l'injecteur, on peut distinguer la flamme de type pré mélange qui oxyde partiellement le mélange air – carburant. Ensuite, les produits de la combustion incomplète riche de pré mélange deviennent le « carburant » pour la flamme de diffusion. Les particules sont oxydées (en grande partie du moins) par la flamme de diffusion à des températures de l'ordre de 2700K (Figure 10 de droite). La figure de droite sur la Figure 10 donne l'ordre de grandeur des températures moyennes dans les différentes zones. Il est important de noter que même pendant la phase appelée « combustion de diffusion », une partie du carburant est oxydée par la flamme de pré mélange.

1.2.2.7 Fin de la combustion de diffusion (après la fin de l'injection)

Le modèle conceptuel de Dec et al. ne donne aucune information quant à la combustion après la fin de l'injection. C'est à ce jour la phase la moins bien étudiée dans la littérature. En revanche, comme cette partie de combustion est aussi très importante, il y a déjà plusieurs auteurs qui travaillent sur ce sujet. Parmi les recherches, Musculus [22] a mis en évidence un phénomène d'onde d'entraînement, pour expliquer ce qui se passe après la fin de l'injection. Au cours de cette étude, il a aussi développé un modèle phénoménologique qui sera abordé par la suite.

1.3 Différents modes de combustion à allumage par compression

Ces dernières années, les émissions polluantes produites par les moteurs ont été largement réduites pour satisfaire aux normes d'émission qui, de par le monde, sont de plus en plus strictes (Figure 11), afin de protéger l'environnement. La Figure 11 montre que depuis l'apparition de la norme d'émissions, il a eu une diminution drastique des niveaux autorisés, par exemple de 92% pour les NOx entre Euro 1 et Euro 6.

Pour les moteurs Diesels, le principal défi en termes d'émissions polluantes est de réduire simultanément les émissions de NOx et de PM [33]. Même si des systèmes de post-traitement existent (FAP, SCR, LNT) [34] ils restent complexes et coûteux. Par conséquent, les efforts de recherche se poursuivent pour tenter d'obtenir des combustions « propres » tout en maintenant voire améliorant le rendement du moteur. La flamme de combustion

diffusive se caractérise par une richesse à peu près stœchiométrique et une température élevée, très favorable à la formation de NO. Pour résoudre ce problème, une voie est de préparer dans un mélange air-carburant pauvre et homogène pour la combustion, tout en gardant un allumage par compression. Les combustions homogènes de type HCCI ou PCCI, la combustion MK, la combustion UNIBUS, etc. appartiennent à cette catégorie.

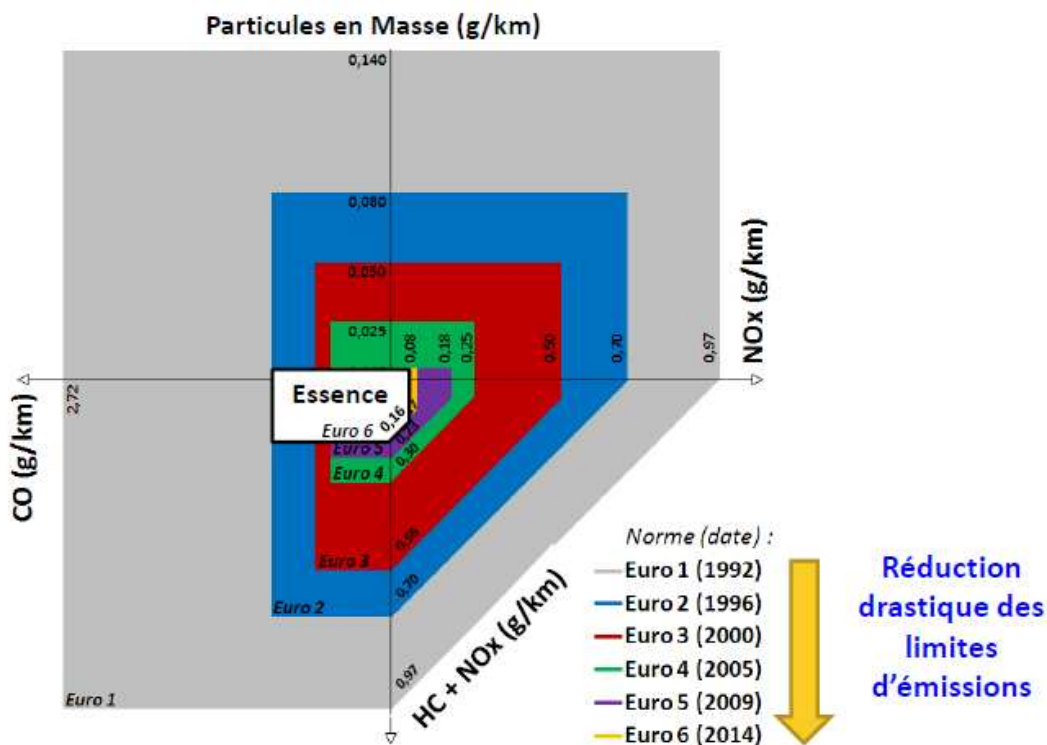


Figure 11 : Evolution des normes européenne d'émission (moteur Diesel)[34]

1.3.1 La combustion homogène (HCCI)

La combustion homogène HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) est un mode de combustion avancé qui combine des caractéristiques issues des deux types de combustion : le mélange air-carburant pré-mélangé et homogène est traditionnellement utilisé dans les moteurs à essence tandis que l'auto-inflammation est utilisée dans les moteurs Diesel. Le mode HCCI est un processus de combustion alternatif qui peut fournir des rendements aussi élevés que les moteurs Diesel à injection directe (CIDI), mais contrairement à ces derniers, les niveaux d'émissions d'oxydes d'azote (NOx) et de particules (PM) sont ultra-faibles, grâce à la faible température de combustion. Les moteurs HCCI fonctionnent sur le principe d'avoir une charge diluée, pré-mélangée qui après avoir été comprimée par le piston, réagit et brûle dans le cylindre « en masse », c'est-à-dire simultanément dans toutes les zones de la chambre de combustion. Par conséquent, contrairement au moteur Diesel conventionnel qui est contrôlé par la combustion de diffusion, ce type de combustion est contrôlé par le mélange air-carburant homogène préparé pendant le délai d'inflammation [35]. La Figure 12 présente une comparaison illustrée des modes de combustion Diesel (CIDI), essence et HCCI.

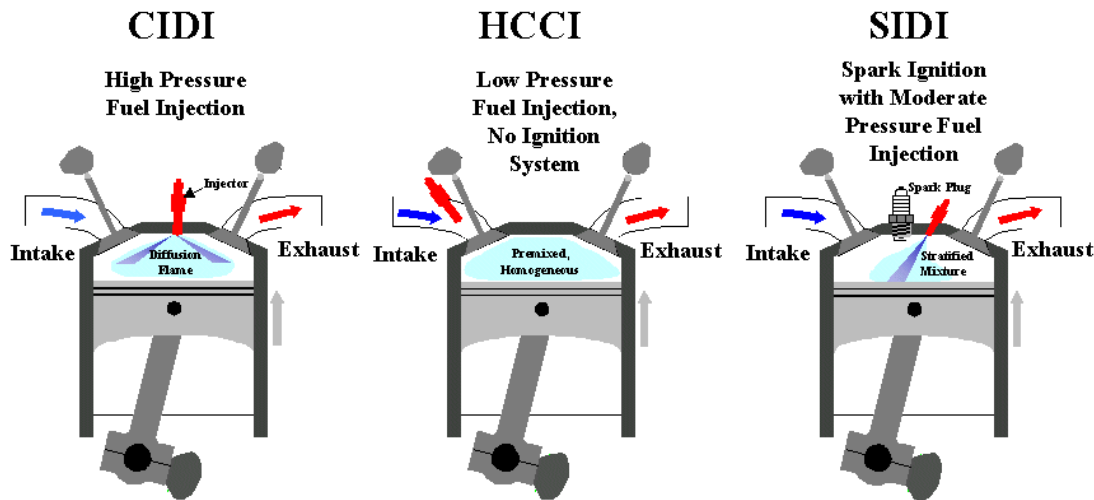


Figure 12: Comparaison des Mode de combustion Diesel, essence et HCCI [35]

Comme l'air et le carburant sont pré mélangés avant l'inflammation, le processus de mélange n'est plus limitant pour la combustion, la combustion HCCI est donc une combustion en masse uniquement contrôlée par la cinétique chimique du mélange. La Figure 13 présente une comparaison illustrée des flammes Diesel, essence et HCCI. On peut constater que, dans la dernière image, aucune flamme n'est visible, mais la combustion HCCI commence à plusieurs endroits en même temps.

Parce qu'il existe suffisamment de temps pour que l'air et le carburant se mélangent avant l'inflammation, les points ou les zones de « mélange homogène » sont toujours en condition pauvre. La combustion HCCI est un mode de combustion qui « distribue » le délai d'inflammation et le dégagement de chaleur de la combustion pré-mélangée conventionnelle uniformément en tous points de la chambre de combustion, afin d'assurer l'efficacité de la combustion tout en réduisant considérablement la température de combustion, supprimant ainsi presque totalement la production de NOx.

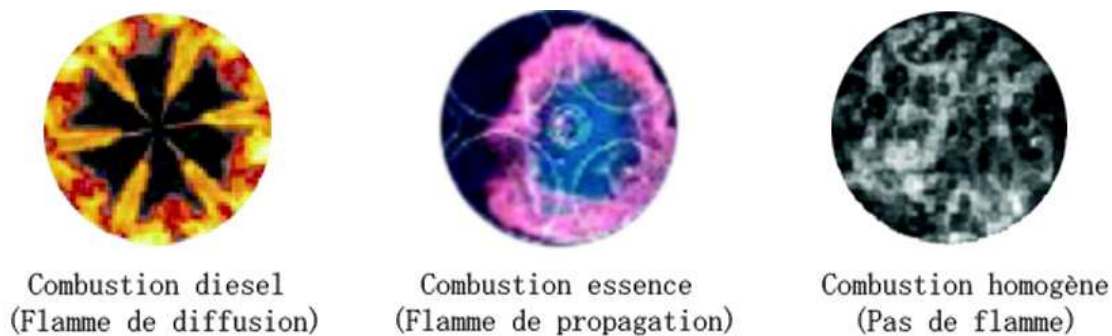


Figure 13: Comparaison des flammes de combustion Diesel, essence et HCCI [36]

Les avantages du HCCI sont nombreux et dépendent du système de combustion auquel il est comparé. Les avantages et les désavantages du HCCI sont résumés ci-dessous :

Les avantages

- Le HCCI permet une économie de carburant de 30% par rapport au moteur à essence classique, pour atteindre les besoins des normes actuelles en émissions.
- Comme le HCCI fonctionne en mélange pauvre, il peut fonctionner à un taux de compression de type Diesel (> 15), ce qui le rend plus efficace que le moteur à essence classique [37].

- Le mélange homogène air-carburant conduit à une combustion plus propre et des émissions plus faibles par rapport à la combustion Diesel et aussi essence. En fait, parce que les pics de températures maximales sont nettement inférieurs à ceux typiques de la combustion essence, les niveaux de NOx sont presque négligeables. En outre, le pré-mélange ne produit pas de suie [38].
- La combustion HCCI peut fonctionner à l'essence, au Diesel, et avec la plupart des carburants de substitution [39].
- Par rapport à l'essence, les pertes par pompage sont plus petites dans le HCCI, ce qui améliore l'efficacité du HCCI [40].

Les désavantages

- Les pics de pression élevés dans le cylindre peuvent causer des dommages au moteur.
- Les taux de dégagement de chaleur et de variation de pression élevés peuvent causer l'usure du moteur.
- L'auto-inflammation est difficile à contrôler pour le HCCI, contrairement à la combustion essence qui est contrôlée par les bougies et la combustion Diesel qui est contrôlée par les injections de carburant dans le cylindre [41].
- La plage d'utilisation du HCCI est réduite, limitée à faible charge par les limites d'inflammabilité, et limitée à charge élevée par des restrictions de pression dans le cylindre[42].
- Les émissions avant catalyseur de monoxyde de carbone (CO) et d'hydrocarbures (HC) sont supérieures à la combustion essence, à cause de l'oxydation incomplète (en raison d'une combustion rapide et de températures faibles dans le cylindre principalement)[43].

1.3.2 La « combustion froide »

1.3.2.1 Principal général

La combustion froide vise à réduire simultanément les émissions de NOx et PM du moteur Diesel. Différents travaux [44][45][46] montrent que, à faible richesse, si la température locale dépasse 2200 K, il y a beaucoup de production de NOx. En revanche, à forte richesse, pour éviter les zones qui produisent les suies, il faudrait encore diminuer le pic de température maximal. Si on peut faire en sorte que la température de combustion reste toujours en dessous de 1650 K, quelle que soit la richesse, on peut réussir à éviter les zones qui produisent les NOx et les suies. Par rapport à la combustion Diesel typique, la combustion froide augmente la quantité de mélange air-carburant avant l'auto inflammation, ou utilise beaucoup d'EGR. Le mélange est dilué par l'air ou l'EGR, cela diminue la température de combustion, et donc les NOx. En outre, le mélange homogène avant l'auto inflammation réduit l'importance des zones riches, et donc les suies [25].

Bien qu'on puisse considérer que la combustion HCCI est une combustion froide, il y a plusieurs autres façons d'obtenir des combustions froides.

1.3.2.2 Smokeless Rich Combustion

Le concept de « Smokeless Rich Combustion » a d'abord été présenté par TOYOTA [44] [47]. La « Smokeless Rich Combustion » dispose d'un rendement élevé comme la combustion Diesel conventionnelle, tout en produisant de très faibles émissions de NOx et de suie. Particulièrement, la « Smokeless Rich Combustion » offre la possibilité de générer un mélange air-carburant riche dont le gaz d'échappement ne contient aucune suie. Selon Aceves et al. [45], ce gaz d'échappement est idéal pour la régénération des pièges à NOx, qui sont considérés comme un équipement efficace pour le post-traitement des NOx de la combustion Diesel. Tandis que la régénération de piège à

NOx dans le moteur Diesel conventionnel cause généralement une perte d'énergie, l'échappement de la « Smokeless Rich Combustion » peut régénérer un piège à NOx sans perte d'énergie, améliorant considérablement le potentiel des pièges à NOx [45].

La « Smokeless Rich Combustion » est réalisée en faisant fonctionner le moteur à des niveaux très élevés de taux d'EGR froid (au moins 60 %) avec un mélange stœchiométrique ou riche, afin de maintenir la température à l'intérieur du jet de carburant Diesel suffisamment faible (<1600 K) pour que les particules ne puissent se former. Mais la nécessité d'un taux élevé d'EGR restreint son application aux faibles charges. À charge élevée, des problèmes d'augmentation de HC et CO apparaissent. De plus, le piège à NOx doit être régénéré par injection de carburant dans l'échappement, ce qui diminue l'efficacité du système. La Figure 14 montre la zone de fonctionnement pour la « Smokeless Rich Combustion ». Cette zone sans suie pour des conditions de mélange riche est indiquée sur la gauche de la figure. Inspiré par ce régime de combustion, plusieurs chercheurs ont continué à travailler pour étendre la gamme de fonctionnement [48]. Pour plus de détails on pourra se référer à [45].

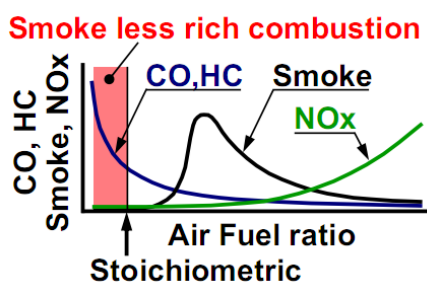


Figure 14: Le concept de combustion froide proposé par Toyota [49]

1.3.2.3 Combustion MK

Kimura a trouvé que quand on utilise beaucoup d'EGR ($\approx 30\%$), avec un taux de swirl élevé (de l'ordre de 3 à 5) et une injection retardée (plus proche du point mort haut), les émissions de NOx et de suie diminuent en même temps [50][51]. Il a défini ce mode de combustion comme la « Modulated Kinetics Combustion » ou la combustion MK. L'utilisation de taux élevés d'EGR conduit à prolonger le délai d'auto-inflammation et assure un mélange suffisant avant l'inflammation. Par conséquent, la production de suie est diminuée sensiblement. En même temps, l'augmentation du taux de swirl diminue la production de HC et SOF (Soluble Organic Fraction), tandis que le retard à l'injection et la diminution de la température de combustion diminuent la production des NOx. Comme le phasage de l'injection et le phasage du démarrage de la combustion restent liés, on peut contrôler le phasage de la combustion plus facilement que dans la combustion HCCI. Néanmoins, à cause du retard à l'injection, la plupart de la combustion se passe pendant la course de détente, et l'efficacité thermodynamique diminue, avec l'augmentation du risque de « raté de combustion ». En outre, parce que la durée d'injection dans les zones des charges élevées augmente, il faudrait un délai d'inflammation plus long pour garantir que tous le carburant entre dans le cylindre avant l'inflammation. Cependant, la charge plus élevée conduit à l'augmentation de la température de l'EGR, et par suite à la diminution du délai d'inflammation. Donc, la combustion MK reste limitée à des faibles charges.

1.3.2.4 Combustion UNIBUS

Le concept de la combustion UNIBUS (Uniform Bulky Combustion System) a d'abord été présenté aussi par TOYOTA [52]. La combustion UNIBUS initiale forme un mélange homogène en avançant l'injection, augmentant la pression d'injection, en réduisant la durée d'injection et en utilisant de l'EGR [52][53]. Dans les travaux présentés, ce concept de combustion utilise la stratégie de double injection (Figure 15) [54]. En contrôlant le moment et la

quantité de carburant injectée en fonction de la température et de la pression d'admission, le carburant commence à réagir à basse température sans combustion. Par contre, la 2^{ème} injection vers le PMH, est la clé de la combustion. On peut contrôler le phasage de la combustion en changeant le moment de la 2ème injection.

Bien que du carburant soit injecté pendant la combustion UNIBUS comme pendant la combustion Diesel conventionnelle (Figure 15), les deux cas ne sont pas exactement les mêmes. Le mode UNIBUS utilise une gamme de température entre la température d'évaporation de carburant et la température de décomposition de carburant. Pour la combustion Diesel conventionnelle, la flamme à la température élevée, supérieure à la température de décomposition de carburant, peut décomposer le carburant immédiatement. Comme cette décomposition n'est pas complète, elle cause l'apparition de suies. Par contre, dans la combustion UNIBUS, la température de flamme ne suffit pas pour décomposer le carburant mais suffit pour l'évaporer complètement. Ainsi, l'apparition de suie est évitée. En conséquence, ce mode de combustion peut diminuer les émissions de NOx et de suies à un niveau très bas. En plus, en mode de combustion UNIBUS, l'augmentation de pression d'admission diminue fortement le taux de montée en pression, ce qui permet d'éviter le « Diesel knock » [54][55]. Cependant, même si l'augmentation de la pression d'injection peut réduire le taux de formation de la suie, il augmente aussi la formation des NOx. En outre, l'augmentation de la charge augmente simultanément la formation des suies et des NOx [56].

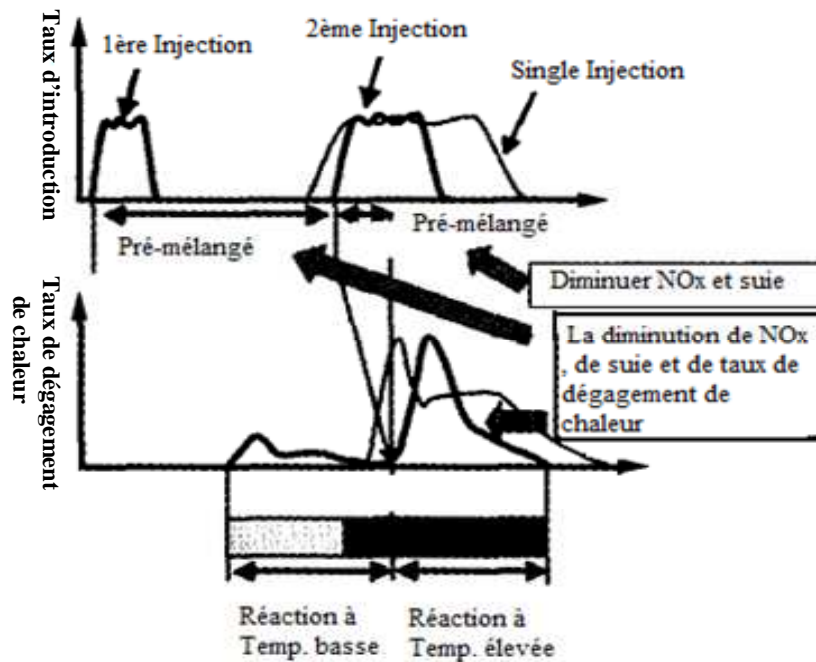


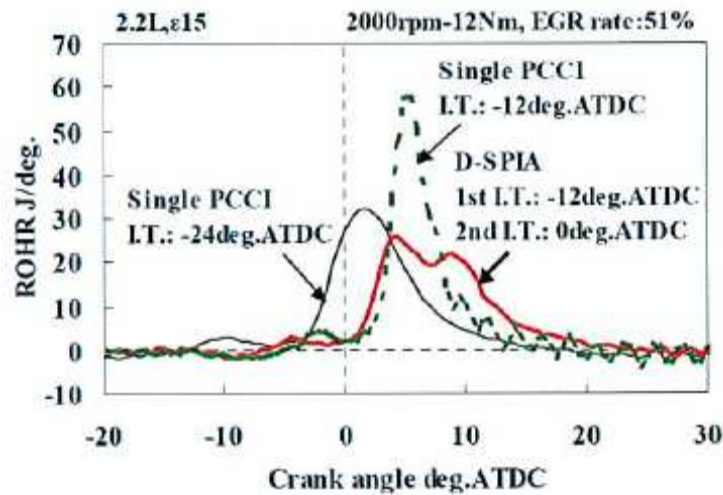
Figure 15: Stratégie de Combustion UNIBUS [54]

1.3.2.4 « Part premixed Combustion »

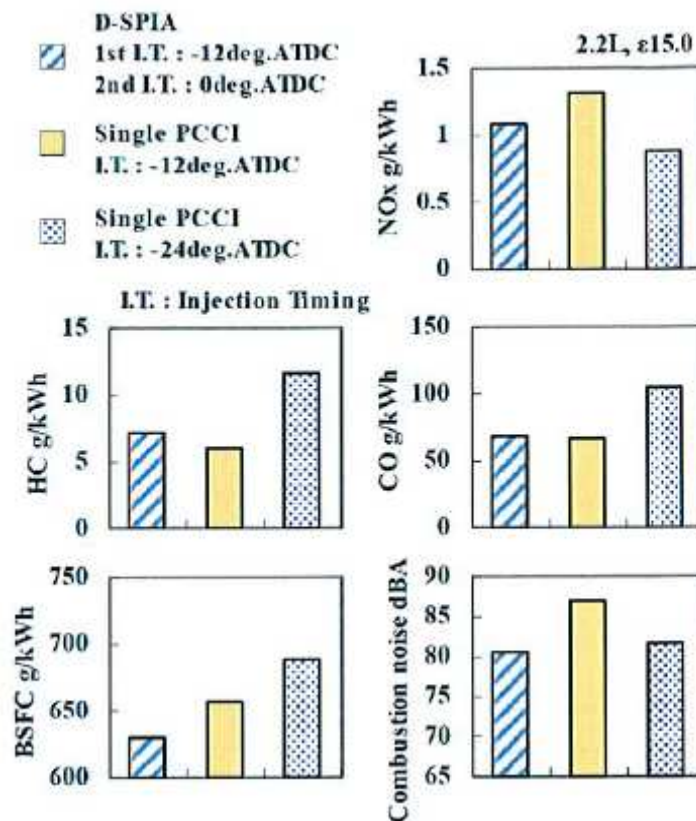
La « Part premixed Combustion » ou combustion partiellement pré mélangée est une combustion qui peut ajuster le ratio de combustion en pré-mélange ou en diffusion. Ce type de combustion est réalisé par l'injection directe de carburant assez tôt au cours de la compression, qui laisse une période très longue pour former un pré-mélange, ou par l'injection d'une partie du carburant à l'admission, afin d'obtenir une part du mélange homogène. La « Part premixed Combustion » peut réduire les émissions de NOx à un niveau très bas, néanmoins, elle va causer du « engine knock » quand la quantité d'injection est trop grande [57]. Donc, cela limite les zones d'opération pour ce mode de combustion. De plus, la « Part premixed Combustion » conduit toujours à une réduction du rendement de combustion et à une augmentation des HC [57][58]. Si on n'utilise pas d'EGR, les émissions de HC et le bruit de combustion seront beaucoup plus grands que pour la combustion HCCI [59].

1.3.2.5 Combustion Double Pré-mélange

La combustion double pré-mélange est un concept basé sur la « Part premixed combustion » présenté ci-dessus avec l'injection simple. Le régime de « Part premixed combustion » avec une injection précoce dans la phase de compression, augmente les émissions de HC et la consommation de carburant. Au contraire, une injection simple vers le PMH réduit les émissions de HC et la consommation mais conduit à une augmentation des NOx et du bruit. Une double injection permet de concilier les avantages des deux stratégies d'injection simple et réaliser un compromis.



(a) : Comparaison de taux de dégagement de chaleur



(b) : Comparaison des émissions polluantes

Figure 16: Comparaison de la combustion double pré-mélange et la « Part premixed combustion » [60]

La Figure 16 montre la comparaison du taux de dégagement de chaleur des émissions, du bruit de combustion et de la consommation de carburant pour trois profils d'injection, réalisés par H. Kuzuyama et al [60]. Tout en maintenant le rendement de combustion par rapport à l'injection simple, la stratégie de double injection en pré mélange diminue le pic de taux de dégagement de chaleur, par conséquent donne une combustion plus lissée par rapport à l'injection simple et retardée, parce que la masse totale injectée est divisée en deux phase différentes. Les niveaux des émissions polluantes sont comparables au cas de l'injection simple.

Par ailleurs, comme la température maximale de la combustion est moins élevée par rapport à l'injection simple, il y a aussi moins de pertes aux parois, ce qui explique la diminution de la consommation spécifique.

1.3.2.6 Etudes de la combustion froide

Aceves [45] a utilisé un mécanisme de mélange simplifié et un mécanisme détaillé de cinétique chimique, et a établi un modèle de spray pour simuler le processus d'introduction, de vaporisation, et de combustion des gouttelettes à basse température. Son étude a montré que les précurseurs de suies forment une courbe en cloche gaussienne avec l'augmentation de l'EGR (Figure 17). Zheng [46] a également constaté des tendances similaires. En outre, la formation de précurseurs de suie est liée à la température des gaz dans le cylindre et au temps caractéristique de mélange.

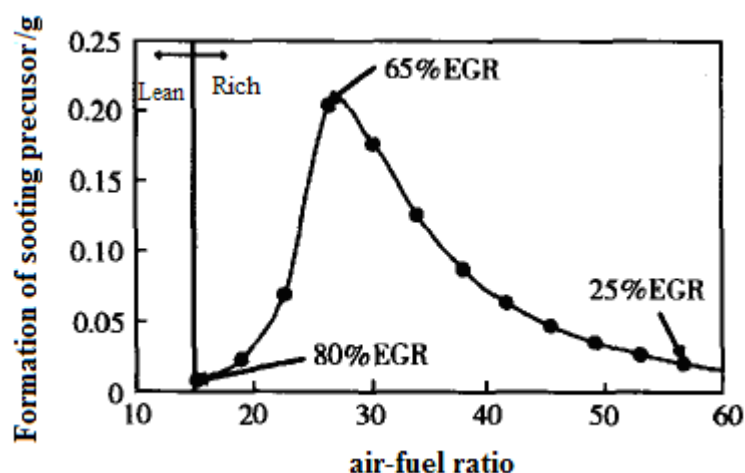


Figure 17: Formation de précurseur de suie en fonction de l'EGR ($\Phi=0.2$) [45]

Alriksson et al [61] ont essayé plusieurs modes de combustion froide sur un moteur DI Diesel turbo. Des études montrent qu'avec un taux de compression de 14, et un taux d'EGR de plus de 60 %, il est possible de dépasser 50 % de la charge maximum, tandis que les émissions de NOx et de suie peuvent être maintenues à des niveaux très bas. Toutefois, les émissions de HC, de CO et la consommation de carburant augmentent considérablement. Si on utilise le taux d'EGR de 50 %, la consommation de carburant peut être maintenue à un niveau bas, mais alors, il est nécessaire d'installer un dispositif de post-traitement pour les NOx.

Musculus [62] a utilisé des diagnostics par imagerie laser sur un moteur à faible charge (pression moyenne indiquée (IMEP) de 0.4 MPa), à l'introduction avancée (l'injection commence à 22 °CA ATDC), et à la combustion froide (température de flamme adiabatique d'environ 2170 K). Il a étudié le processus d'introduction, le mélange, la combustion et le processus de formation des polluants. Les photographies rapides ont montré que par rapport à la combustion Diesel conventionnelle, la pénétration du carburant est environ deux fois plus grande. Il y a donc une grande probabilité d'avoir un mouillage des parois. Avant l'inflammation, il constate l'émission d'OH dans toute la zone du spray, et pas seulement autour du spray comme en combustion Diesel classique. Cela illustre un mélange

air-carburant meilleur, et plus pauvre. La formation de NOx ne se limite pas au pourtour du spray, mais a lieu dans tout le spray. La formation de suie est concentrée dans la région de vortex à la tête du spray, car la concentration de carburant y est plus grande, et la vitesse de mélange plus lente.

S. Kook [63] a étudié les effets de la dilution de l'air d'admission et du phasage de l'injection sur la combustion froide et les émissions d'un petit moteur Diesel. En modifiant les quantités de N₂ et CO₂ à l'admission, il a réussi à simuler un taux d'EGR de 0 % à 65 %. La Figure 18 montre dans quelle mesure deux stratégies de combustion différentes permettent d'éviter la formation des suies et des NOx. La stratégie A consiste en une injection retardée (au voisinage du PMH) avec un taux d'EGR moyen (fraction d'oxygène de 15 %) tandis que la stratégie B utilise une injection plus précoce (-20 ° avant PMH) et un taux d'EGR plus élevé (fraction d'oxygène de 10 %).

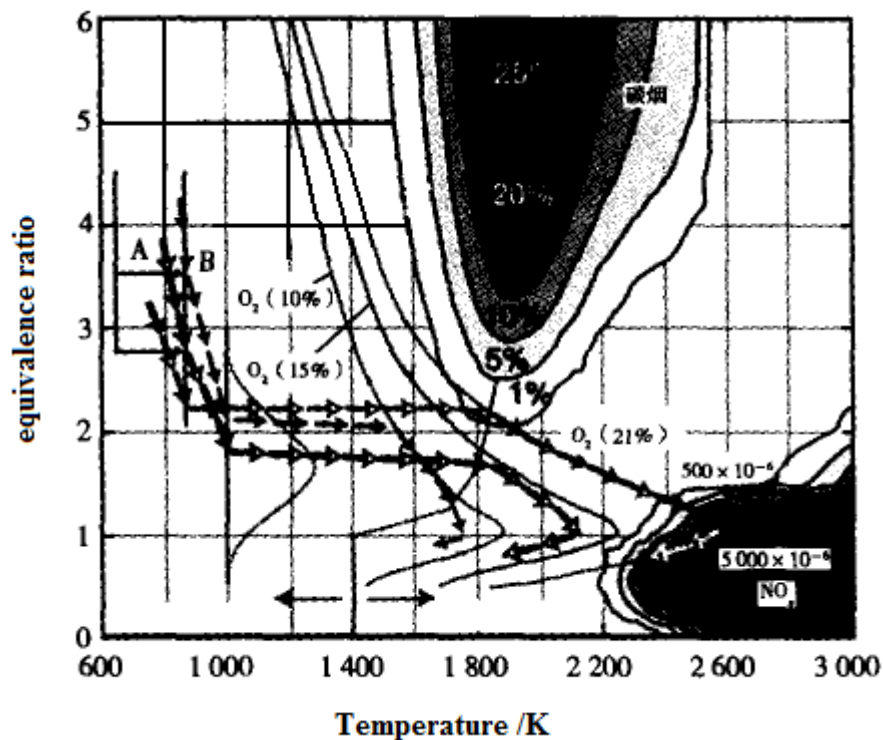


Figure 18: 2 stratégies pour la combustion froide [63]

L'étude montre que la richesse locale ne diminue pas avec l'augmentation de l'EGR, parce que même si le délai d'inflammation est prolongé, la fraction d'oxygène dans le mélange est également réduite. Il y a donc besoin de plus de temps pour mélanger l'air et le carburant et atteindre la même richesse. Par conséquent, la phase de pré-mélange contrôlée a encore un rôle important pour la formation des émissions polluantes. La photographie à haute vitesse a montré que la luminosité de la suie apparaît seulement à partir de la deuxième moitié de la combustion pré-mélangée, et lorsque la dilution du mélange augmente, la luminosité de la suie diminue et sa distribution est plus homogène.

Choi et al [64] ont analysé les effets de plusieurs paramètres (la température d'admission, la pression d'injection, le taux de turbulence, etc.) sur le processus de la combustion froide et la formation des suies. Les résultats ont montré que l'augmentation de la pression d'injection peut favoriser le mélange au début, réduire la luminosité de la suie, et augmenter le pic du taux de dégagement de chaleur. A faible charge (PMI de 0.3 MPa), le taux d'oxydation des suies augmente légèrement avec l'augmentation de la pression d'injection. Par contre, le changement du taux de turbulence a un effet notable sur la combustion diffusive. À faible charge, l'augmentation du taux de turbulence accélère le taux de dégagement de chaleur à la fin du cycle, en conséquence, le pic de la luminosité de suie diminue, mais l'augmentation des pertes thermiques conduit à une diminution du rendement thermodynamique. A plus forte charge

(PMI de 0.6 MPa), il existe un taux de turbulence optimal, pour lequel l'efficacité thermique et le taux d'oxydation des suies peuvent atteindre leur maximum. Lorsque la température d'admission diminue, le taux de dégagement de chaleur au-début et la luminosité des suies diminuent significativement, mais le taux d'oxydation des suies ne change pas. Pour une température d'admission minimum (30 °C), il y a encore une formation de suie considérable, ce qui indique que la température d'admission n'est pas suffisante pour réduire les émissions de suies à des niveaux satisfaisants.

Noehre et al [65] ont étudié les caractéristiques de la combustion pré-mélangée. Ils ont constaté qu'une pression d'admission élevée peut élargir la zone de combustion pré-mélangée. En effet, l'augmentation de la pression d'admission accélère l'évaporation du carburant et l'entraînement de l'air, et offre la possibilité d'utiliser plus d'EGR pour diminuer la température de combustion à un niveau très bas, ce qui réduit les émissions de suies. Toutefois, la zone qui peut permettre aux NOx, aux suies et à l'efficacité de combustion, d'atteindre le niveau désiré est toujours très étroite (Figure 19). Le niveau d'émission de NOx dans la figure correspond à l' « Emissions Index », qui est défini ci-dessous :

$$I_E = \frac{m_{NOx}}{m_{fuel}} \cdot 1000 \quad \text{Éq. 2}$$

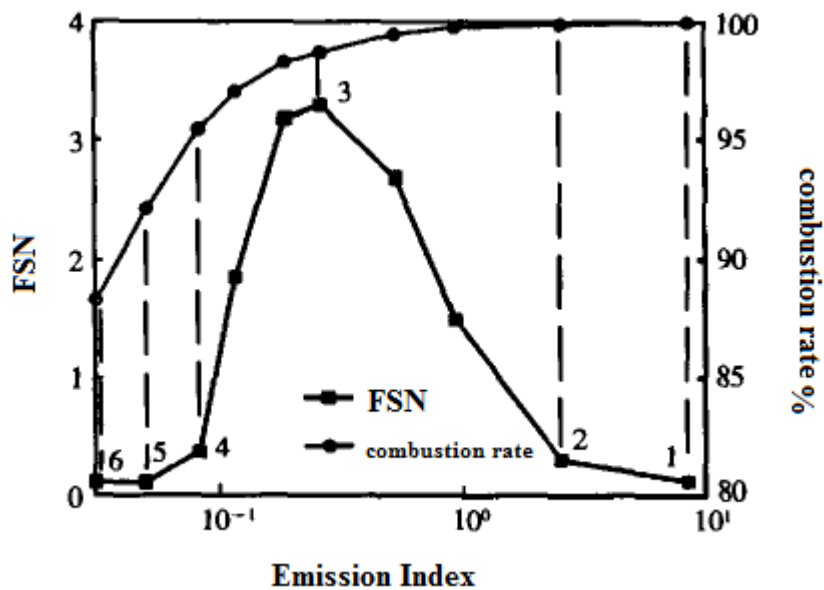


Figure 19: Relations entre le NOx, la suie et l'efficacité de combustion ($P_{admission}=0.25$ MPa) [65]

Reitz et al. ont aussi fait beaucoup de recherches sur le mécanisme de la combustion froide [66][67][68][69]. Parmi eux, Yun et al. [66] ont utilisé un algorithme génétique pour optimiser 4 paramètres sur un moteur Diesel HSDI : l'avance à injection, la pression d'admission, le taux d'EGR froid et la pression d'injection. Ils ont obtenu des points de fonctionnement avec des caractéristiques similaires à la combustion MK, c'est à dire un long délai d'inflammation, et une courbe du taux de dégagement de chaleur qui augmente en deux temps, avec un petit pic avant le dégagement de chaleur de pré-mélange principal. Dans ce mode de combustion, la préparation initiale du mélange et le mélange à la fin du cycle sont les facteurs clés pour contrôler des émissions. L'étude a également examiné la relation entre la pression d'injection, la post-injection et les émissions. Les résultats ont montré qu'avec l'augmentation de la pression d'injection, les émissions de suies diminuent, mais les émissions de NOx augmentent.

La post-injection peut améliorer le mélange à la fin du cycle et réduire les émissions de suies, sans augmenter les NOx. Il faut noter que l'intervalle entre deux injections est très important [66][68].

Dans l'étude d'Akihama et al. [47], il est néanmoins indiqué que cette réduction des suies s'accompagne en contrepartie d'une augmentation de la partie soluble des particules, si bien que l'utilisation d'un catalyseur d'oxydation devient a priori nécessaire. De plus, les niveaux de charge considérés dans le cadre de cette étude se limitent encore à des niveaux de très faible charge ou de ralenti.

Pickett et Siebers [70][71][72][73][74] ont aussi analysé les facteurs qui permettent d'obtenir la disparition des suies pour un jet de carburant stabilisé. Grâce à des expériences effectuées dans une chambre de combustion à volume constant, ils mettent ainsi en évidence deux voies distinctes permettant d'atteindre ce régime de combustion prometteur [36]:

- La première solution consiste à réduire la richesse locale au niveau de l'accroche de flamme (« lift-off ») en dessous d'un seuil fixé expérimentalement à 2. De manière simplifiée, la première solution proposée par Siebers et Pickett consiste donc à réduire les suies par le contrôle de la richesse locale au sein de la flamme (limite inférieure sur le diagramme température-richesse).

- La deuxième solution, applicable même pour une richesse locale supérieure à 2 au niveau de l'accroche de flamme, consiste à diluer le mélange avec de très forts taux d'EGR. Dans ce cas, la disparition des suies dans la flamme est attribuée par les auteurs aux faibles températures dans la flamme. Cette condition se rapproche donc énormément des mécanismes de combustion froide décrits précédemment.

Les résultats de Siebers et Pickett sont obtenus avec des jets stabilisés dans une enceinte de grand volume, mais dans une certaine mesure ils illustrent le fait que les mélanges non homogènes peuvent aussi conduire à la combustion froide.

Très récemment, Musculus et al. ont proposé un modèle conceptuel pour les combustions partiellement pré mélangées à basse température [75][76]. D'une philosophie similaire au modèle conceptuel proposé par Dec pour la combustion Diesel classique, il s'appuie sur des expérimentations faisant appel à des techniques de diagnostic optique et sur des calculs de cinétique chimique. Il se décline en trois versions : gros moteur (Figure 20) et petit moteur, en distinguant pour ce dernier les cas d'une injection précoce ou tardive (Figure 21). Dans tous les cas, les combustions sont diluées par de l'EGR, se passent à basse température et correspondent à des faibles charge moteur. Il apparaît notamment une pénétration et longueur liquide pour le spray modifiées du fait de l'injection dans une ambiance de densité réduite, une inflammation en deux étapes, quasi simultanément dans tout le spray. L'influence de l'impact du spray sur la paroi et du swirl dans le cas des petits moteurs est également soulignée.

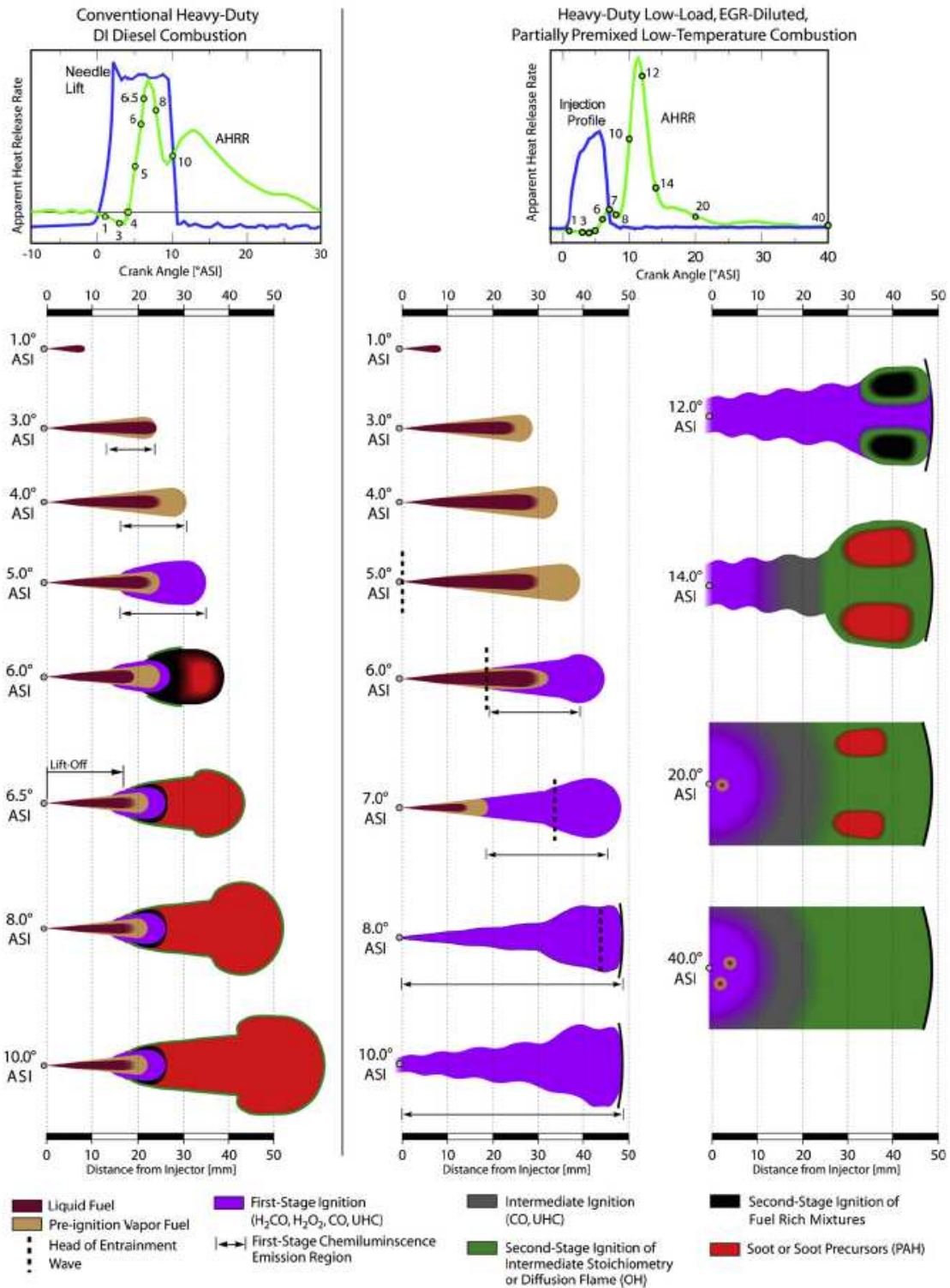


Figure 20 : Modèle conceptuel de Musculus pour les combustions à basse température partiellement pré mélangées et comparaison avec la combustion Diesel classique - Cas d'un gros moteur

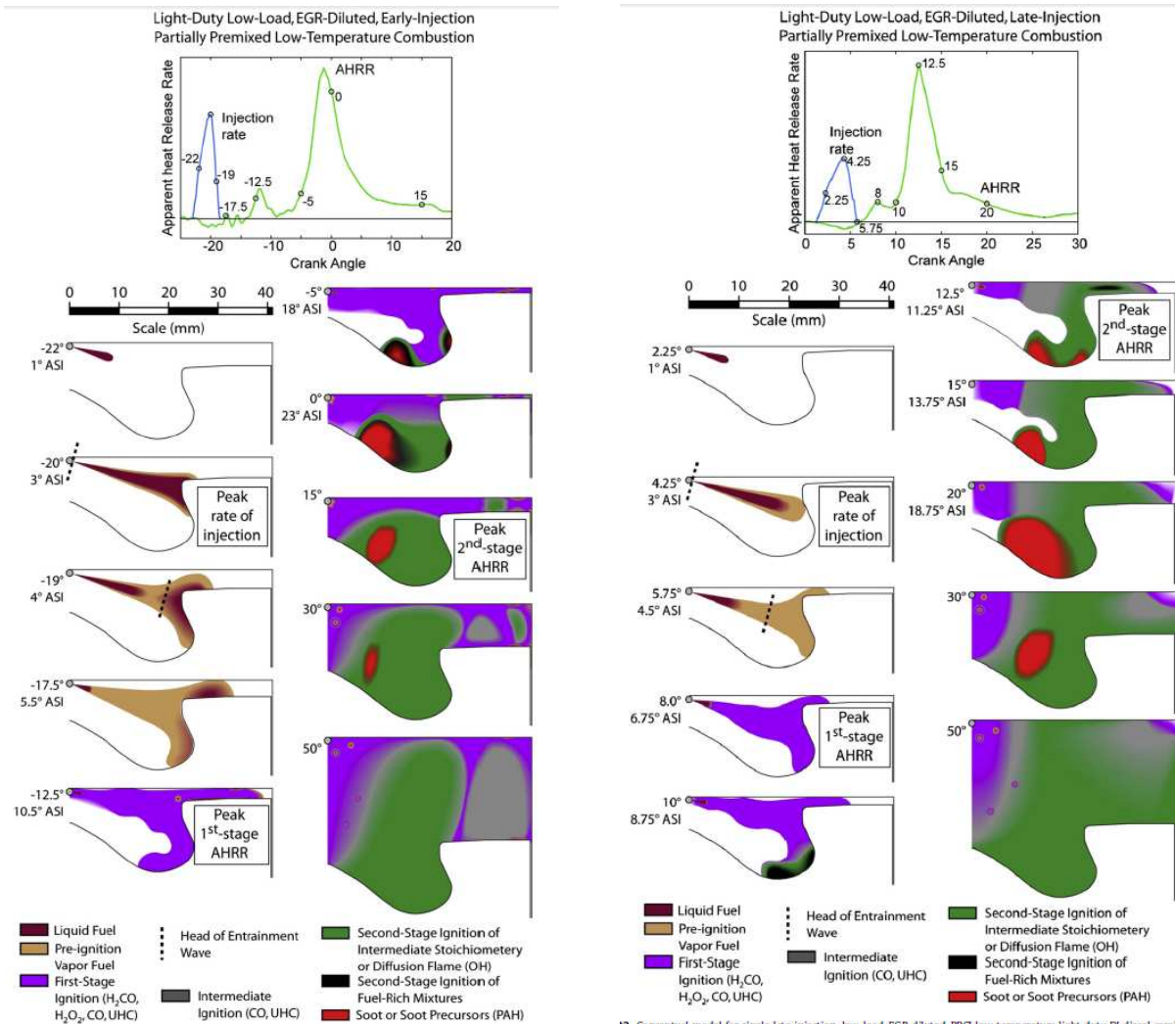


Figure 21 : Modèle conceptuel de Musculus pour les combustions à basse température partiellement pré mélangées Cas d'un petit moteur pour une injection précoce (gauche) ou tardive (droite)

1.4 Différents types de modélisation de la combustion Diesel

Durant ces dernières années, des améliorations technologiques considérables ont été apportées aux moteurs Diesel rapides, avec une augmentation du rendement et une remarquable réduction des émissions et du bruit de combustion. Ces améliorations ont été réalisées avec l'introduction des systèmes complexes impliquant un grand nombre de dispositifs tels que la recirculation de gaz d'échappement (EGR) ou les systèmes d'injection à haute pression à rampe commune ou « Common rail ». De nouvelles stratégies de combustion de type PCCI / HCCI sont également apparues. Ces développements dans la technologie du moteur impliquent un fort développement des modèles numériques correspondants. De plus, la simulation numérique joue un rôle de plus en plus important dans les processus de conception, de développement et de mise au point des moteurs à combustion interne.

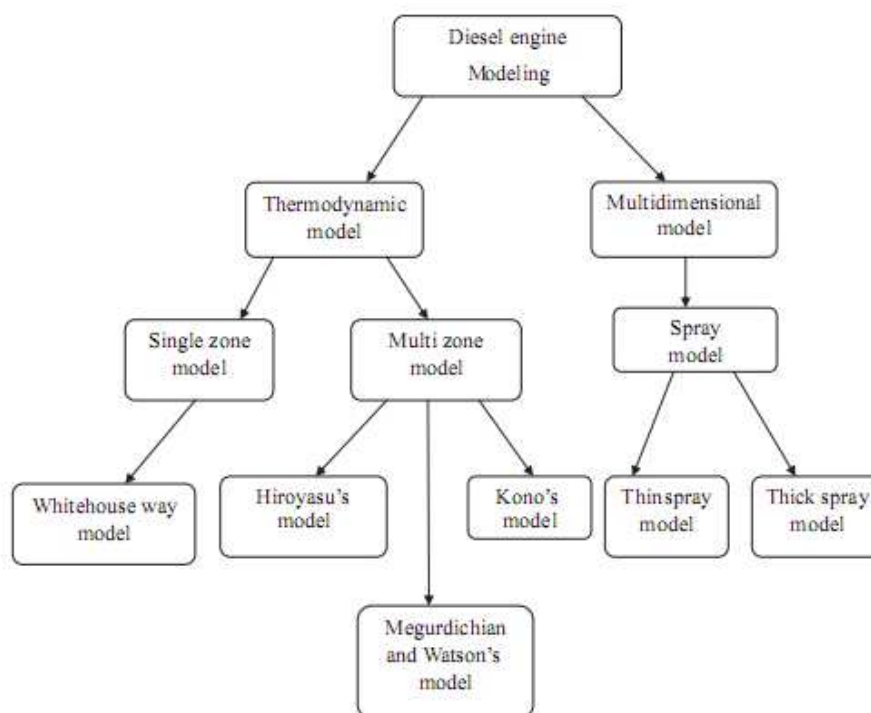


Figure 22 : Classification de modélisations du moteur Diesel [77]

La modélisation de la combustion est en fait un terme générique qui comprend de nombreuses approches pouvant aller de la simple estimation du délai d'auto-inflammation jusqu'à l'éventuelle prédiction des émissions polluantes. La Figure 22 montre un exemple de classification de modélisation du moteur Diesel. Souvent, les modèles sont classés en fonction de leur caractère dimensionnel (de 0 à 3 dimensions traitées), puis ensuite sous-divisés en nombre des zones. Les modèles phénoménologiques 0D/1D se situent entre les modèles complexes de CFD multidimensionnels qui peuvent offrir des informations très détaillées spatialement mais qui demande un temps CPU très élevé, et les modèles simplifiés et/ou mathématiques (par exemple de type Mean Value Engine Models) [78]. Ils consistent principalement à déterminer le taux de dégagement de chaleur net dQ_c existant pendant la combustion, de façon à pouvoir ensuite évaluer l'évolution de la pression dans le cylindre. Les modèles les plus performants ont également pour objectif de prédire les évolutions (au moins qualitatives) des émissions polluantes.

1.4.1 Modèles de combustion sans description des hétérogénéités

Ces modèles permettent le calcul du dégagement de chaleur lié à la combustion et sont appliqués pour l'évaluation des performances (PMI) ; Ils ne comportent pas de description des hétérogénéités (de richesse et de température) caractéristiques de la combustion Diesel : la richesse et la température sont supposées uniformes dans la chambre de combustion (approche mono-zone) et ces modèles sont par conséquent insuffisants pour évaluer les émissions polluantes.

1.4.1.1 Modèles purement mathématiques

La façon la plus simple de modéliser la combustion dans une approche 0D est de décrire le dégagement de chaleur par une formulation purement mathématique. La plus connue est celle proposée par Vibe[79] :

$$\frac{dQ_c}{d\theta} = \frac{Q_{tot}}{\Delta\theta} \cdot a \cdot (m+1) \cdot y^m \cdot e^{-ay^{m+1}} \quad \text{Éq. 3}$$

Avec :

a : coefficient de Vibe

m : facteur de forme

Q_{tot} : quantité totale d'énergie libérée au cours de la combustion

$\Delta\theta = \theta_1 - \theta_0$: angle vilebrequin entre le début et la fin de la combustion

$y = \frac{\theta - \theta_0}{\theta_1 - \theta_0}$: angle réduit

Q_{tot} est déterminé à partir du PCI (pouvoir calorifique inférieur) et de la masse totale de carburant brûlée au cours de la combustion :

$$Q_{tot} = PCI \cdot m_{c,tot} \quad \text{Éq. 4}$$

L'utilisation d'une double loi de Vibe est courante en combustion Diesel pour tenir compte des phases de combustion de pré-mélange et de diffusion [80][81]. Des équations empiriques sont proposées dans les littératures pour relier les différents coefficients aux paramètres moteurs.

1.4.1.2 Modèles phénoménologiques simples

S'ils ne comportent pas à proprement parler de description des hétérogénéités de température ou de richesse de la combustion, ces modèles distinguent le carburant et l'air, avec généralement plusieurs états pour le carburant : injecté, préparé ou mélangé, brûlé. Des équations phénoménologiques décrivent les passages d'un état à l'autre.

Whitehouse et Way [82] distinguent quatre catégories de carburant : le carburant injecté m_{inj} , le carburant utilisable m_u , le carburant préparé m_{prep} , et le carburant brûlé m_b . Les évolutions respectives sont calculées à partir des équations suivantes:

$$\left\{ \begin{array}{l} m_u = m_{inj} - m_{prep} \\ \frac{dm_{prep}}{d\theta} = K_1 \cdot m_{inj}^{1-x} \cdot m_u^x \cdot P_{O_2}^m \\ \frac{dm_b}{d\theta} = \frac{K_2 \cdot P_{O_2}}{N \cdot \sqrt{T}} \cdot \int \left(\frac{dm_{prep}}{d\theta} - \frac{dm_b}{d\theta} \right) \cdot e^{\frac{Ea}{T}} \cdot d\theta \end{array} \right. \quad \text{Éq. 5}$$

Avec :

K_1, K_2, x, m : constantes

E_a : énergie d'activation

P_{O_2} : pression partielle en oxygène

Le dégagement de chaleur est donc calculé à partir de la masse de carburant brûlé. Par la suite, d'autres chercheurs [83] ont travaillé sur la base de ce modèle en sous-divisionnant le carburant brûlant en deux phases de combustion, de pré-mélange et diffusive. Ils ont également envisagé les stratégies de multi-injection [84].

Dans ce type de modèle, les constantes doivent être modifiées selon les conditions de fonctionnement. Par conséquent, l'application en dehors des points déjà connus est hasardeuse.

Certains auteurs, en particulier Chmela et ces co-auteurs ont cherché à modéliser le dégagement de chaleur de la combustion Diesel en utilisant une modélisation une zone de la turbulence. Dans la premier modèle de Chmela [85], le dégagement de chaleur est décrit en fonction de la quantité de carburant disponible à un instant donné dans la chambre de combustion et d'un terme dépendant de la densité locale d'énergie cinétique turbulente :

$$\frac{dQ}{d\theta} = C_{Mod} \cdot f_1(M_F, Q) \cdot f_2(k, V) \quad \text{Éq. 6}$$

$$f_1(M_F, Q) = M_F - \frac{Q}{LCV} \quad \text{Éq. 7}$$

$$f_2(k, V) = e^{C_{Rate} \frac{\sqrt{k}}{\sqrt[3]{V}}} \quad \text{Éq. 8}$$

La fonction f_1 décrit l'influence de la quantité de carburant disponible actuellement et f_2 décrit la densité locale de l'énergie turbulente cinétique. La modélisation de la turbulence est réalisée par un paramètre \sqrt{k} qui représente une vitesse de mélange. Pour le calculer, il faut tout-à-bord connaître l'énergie cinétique non dissipée E_{kin} et aussi dissipée $E_{kin,Diss}$:

$$\frac{dE_{kin}}{d\varphi} = 18 \cdot \rho_F \cdot \left(\frac{n}{\mu A}\right)^2 \cdot (V_F')^3 \quad \text{Éq. 9}$$

$$\frac{dE_{kin,Diss}}{d\varphi} = \frac{dE_{kin,F}}{d\varphi} - \frac{C_{Diss}}{6 \cdot n} \cdot E_{kin,F,Diss} \quad \text{Éq. 10}$$

La densité d'énergie cinétique turbulente vérifie finalement :

$$k = C_{Turb} \cdot \frac{E_{kin,Diss}}{M_F \cdot (1 + \lambda_{Diff} \cdot m_{stoich})} \quad \text{Éq. 11}$$

Ce modèle de Chmela (« Chmela 1 ») permet de simuler le dégagement de chaleur pour des points de pleine charge. Ensuite, sur la base d'un modèle zéro-dimensionnel pour la combustion contrôlée par le mélange qui avait été développé plus tôt, un nouvel modèle amélioré (« Chmela 2 ») est développé par Chmela et al. [86]. Dans ce second modèle, comme dans Arsie et al. [83], le carburant qui brûle est divisé en deux parties : une correspond au mode de combustion pré mélangé, et l'autre au mode de diffusion. En supposant que la combustion de diffusion commence en même temps que la combustion pré-mélangée, certaines évolutions ont été apportées par rapport au premier modèle Chmela 1. Tout d'abord, le processus d'évaporation est estimé et permet d'évaluer la masse disponible pour la combustion de diffusion en remplacement de la masse de carburant totale. Ensuite, la dilution est prise en compte par le biais de la concentration en oxygène et il est donc possible de prendre en compte les effets de l'EGR. Enfin, le temps de transport pour que le spray de carburant atteigne la flamme est pris en compte.

Finalement, dans un troisième modèle [87] (« Chmela 3 »), des raffinements supplémentaires sont proposés. Le modèle Chmela 3 traite de manière différenciée la partie diffusive pendant la phase quasi établie de jet et la partie

diffusive après la fin de l'injection. Outre l'utilisation d'une approche séquentielle en deux étapes pour la description de la combustion de diffusion, les effets de l'interaction avec la paroi sont pris en compte et des formulations à base de physique sont proposées pour le délai d'inflammation et la combustion pré-mélangée.

Inspiré par les travaux de Chmela et al., Barba et al. [88] proposent un modèle qui découpe la combustion Diesel en deux phases comme dans le modèle Chmela 2. Cependant, contrairement au modèle Chmela 2, où la partie pré-mélange est modélisée par une loi d'Arrhenius, la phase de combustion en pré-mélange est ici modélisée par deux modes de combustion. Dans un premier temps, la combustion est assimilée à la propagation d'un front de flamme dans la zone air - carburant pré mélangée et homogène. Ensuite, un autre mode de combustion continue à brûler le carburant non-brulé dans le mode 1, simultanément dans toute la zone air – carburant. Une analyse plus détaillée de ces deux modes de combustion a été effectuée par Maiboom [89].

La Figure 23 illustre un exemple de résultat obtenu avec le modèle de Barba. Cette figure permet de mettre en évidence les interactions existant entre ces deux phases de combustion.

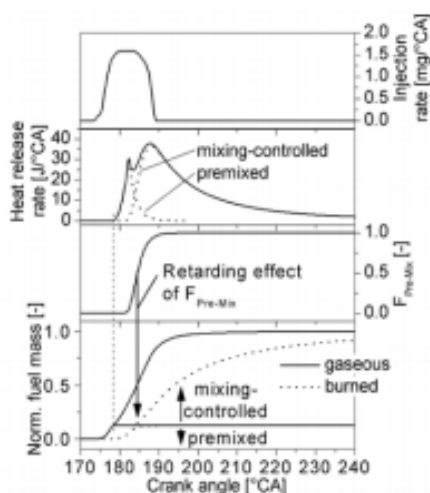


Figure 23 : Modélisation de la combustion Diesel avec le modèle de Barba [88]

En plus, par rapport au modèle « Chmela 2 », ce sous-modèle de combustion avec deux modes permet de prendre en compte l'évaporation du carburant, l'entraînement de l'air, et avec un autre sous-modèle l'impact aux parois.

1.4.2 Modèles de combustion avec description des hétérogénéités

Les émissions polluantes étant liées à la température et la composition locales des gaz au cours de la combustion, pour pouvoir calculer les émissions à l'aide d'un code de calcul, il est indispensable de découper la chambre de combustion en plusieurs zones pour prendre en compte les hétérogénéités de richesse et de températures.

Il est possible de classer ces modèles multizones suivant plusieurs critères, par exemple par le nombre des zones, ou par la dimension de modèle (0D / Quasi-1D / 1D). Ici, le choix a été fait de regrouper les modèles suivant les différents modes de découpage en zones : découpage « qualitatif » ou découpage « systématique ». Ensuite, chaque groupe de modèles est encore sous-divisé, suivant des critères supplémentaires. Pour des modèles à découpage « qualitatif », on peut distinguer entre les modèles « sans le calcul de spray » qui divisent la chambre en plusieurs zones thermodynamiques sans aucune localisation, et une autre catégorie où la définition des zones est liée à un calcul de spray. Pour des modèles avec découpage « systématique », on peut distinguer entre les approches Lagrangiennes et Eulériennes.

1.4.2.1 Modèles avec découpage qualitatif, sans calcul de spray

Récemment, K. Hegarty et al. [90] ont couplé un sous-modèle d'émissions de NOx avec le modèle de combustion original de Vibe. Le modèle de Vibe calcule la température moyenne et le taux de dégagement de chaleur, puis une équation à partir du décalage entre la température moyenne et la température de la flamme est introduite. La température combinée pour déterminer la formation des NOx est évaluée comme ci-dessous :

$$T = T_{IDEAL} + \left[(T_{FLAME} - T_{IDEAL}) ROHR^{\frac{1}{12}} \right] \quad \text{Éq. 12}$$

Où T_{IDEAL} et T_{FLAME} sont respectivement la température moyenne calculée par la loi de gaz parfait, et la température adiabatique de la flamme. La formation de NO est calculée par une approche simplifiée de Zeldovich. Bien que ce modèle soit mono-zone, généralement, les modèles de combustion avec description des hétérogénéités comportent au moins de 2 zones. L'approche 2-zones consiste généralement à distinguer une zone de gaz brûlée et une zone de gaz frais (air frais et carburant non brûlé). Les sous modèles permettant de caractériser les deux zones sont plus ou moins phénoménologiques.

Ainsi, Heider et al.[91] développent un modèle pour évaluer les émissions de NOx dans les moteurs Diesel. Ce modèle calcule le dégagement de chaleur à partir d'une approche 1-zone. Une équation empirique est ensuite utilisée pour calculer les températures des zones de gaz frais et de gaz brûlés :

$$T_{zone1}(\varphi) - T_{zone2}(\varphi) = B(\varphi) \cdot A^* \quad \text{Éq. 13}$$

$$B(\varphi) = \frac{\int_{\varphi_{SOC}}^{\varphi_{EVO}} (p(\varphi) - p_0(\varphi)) m_{zone1}(\varphi) d\varphi - \int_{\varphi_{SOC}}^{\varphi} (p(\varphi) - p_0(\varphi)) m_{zone1}(\varphi) d\varphi}{\int_{\varphi_{SOC}}^{\varphi_{EVO}} (p(\varphi) - p_0(\varphi)) m_{zone1}(\varphi) d\varphi} \quad \text{Éq. 14}$$

$$A^* = A \cdot \frac{1.2 + (\lambda_{gl} - 1.2)^{0.15}}{2.2\lambda_0} \quad \text{Éq. 15}$$

Avec :

- A : paramètre dépendant les moteurs
- $P_0(\varphi)$: pression cylindre sans combustion
- $m_{zone1}(\varphi)$: masse de la zone de réaction
- SOC : début de la combustion
- EVO : ouverture des soupapes d'échappement

Ishida et al. [92] calculent les deux zones en réalisant des bilans de masse et d'énergie à partir des valeurs moyennes dans le cylindre obtenues par une approche 1-zone. Dans ce modèle, la température de la zone de gaz frais est calculée à partir de la pression avant l'inflammation par un effet de compression adiabatique :

$$T_u = T_0 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \quad \text{Éq. 16}$$

La température de la zone de gaz brûlés est alors obtenue par conservation de l'énergie totale dans le cylindre :

$$m_{cy}(\theta) = m_{air} + m_{res} + m_{inj}(\theta) \quad \text{Éq. 17}$$

$$m_b(\theta) = \left(1 + \lambda(\theta) \cdot \left(\frac{A}{F} \right)_{st} \right) m_{bf}(\theta) \quad \text{Éq. 18}$$

$$m_u(\theta) = m_{cy}(\theta) - m_b(\theta) \quad \text{Éq. 19}$$

$$T_b = \frac{m_{cy}c_{v,cy}T_{cy} - m_u c_{v,u}T_u}{m_b c_{v,b}} \quad \text{Éq. 20}$$

Avec :

- m_{res} : masse de gaz résiduels
- m_b : masse de gaz brûlés (air consommé + carburant brûlé)
- m_{bf} : masse de carburant brûlé
- m_u : masse de gaz non brûlés (air frais + carburant injecté non brûlé)
- $\lambda(\theta)$: excès d'air instantané
- $\left(\frac{A}{F}\right)_{st}$: rapport air / carburant stœchiométrique
- $c_{v,cy}, c_{v,ub}, c_{v,b}$: capacités calorifiques à volume constant des gaz dans le cylindre, dans la zone de gaz non brûlés, et dans la zone de gaz brûlés respectivement
- P_0, T_0 : pression et température avant inflammation

D'une façon similaire, Rakopoulos et al. [93] développent un modèle 2 zones avec un traitement spécifique pour le taux de combustion. Dans ce modèle, ils considèrent que la combustion est contrôlée soit par un processus de préparation (mélange), soit par la cinétique chimique. Le taux de préparation P et le taux de réaction R sont représentés ci-dessous :

$$P = Km_f^{1-x} m_{up}^x p_{O_2}^m \quad \text{Éq. 21}$$

$$R = \frac{K' p_{O_2}}{N' \sqrt{T}} e^{-E_{red}/T} \int_0^\varphi (P - R) d\varphi \quad \text{Éq. 22}$$

Où m_{up} est la masse de carburant n'est pas encore préparé, définie par :

$$m_{up} = m_{f.inj} - \int_0^\varphi P d\varphi \quad \text{Éq. 23}$$

Et N' représente le régime du moteur, p_{O_2} est la pression partielle de l'oxygène, K, x, E_{red} sont les constantes dans les équations demi-empiriques.

Ericson et al. [94] utilisent un découpage en zones similaire, mais ils améliorent le calcul de température de la zone de gaz brûlés. Pour ce faire ils utilisent une table qui décrit la variation de la température en fonction de la pression, de la température et de la richesse locale quand les produits de combustion complète se dissocient pour former les espèces CO, H, OH, NO, etc .

$$\Delta T = f_{eq}(p, T, \lambda_{local}) \quad \text{Éq. 24}$$

En conséquence, la température de gaz brûlé est donnée par :

$$T_{burn} = T_{burn,perf} - f_{eq}(p, T_{burn,perf}, \lambda_{local}) \quad \text{Éq. 25}$$

Avec la température avant la dissociation :

$$T_{burn,perf}(\theta) = \frac{T_{burn,perf}(\theta-1) \left(\frac{P(\theta)}{P(\theta-1)} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} m_{burn}(\theta-1) + T_{flame,ht} (m_{burn}(\theta) - m_{burn}(\theta-1))}{m_{burn}(\theta)} \quad \text{Éq. 26}$$

De manière comparable, Kamimoto et al. [95] développent un modèle 3-zones qui consiste en une zone de gaz ambiant à la température T_a , une zone du mélange air-carburant non brûlé à la température T_u , et une zone de gaz brûlés à la température T_b . Ce modèle calcule les températures dans les zones avec la même méthode que le modèle d'Ishida et al. [92]. Toutefois, l'équation d'état du gaz parfait est modifiée dans les conditions de hautes densités par une expression fonction de la pression :

$$v = \frac{RT}{P} + 1.09059 \times 10^{-3} - \frac{8.50053 \times 10^{-3}}{(T/100)^{1.64}} + \frac{4.34248 \times 10^{-10}}{(T/100)^{2.49}} P - \frac{6.52579 \times 10^{18}}{(T/100)^{2.92}} P^2 + \frac{2.95689 \times 10^{-26}}{(T/100)^{3.17}} P^3 \quad \text{Éq. 27}$$

Où P (Pa), v (m³/kg), T (K) et $R=287.06$ J/(kgK)

Finesso et al. [96] divisent eux aussi la chambre de combustion en trois zones : une zone de carburant vapeur (f), une zone de gaz non brûlé (u), et une zone de gaz brûlé stœchiométrique (b). Les équations de conservation de masse et de température sont appliquées dans chaque zone. Par rapport au modèle 2 zones, ils distinguent une nouvelle zone de carburant vapeur. Par conséquent, l'écriture de la conservation de la masse est modifiée comme suit :

$$\begin{cases} dm_f = dm_{f,inj} - dm_{f \rightarrow b} \\ dm_u = -dm_{u \rightarrow b} \\ dm_b = dm_{u \rightarrow b} + dm_{f \rightarrow b} \end{cases} \quad \text{Éq. 28}$$

Le sous-modèle de combustion est réalisé par la conservation d'énergie. Pour chaque zone, la conservation s'écrit :

$$\begin{cases} \delta Q_f + V_f dp = d(m_f i_f) - dm_{f,inj} i_{f,inj} + dm_{f \rightarrow b} i_f \\ \delta Q_u + V_u dp = d(m_u i_u) + dm_{u \rightarrow b} i_u \\ \delta Q_b + V_b dp = d(m_u i_u) - dm_{u \rightarrow b} i_u - dm_{f \rightarrow b} i_f \end{cases} \quad \text{Éq. 29}$$

Avec

$$dm_{f \rightarrow b} = dx_{b,f} m_{f,inj} \quad \text{Éq. 30}$$

$$dm_{u \rightarrow b} = dx_{b,f} m_{f,inj} \alpha_{st}'' \quad \text{Éq. 31}$$

L'enthalpie de chaque zone est calculée par une interpolation polynomiale de la température et différents coefficients a_j , b_j , c_j :

$$i_j = a_j T_j^2 + b_j T_j + c_j \quad (j = f, u, b) \quad \text{Éq. 32}$$

De même, la température de chaque zone est calculée aussi par l'interpolation :

$$a_j'' T_j^2 + b_j'' T_j + c_j'' = 0 \quad (j = f, u, b) \quad \text{Éq. 33}$$

Tous les coefficients pour l'évaluation de température et de l'enthalpie sont accessibles dans [96].

Contrairement à Kamimoto et al., sur base du modèle 2-zones avec une zone non brûlée et une zone brûlée, Chen et al. [97] distinguent dans la zone non brûlée deux sous régions : la région ségrégative et la région bien mélangée. Le

processus de la combustion est donc divisé en deux évènements séquentiels : mélanger et brûler. Ils effectuent des bilans complets de masse, d'énergie et d'espèces sur les zones, sur base de tables JANAF, qui permettent de calculer les propriétés thermodynamiques (c_p , c_v , h ...). Les vitesses de formation des espèces sont obtenues avec une modélisation basique de flamme turbulente.

Wallace et al. [98] développent un modèle 4-zones permettant de modéliser la formation et l'oxydation des particules. Les zones sont caractérisées au cours de chaque phase de la combustion en se donnant une loi de distribution du carburant :

- Au moment de délai d'inflammation (Figure 24) : une zone trop riche pour brûler (limite supérieure d'inflammabilité), une zone de richesse intermédiaire, une zone trop pauvre pour brûler (limite inférieure d'inflammabilité), et une zone d'air pur.
- Au cours de la combustion de diffusion (Figure 25) : une zone composée d'air frais, une zone de gaz brûlés issus de la combustion de pré mélange (zone de formation des particules), une zone de combustion de diffusion (zone d'oxydation des particules), et une zone riche de carburant.

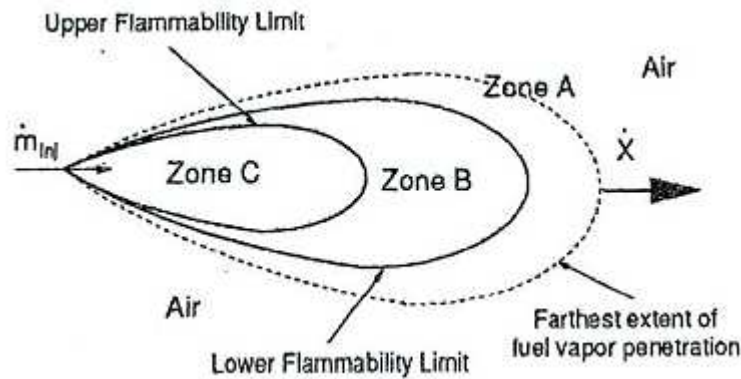


Figure 24 : Schéma de la division en zones à la fin du délai d'inflammation [98]

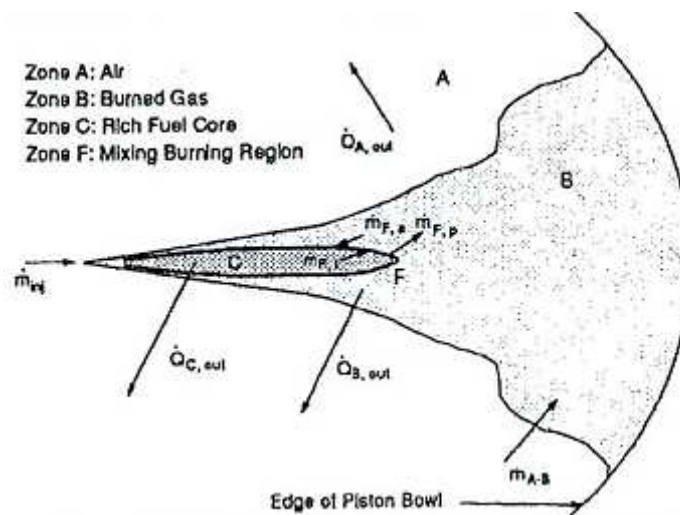


Figure 25 : Schéma de la division en zones au cours de la combustion de diffusion [98]

Le modèle de combustion distingue deux phases différentes. La combustion de prémélange après le délai d'inflammation se passe dans la zone B sur la Figure 24, contrôlée par une réaction globale qui forme le CO. Ensuite, la combustion diffusive, qui est contrôlée par le processus de mélange, est calculée avec les équations de

conservations de masse et d'énergie. Par ailleurs, des modèles semi-empiriques sont utilisés pour les calculs de suie et l'entraînement d'air.

Enfin, en améliorant le modèle original de Finesso [96], Baratta et al. [99] développent un modèle complexe et sans calcul de spray, avec un découpage des zones qui dépend de la phase de combustion. Par rapport au modèle de Finesso, le modèle de Baratta utilise la même façon d'écriture des équations de conservation de masse et d'énergie, en modifiant les deux points suivants :

- Rajout d'une zone de carburant liquide (f,l) qui contient le carburant injecté, qui permet de considérer l'évaporation de carburant.
- Remplacement de la zone de carburant vapeur par une zone de mélange (m) qui est un mélange de gaz non-brûlé et de carburant vapeur.

Pendant le délai d'inflammation (entre le début de l'injection et le début de la combustion), la chambre est divisée en trois zones : une zone de carburant liquide, une zone de gaz non brûlés (u) qui contient un mélange composé de l'air frais, de l'EGR, et des gaz résiduels, et une dernière zone de mélange. Le processus d'évaporation ainsi que le transfert de masse entre la zone de carburant liquide et la zone de mélange sont décrits. Après le début de la combustion, une nouvelle zone de gaz brûlés par la combustion de pré mélange (bp) est créée dans la zone de mélange. Dans la phase de combustion diffusive, le dégagement de chaleur provient de deux modes de combustion : pré mélange et diffusif. Afin d'avoir un gradient de température pour améliorer la précision de calcul des émissions, la zone de gaz brûlés issus de la combustion diffusive (bd) est divisée en plusieurs sous-zones ; la dernière zone (bd,n) est remplie par les gaz brûlés issus de la combustion de pré mélange (bp), et par des gaz en provenance de la zone de gaz non brûlés (u). Les masses des autres zones de gaz brûlés par la combustion diffusive (bd,i, i=1,..., n-1) restent constantes. La conservation de masse est écrite comme ci-dessous :

$$\left\{ \begin{array}{l} dm_{f,l} = dm_{f,inj} - dm_{f,l \rightarrow m} \\ dm_u = -dm_{u \rightarrow m} - dm_{u \rightarrow bd,n} \\ dm_m = dm_{f,l \rightarrow m} + dm_{u \rightarrow m} - dm_{m \rightarrow bp} \\ dm_{bp} = dm_{m \rightarrow bp} - dm_{bp \rightarrow bd,n} \\ dm_{bd,n} = dm_{bp \rightarrow bd,n} + dm_{u \rightarrow bd,n} \\ dm_{bd,i} = 0 \quad (i = 1, \dots, n-1) \end{array} \right. \quad \text{Éq. 34}$$

Pendant la simulation, toutes les zones gazeuses suivent la loi des gaz parfaits, la zone de carburant liquide est calculée par un sous-modèle phénoménologique d'évaporation [1], considérant l'équilibre thermodynamique à la température d'évaporation.

$$(i_{f,v} - i_{f,l}) dm_{f,l \rightarrow m} = \dot{Q}_{evap} \quad \text{Éq. 35}$$

Où \dot{Q}_{evap} est la chaleur latente d'évaporation.

Les équations de conservation de l'énergie sont appliquées dans toutes les zones, d'une façon similaire à celle employée dans le modèle de Finesso [96]. Les propriétés thermodynamiques sont déterminées par les tables JANAF. Dronniou [36] et ses co-auteurs ont développé deux modèles de combustion multizones avec des calculs de cinétique chimique détaillée à partir de la librairie CHEMKIN II et le programme SENKIN initialement développés par le laboratoire Sandia [100]. La première version SENKIN-MV est développée pour des applications de type HCCI. La chambre de combustion est divisée en plusieurs zones, pour représenter une éventuelle stratification en température ou richesse préalable à la combustion. A chaque pas de temps, quatre équations de conservation (masse, volume, fraction massique et énergie) sont calculées dans chaque zone. Mais il n'y a pas d'échange de masse ni

d'énergie entre les zones, il n'est donc pas envisageable d'appliquer le modèle en l'état à de la combustion Diesel, son application est limitée à la combustion HCCI.

1.4.2.2 Modèles avec découpage qualitatif et calcul de spray

Comme les modèles multizones dépourvus de calcul de spray, les modèles incluant un calcul de spray comportent au moins 2 zones : une zone de spray et une zone ambiante. L'évolution du spray de carburant est décrite pendant toute la durée de la combustion.

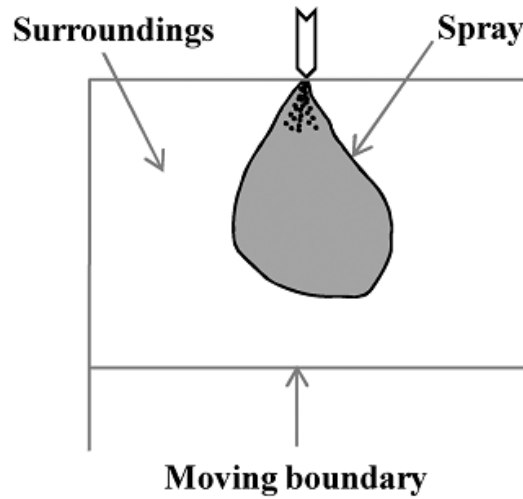


Figure 26 : Schéma de modèle 2 zones « avec le calcul du spray » [101]

La Figure 26 montre le schéma d'un modèle 2 zones qui est développé par Rajkumar et al. [101]. Dans son modèle, le spray est constitué de plusieurs « paquets » de gouttes. Un « paquet » est un ensemble des gouttes qui ont le même diamètre moyenne de Sauter. Le sous-modèle du spray décrit l'évaporation du carburant liquide, et l'entraînement de l'air, calculé à partir des plusieurs modèles empiriques. Après le délai d'inflammation, le modèle traite séparément les deux modes de combustion. Pour la combustion de pré mélange, le taux de combustion est contrôlé par la cinétique chimique :

$$\left[\frac{dm_{f,b}}{dt} \right]_{pre} = A_{pre} \rho_{mix}^2 X_{f,v} X_{O_2}^5 \exp \left[\frac{-12000}{T_{sp}} \right] V_{sp} \quad \text{Éq. 36}$$

Où A est une constante du modèle, ρ_{mix} est la densité du mélange, $X_{f,v}$ et X_{O_2} sont respectivement les fractions molaires de carburant vapeur et de oxygène, T et V sont respectivement la température et le volume instantanés du spray.

En revanche, dans la phase de combustion diffusive, en raison des réactions chimiques très rapides, on peut supposer que le taux de combustion est contrôlé par le taux de mélange de carburant et d'oxygène. Cette phase de combustion est modélisée sur la base du concept de dissipation de la turbulence.

$$\left[\frac{dm_{f,b}}{dt} \right]_{diff} = \frac{A_{diff}}{\tau_{mix}} \min \left[m_{fv}, \frac{m_{O_2}}{(A/F)_{st}} \right] \quad \text{Éq. 37}$$

Où A est une constante du modèle, et m_{O_2} est la masse de oxygène. τ_{mix} est le temps de mélange qui est calculé par le sous-modèle de mélange à partir de modèle de Magnussen [102].

Par ailleurs, une équation empirique est utilisée pour déterminer le délai d'inflammation en °V :

$$\tau_{ID} = (0.36 + 0.22U_p) \exp \left[E_A \left(\frac{1}{RT_m R_c^{n-1}} - \frac{1}{17190} \right) + \left(\frac{21.2}{p_m R_c^n - 12.4} \right) \right] \quad \text{Éq. 38}$$

Où U_p est la vitesse de piston, R est la constante de gaz, T_m la température de l'air d'admission, R_c le taux de compression, n un coefficient, p_m la pression d'admission, et E_A l'énergie d'activation.

Enfin, les émissions de NOx sont modélisées par le mécanisme Zeldovich [1].

Arsie et al. [103] divisent la chambre de combustion en 3 zones, en différenciant le carburant liquide de la zone de spray. Contrairement au modèle précédent, il ne suit pas les paquets de gouttes dans la zone de spray, et considère que les trois zones (zone d'air, zone de carburant liquide et zone de mélange) sont homogènes. La Figure 27 illustre le schéma de ce modèle.

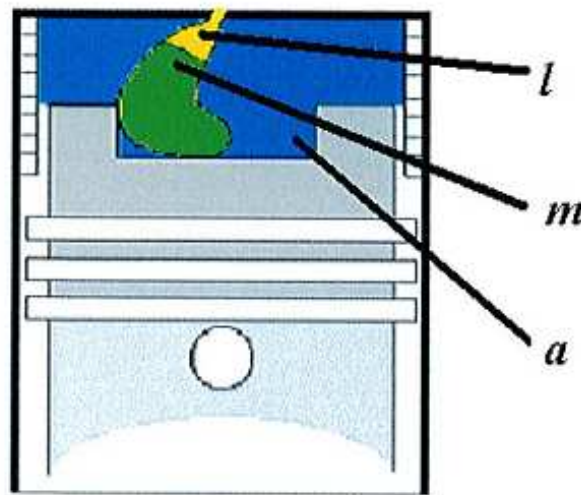


Figure 27 : Schéma de zone d'air (a), zone de carburant liquide (l) et zone de mélange (m) [103]

L'entraînement de l'air est modélisé par des équations empiriques et le sous-modèle de combustion est basé sur le modèle semi-empirique proposé par Whitehouse et Way [82] présenté plus haut.

D'une façon similaire, d'autres auteurs rajoutent une zone de combustion (flamme) dans la zone de gaz brûlés [104][105] ou une zone de carburant pilote [106], et intègrent des sous modèles pour évaluer la pénétration du jet [104], l'entraînement de l'air par le jet de carburant [105], ou encore les émissions polluantes [105][106].

Plus récemment, Maiboom et al. [89][107][108] développent un modèle phénoménologique 6 zones de combustion Diesel. Ce modèle le développement du spray et de la combustion en s'inspirant directement du modèle conceptuel de Dec [39]. La pénétration du jet, la longueur de jet liquide, etc. sont calculées grâce à des sous-modèles qui sont inspirés des travaux du SANDIA (Siebers et al. [109]). Le spray Diesel est divisé en 6 zones caractéristiques qui sont présentées sur la Figure 28.

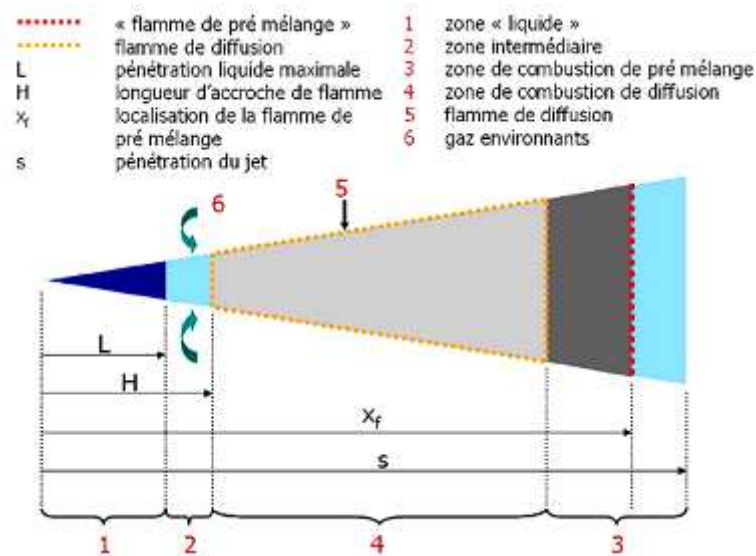


Figure 28 : Description des différentes zones utilisées dans le modèle de Maiboom et al. [107]

- Zone 1: zone « liquide », du nez de l'injecteur jusqu'à la pénétration liquide maximale.
- Zone 2: zone de carburant entre la pénétration liquide maximale L et la longueur d'accroche de flamme de diffusion H. Si $H > L$, la zone 2 contient le carburant complètement vaporisé situé en amont de la longueur d'accroche de flamme. Si $H < L$, la zone 2 contient le carburant liquide situé en aval de la longueur d'accroche de flamme.
- Zone 3: zone de combustion de pré-mélange, qui consiste en la combustion de la phase vapeur mélangée à l'air pendant le délai d'inflammation.
- Zone 4: zone de combustion de diffusion, de la longueur d'accroche de flamme jusqu'au bout de jet.
- Zone 5: zone de flamme de diffusion qui entoure les zones 3 et 4.
- Zone 6: gaz environnants (air + gaz recirculés éventuels).

De plus, ce modèle inclut des adaptations de plusieurs sous-modèles, par exemple, le modèle de Siebers pour le jet [13], le modèle de pénétration liquide [109], le modèle d'introduction et le modèle d'entraînement de l'air. La Figure 29 illustre les différents transferts de masse entre les zones.

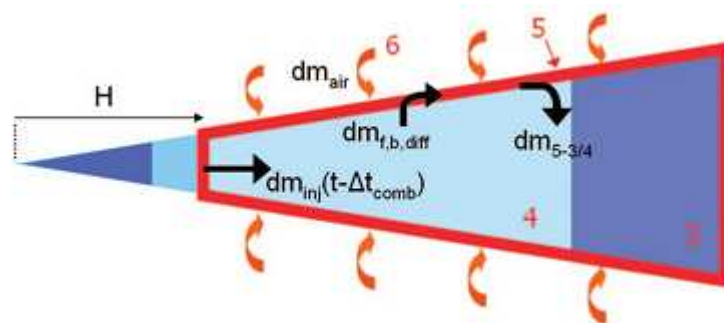


Figure 29: Transfert de masse entre les différentes zones [107]

Les équations correspondantes sont les suivantes :

$$\frac{dm_{3/4}}{dt} = \frac{dm_{inj}(t - \Delta t_{comb})}{dt} - \frac{dm_{f,b,diff}}{dt} + \frac{dm_{5-3/4}}{dt} \quad \text{Éq. 39}$$

$$\frac{dm_5}{dt} = \frac{dm_{air}}{dt} + \frac{dm_{f,b,diff}}{dt} - \frac{dm_{5-3/4}}{dt} \quad \text{Éq. 40}$$

$$\frac{dm_a}{dt} = -\frac{dm_{air}}{dt} \quad \text{Éq. 41}$$

On suppose que l'excès d'air de la flamme est constant, égal à λ_5 . x_5 est un coefficient empirique du modèle ; il représente la part de gaz brûlés qui est contenue dans la flamme. Aussi, le débit $dm_{5-3/4}$ s'écrit :

$$\frac{dm_{5-3/4}}{dt} = \frac{dm_{air}}{dt} - (1 - x_5) \cdot \lambda_5 \cdot f_s \cdot \frac{dm_{f,b,diff}}{dt} + x_5 \cdot \frac{dm_{f,b,diff}}{dt} \quad \text{Éq. 42}$$

Les températures moyennes dans les différentes zones (la température T_a de gaz ambiants, la température de flamme T_5 , ainsi que la température moyenne $T_{3/4}$ des zones 3 et 4) sont obtenues avec un bilan énergétique (premier principe de la thermodynamique en système ouvert):

$$\begin{aligned} \frac{dT_{3/4}}{dt} = \frac{\gamma_{3/4} - 1}{r \cdot m_{3/4}} \cdot \left(\frac{dm_{inj}(t - \Delta t_{comb})}{dt} \cdot h_f(H) + \frac{dm_{5-3/4}}{dt} \cdot h_5 - \frac{dm_{f,b,diff}}{dt} \cdot h_3 \right) \\ - (\gamma_{3/4} - 1) \cdot \frac{T_{3/4}}{V_{3/4}} \cdot \frac{dV_{3/4}}{dt} - \frac{T_{3/4}}{m_{3/4}} \cdot \frac{dm_{3/4}}{dt} \end{aligned} \quad \text{Éq. 43}$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_5}{dt} = \frac{\gamma_5 - 1}{r \cdot m_5} \cdot \left(\frac{dQc}{dt} + \frac{dm_{air}}{dt} \cdot h_a + \frac{dm_{f,b,diff}}{dt} \cdot h_3 - \frac{dm_{5-3/4}}{dt} \cdot h_5 \right) \\ - (\gamma_5 - 1) \cdot \frac{T_5}{V_5} \cdot \frac{dV_5}{dt} - \frac{T_5}{m_5} \cdot \frac{dm_5}{dt} \end{aligned} \quad \text{Éq. 44}$$

$$\frac{dT_a}{dt} = -\frac{\gamma_a - 1}{r \cdot m_a} \cdot \frac{dm_{air}}{dt} \cdot h_a - (\gamma_a - 1) \cdot \frac{T_a}{V_a} \cdot \frac{dV_a}{dt} - \frac{T_a}{m_a} \cdot \frac{dm_a}{dt} \quad \text{Éq. 45}$$

Enfin, pour le calcul du taux de combustion de pré-mélange et de diffusion, ce modèle est adapté de ceux proposés par Chmela [85][86][87] et Barba[88]. Ce modèle permet de calculer de manière convenable les dégagements de chaleur, que ce soit aux charges intermédiaires ou sur des points très peu chargés et dilués (EGR) avec des tendances d'évolution réalistes.

Avec une approche assez similaire, Xue et al. [110] développent un modèle avec le même nombre de zones. La Figure 30 et la Figure 31 montrent respectivement la description des zones et l'évolution du spray.

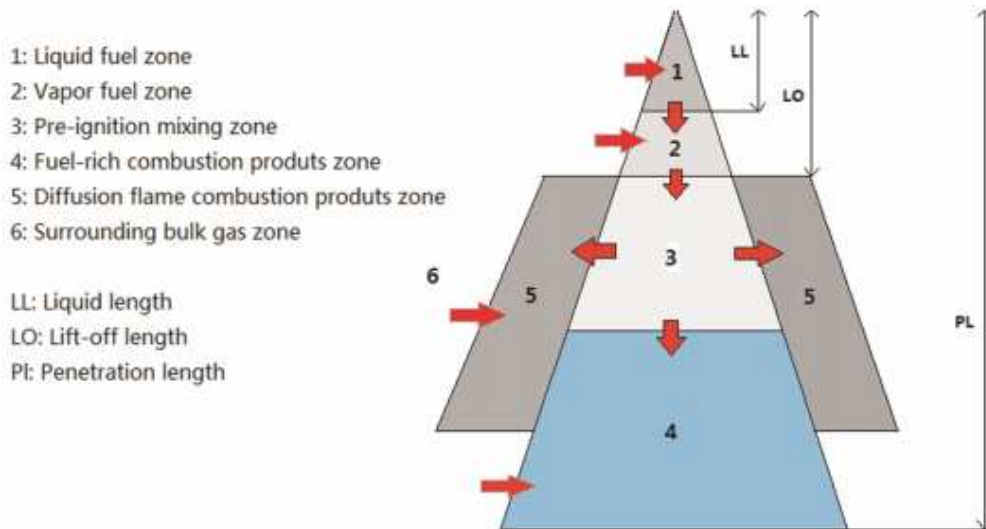


Figure 30 : Schéma de la description des zones [110]

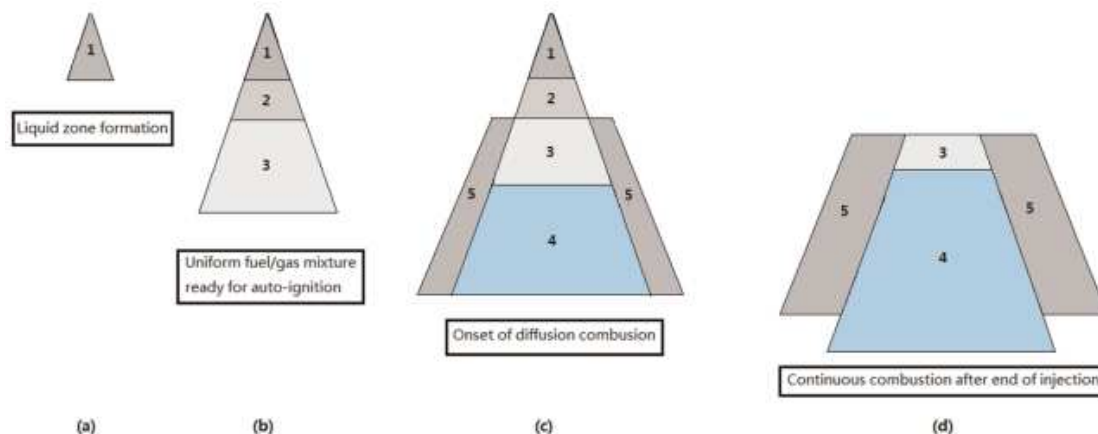


Figure 31 : Evolution des différents zones [110]

Par rapport au modèle de Maiboom et al. décrit ci-dessus, les définitions des Zones 3 et 4 sont différentes. La Zone 3 contient le mélange de carburant vapeur non consommé, et la Zone 4 est composée par les produits des réactions en mode riche du carburant. La modélisation de la combustion de pré-mélange est également différente ; elle repose sur le modèle de Watson. En dehors de ces deux points, les modèles développés par Maiboom et Xue sont assez proches. Kuleshov [111][112] développe un modèle multizone de la combustion Diesel nommé modèle RK. Avec des descriptions détaillées du spray, ce modèle prend en compte non seulement l'évolution transitoire du spray, mais aussi l'effet de l'impact aux parois et du swirl. Un soin particulier est apporté à la prise en compte des interactions spray/paroi et inter-spray. La Figure 32 montre le découpage en zones du modèle RK, chaque spray étant divisé en 7 zones caractéristiques.

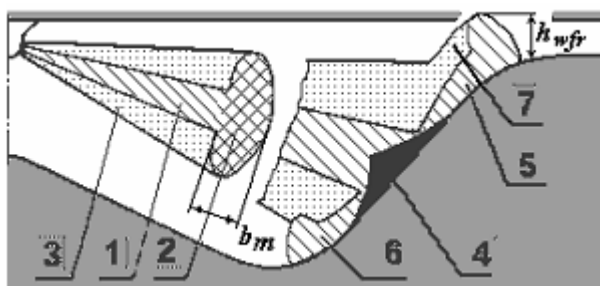


Figure 32 : Schéma des différentes zones dans le modèle RK[111]

Chaque zone est homogène, possède ses propres conditions d'évaporation et de combustion. Quand le spray est libre (avant l'impact des parois), il y a seulement 3 zones caractéristiques: Zone 1 - la zone de spray qui reste à l'angle du spray de carburant injecté. Zone 2 - la zone de tête de spray qui est dans des conditions transitoires. Zone 3 - la zone ambiante de spray. Après l'impact des parois, plusieurs nouvelles zones sont prises en compte pour le flux sur la surface de paroi (WSF – Wall Surface Flow) : Zone 4 - le cœur conique axial du WSF, Zone 5 - la zone du WSF qui respecte l'angle original après l'impact, Zone 6 - la zone de tête de WSF, et finalement la zone 7 la zone ambiante pour le WSF. La part correspondant à la zone de tête des deux flux (spray et WSF) et la richesse (fraction de carburant) sont calculées par des équations empiriques proposées par Razleytev [111]. De plus, pour chaque phase de combustion (délai d'inflammation, combustion de pré mélange, combustion diffusive, fin de combustion après la fin de l'injection), des modélisations développées par Razleytev sont utilisées pour calculer le taux de dégagement de chaleur [112].

Afin d'étendre une modélisation initialement développée pour la combustion HCCI, déjà mentionnée plus haut, Dronniou [36] a développé une deuxième version du modèle, destinée à la combustion Diesel et nommée CKRD (Chemical Kinetics with Representative Droplets). Ce modèle distingue le spray et les gaz environnants. Comme Rajkumar [101], l'approche repose sur un suivi de « paquets » de carburant. Comme illustré sur la Figure 33, le cylindre est découpé en zones le long de l'axe du jet, chacun des zones contenant du carburant sous forme liquide ou vapeur, ainsi qu'une masse de gaz entraînés. Le modèle prend en compte les effets d'un mélange turbulent tout en gardant la possibilité d'effectuer des calculs de cinétique chimique détaillée dans chacune des zones.

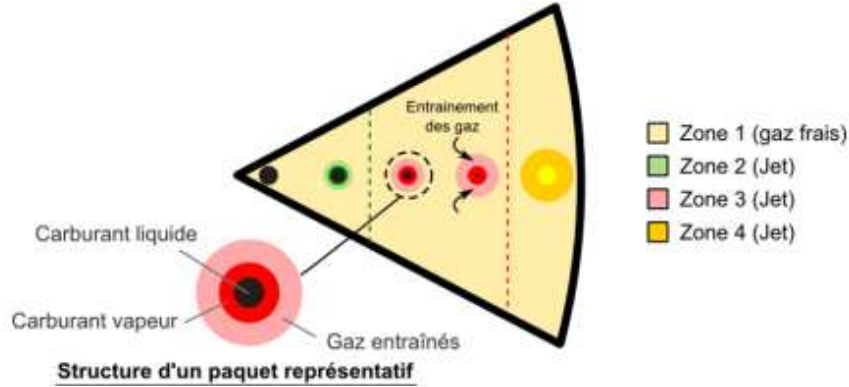


Figure 33 : Illustration de l'approche CKRD (Chemical Kinetics with Representative Droplets) [36]

La formulation de Naber et Siebers [13] est utilisée pour la pénétration de spray S. La vitesse de pénétration u et l'accélération γ sont ensuite calculées par :

$$u = \frac{dS}{dt}, \quad \gamma = \frac{du}{dt} \quad \text{Éq. 46}$$

Pour calculer l'entraînement d'air, la conservation de masse dans le paquet est écrite comme ci-dessous :

$$m_{RD} = m_{fRD} + m_{gRD} \quad \text{Éq. 47}$$

Avec :

- m_{RD} : la masse totale du paquet représentatif.
- m_{fRD} : la masse de carburant présent dans le paquet.
- m_{gRD} : la masse de gaz entraîné dans le paquet

La conservation de la quantité de mouvement est aussi considérée en termes dérivés :

$$dm_{RD} \cdot u = -\gamma \cdot m_{RD} \quad \text{Éq. 48}$$

Comme la masse de carburant présente dans le paquet est fixée par le taux d'introduction, la variation de masse totale du paquet est liée seulement à la dérivée de masse entraînée provenant de la zone ambiante.

$$dm_{RD} = dm_{gRD} = -\frac{\gamma}{u} m_{RD} \quad \text{Éq. 49}$$

La conservation de quantité de mouvement à la sortie de l'injecteur est écrite comme :

$$m_{RD} \cdot u = m_{fRD} \cdot U_f = cste \quad \text{Éq. 50}$$

Finalement :

$$dm_{gRD} = -\frac{\gamma}{u} m_{RD} = -\frac{\gamma}{u^2} U_f m_{fRD} \quad \text{Éq. 51}$$

Où m_{fRD} est fixé par le taux d'introduction et U_f représente la vitesse du carburant à la sortie de l'injecteur.

1.4.2.3 Modèles avec un découpage systématique Lagrangien

Le modèle le plus connu de cette famille est certainement celui proposé par Hiroyasu et al., qui a inspiré de nombreux autres modèles plus récents.

Dans les années 1980, il existait déjà des modélisations de la combustion, certaines multizones, basées sur un modèle mathématique de l'évaporation des gouttelettes, mais qui ne considéraient pas les effets de la turbulence et la dynamique du spray. Hiroyasu et al.[113] ont amélioré le modèle en considérant la dynamique du spray. Le jet de carburant injecté est divisé en plusieurs petits « paquets », comme illustré sur la Figure 34. Les paramètres thermodynamiques (la distribution de carburant, la concentration en oxygène, l'évaporation, le délai d'inflammation, la température de la flamme, etc) sont propres à chaque paquet. Par rapport aux modèles précédents, le taux de dégagement de chaleur n'est alors plus déterminé de manière macroscopique mais en additionnant les libérations d'énergie de chaque paquet. Ce modèle est capable de prédire les performances du moteur, son rendement et, dans une certaine mesure, les émissions polluantes.

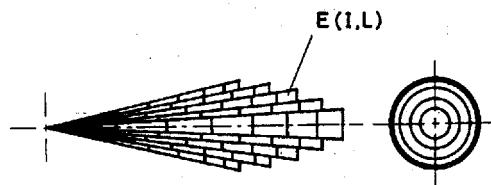


Figure 34 : Schéma de la division du spray en paquets [113]

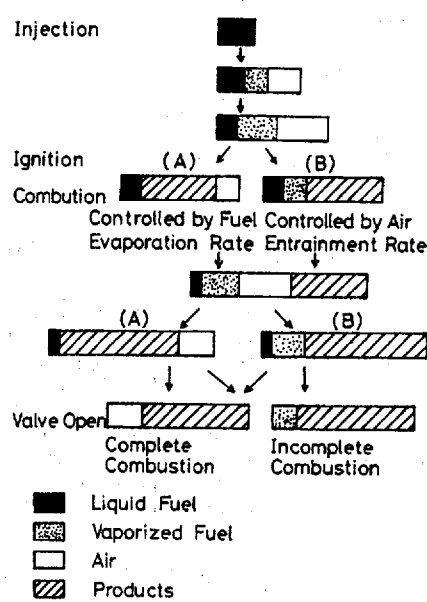


Figure 35 : Evolution de la composition dans un paquet [113]

Les processus qui se produisent dans un paquet sont illustrés sur la Figure 35. Immédiatement après l'injection de carburant, le paquet se compose de gouttes de carburant liquide et d'un petit volume d'air. Puis, en s'éloignant de l'injecteur le paquet entraîne de l'air, qui va alors permettre de vaporiser le carburant liquide existant dans le paquet. Après un certain temps, l'inflammation se produit dans le mélange gazeux résultant de l'expansion du paquet. Hiroyasu modélise le délai d'inflammation avec une loi d'Arrhenius qui dépend de la pression, de la température et

de la richesse existant dans le paquet. Ensuite, la combustion se poursuit au fur et à mesure du mélange entre le carburant vapeur et l'air frais.

Reprenant les données expérimentales de Dan [114], Assanis et al. [115] comparent la pénétration du spray calculé par le modèle d'Hiroyasu pour une gamme de pressions d'injection de 550 bar à 1200 bar. Les résultats montrent que le modèle a une bonne corrélation avec l'expérience à basse pression d'injection comme à haute pression. Les modèles d'Hiroyasu et de Reitz et Bracco [116] sont également confrontés avec les mesures expérimentales de Dan en termes d'angle du spray.

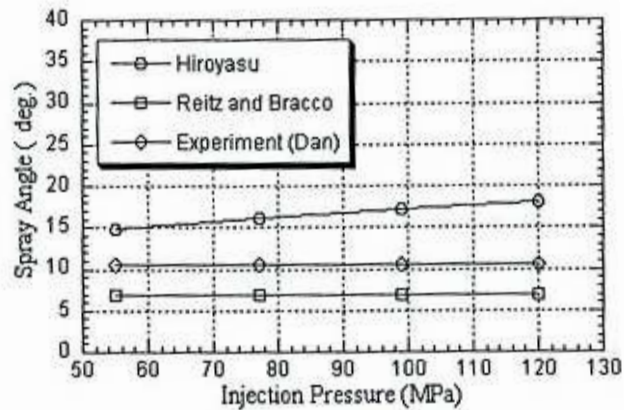


Figure 36 : Comparaison de l'angle de spray simulé et expérimental [115]

La Figure 36 montre que le modèle d'Hiroyasu surestime l'angle du spray, d'autant plus que la pression d'injection augmente. Par contre, pour le modèle de Reitz et Bracco, l'angle calculé est plus petit que pour l'expérience, mais les valeurs simulées ne varient pas en fonction de la pression d'injection.

Sur base du modèle d'Hiroyasu, Sayem et al. [117] développent un modèle phénoménologique en incluant le modèle de réaction de Tsurushima [118], qui se compose de neuf étapes de réaction incluant plusieurs espèces intermédiaires, pour simuler l'éthylène et le CO dans l'échappement, ce qui peut être important pour la simulation du post-traitement. Une amélioration des résultats est constatée grâce à l'introduction d'un temps caractéristique de mélange τ_{mix} [119] qui prend en compte l'hétérogénéité du mélange de carburant.

$$R_{mix} = \frac{dt}{dt + \tau_{mix}} R_{chem} \quad \text{Éq. 52}$$

Où dt est le pas de temps de calcul, R_{mix} et R_{chem} sont les vitesses liées respectivement au mélange et à la chimie. Assanis et al. [115][120] ont également développé un modèle quasi-dimensionnel multizones inspiré par les travaux de Hiroyasu pour simuler la combustion Diesel et les émissions polluantes. La Figure 37 illustre l'évolution des parcelles de carburant et des zones dans ce modèle.

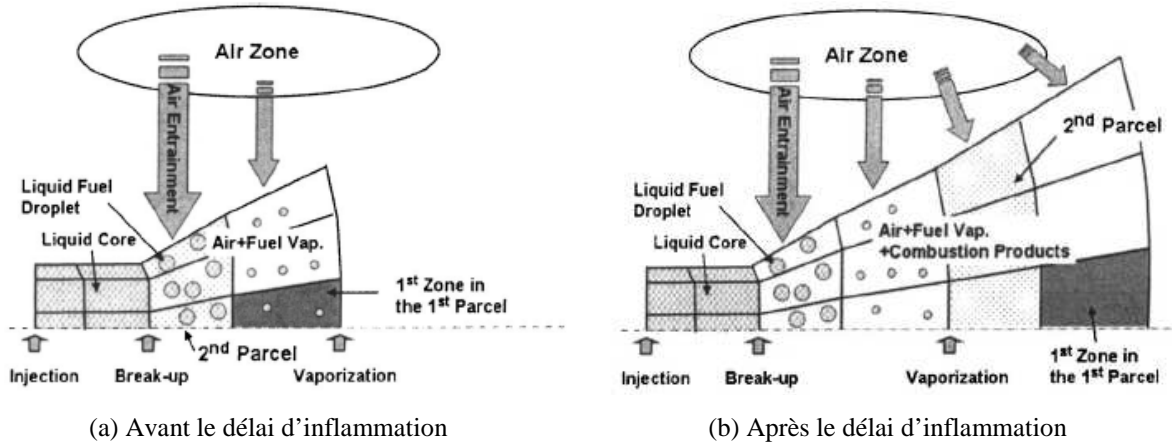


Figure 37 : évolution des zones du spray dans le modèle d'Assanis et al. [120]

Le carburant injecté dans la chambre est initialement supposé former un noyau liquide qui pénètre à la vitesse d'injection de carburant jusqu'à l'atomisation. Après cela, le carburant injecté est distribué avec un angle de spray qui est propre à chaque parcelle et varie suivant le pas de temps, en fonction des conditions. De plus, chaque parcelle est encore divisée en plusieurs zones dans la direction radiale. En conséquence, les angles des zones sont déterminés en divisant l'angle du spray par le nombre de zones radiales. Chaque zone peut être localisée par rapport au trou de l'injecteur en fonction de son angle et de la pénétration, calculée en utilisant le modèle d'Hiroyasu [113]. L'entraînement de l'air est calculé à partir de la conservation de la quantité de mouvement.

Cerri et al. [121] développent un code 1D pour simuler des moteurs. Un modèle simplifié de combustion qui suppose que le volume dans le cylindre est divisé en trois zones différentes [122] (vapeurs de carburant, zone de charge fraîche constituée d'air et de gaz résiduels, et zone des gaz brûlés) est tout d'abord utilisé pour calculer la pression d'admission et la température d'admission en plusieurs cycles, afin d'obtenir des valeurs convergentes. Le carburant injecté se vaporise instantanément et la réaction chimique du carburant avec l'air est stœchiométrique [123].

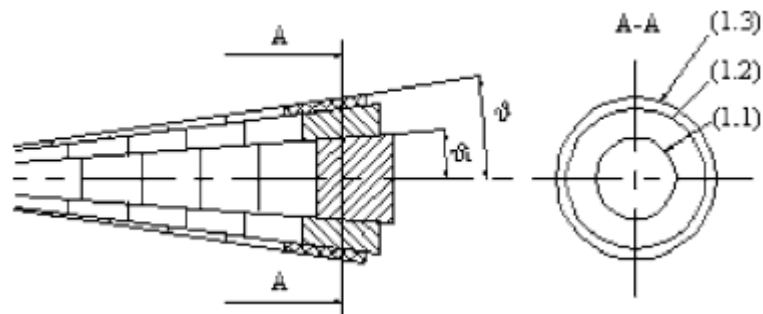


Figure 38 : Schéma de la structure du spray [121]

Un modèle multizone plus complexe est ensuite utilisé pour les calculs de pression, de température et d'émissions dans le cylindre. La décomposition du spray en zone est illustrée sur la Figure 38. Afin de simuler le fonctionnement d'un moteur Diesel moderne, le modèle prend en compte les injections multiples. Dans la direction axiale, chaque spray est divisé en N-zones, selon la quantité injectée instantanée et le pas de temps de calcul. Chaque zone est ensuite subdivisée en régions annulaires, sur le plan normal à l'axe de pénétration. Typiquement, le nombre total de zones dans la direction radiale est de trois. Il n'y a pas d'échange de masse entre les zones adjacentes, mais seulement entre le spray et le gaz environnant, selon le modèle d'entraînement de l'air, et la masse entraînée étant calculée par :

$$m_u = m_f \left(\frac{U_f}{v - v_s} - 1 \right) c_f \quad \text{Éq. 53}$$

Où m_u est la masse de gaz non-brûlé entraînée dans la zone de spray, m_f la masse de carburant dans la zone, c_f le coefficient, v la vitesse de pénétration de spray et v_s la vitesse de swirl.

Pour évaluer la composition des gaz brûlés et les réactions chimiques dans le cylindre, le code GASDYN [124] est utilisé. Il est basé sur l'évaluation à l'équilibre des concentrations des espèces majeures (H_2O , H , H_2 , CO , CO_2 , O , O_2 , OH , N_2 , NO). Les taux de réaction sont calculés par des équations du type Arrhenius. Un modèle « Zeldovich » à six réactions est appliqué pour simuler le processus de formation du NO [125], tandis que le modèle semi-empirique de Hiroyasu prédit la formation de la suie [126]. Le code est utilisé pour analyser le fonctionnement d'un petit moteur turbo Diesel HSDI. A pleine charge, les résultats numériques sont en très bon accord avec les expériences, tandis qu'une bonne correspondance qualitative est obtenue à charge partielle.

Perini et al. [127][128][129][130][131] ont également développé plusieurs modèles lagrangiens pour différents types de moteur, qui permettent d'avoir une prédiction détaillée des émissions polluantes : NO, HC, CO, et suie.

Toujours à partir du modèle d'Hiroyasu, Poetsch et al. [132] proposent une amélioration en modélisant le mélange des gaz ambiant et gaz brûlé, qui peuvent ainsi être ré-entraînés par le spray.

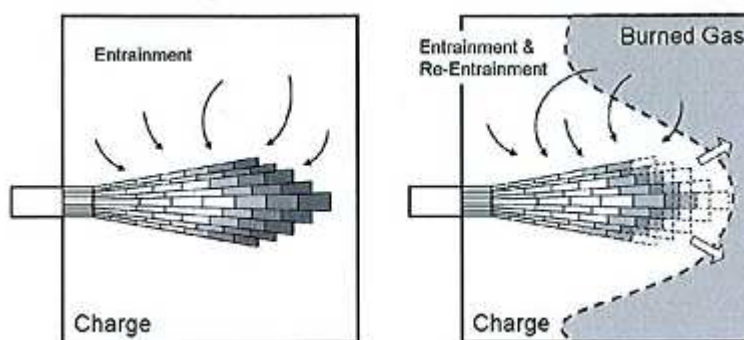


Figure 39 : Comparaison des modèles sans / avec le ré-entraînement des gaz brûlés [132]

Comme illustré sur la Figure 39, à chaque pas de temps les produits de la combustion complète sont extraits des zones du spray vers une zone de gaz brûlés, qui se mélange ensuite avec la zone ambiante, pour être ré-entraînée dans les zones de spray où il y a encore du carburant à brûler. Ce mécanisme de réentraînement est une extension importante par rapport au modèle original, parce qu'il permet d'appliquer ce modèle non seulement pour un jet libre, mais aussi pour des sprays dans une chambre de combustion (bombe et moteur), et prend en compte l'impact du spray sur les parois de la chambre.

1.4.2.4 Modèles avec un découpage systématique Eulérien

Dans ces modèles, la chambre de combustion est divisée en zones fixes dans lesquelles le spray va progressivement pénétrer.

Pour améliorer la prédiction des modèles 0D, N. Bordet [133] a développé une modélisation 1D ou quasi dimensionnelle, pour sa capacité à retranscrire les phénomènes transitoires très présents avec les stratégies d'injection multiples. La Figure 40 présente un schéma de principe du modèle. La chambre de combustion est divisée en $n+1$ zones. Seront donc considérées n zones de réaction (bleu) dont les dimensions seront données par le modèle de Spray et 1 zone de gaz ambiants (rose) qui comprend, en plus de l'air admis, l'EGR et l'IGR. Comme montré dans la Figure 40, les zones de réaction ont une géométrie fixée et ont comme propriété d'échanger de la

masse et de l'énergie entre elles, tandis que la zone de gaz ambiants va progressivement se vider avec l'entraînement des gaz dans les zones de réaction du spray.

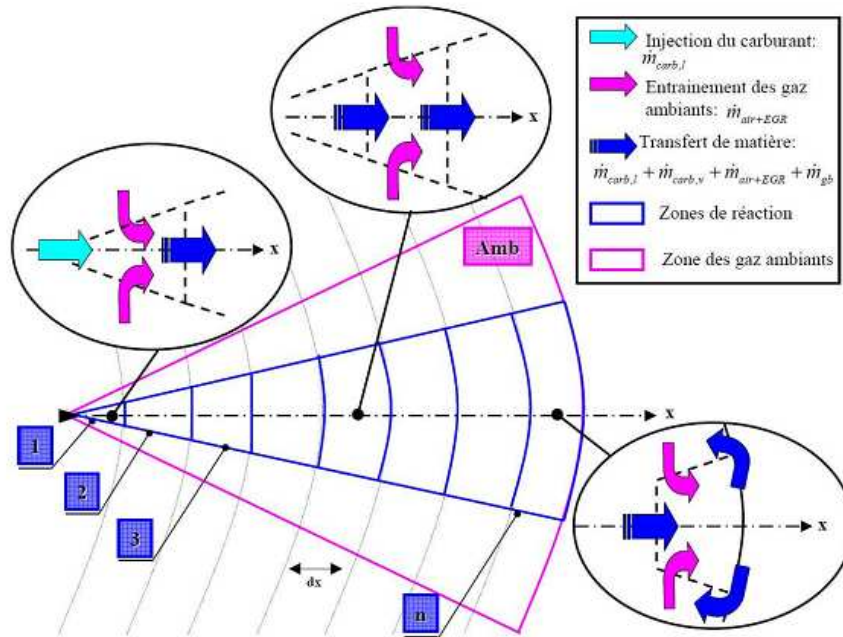


Figure 40 : Schéma de principe du modèle quasi dimensionnel [133]

Le découpage en volumes de contrôle est basé sur celui proposé initialement par Naber et Siebers [13], mais chaque zone est ensuite subdivisée en plusieurs volumes de contrôle dans la direction radiale à partir d'un profil radial auto-similaire défini pour chaque variable conservée. Ainsi, le rapport entre la variable conservée et sa valeur sur l'axe ne dépend pas de la coordonnée axiale. Le profil des variables conservées est présumé à l'aide de la distribution radiale décrite par Abramovich [134] (Figure 41). Celle-ci a été choisie plutôt qu'un profil Gaussien comme proposé dans le modèle de Musculus [22] et les modèles du CMT [23][135][136].

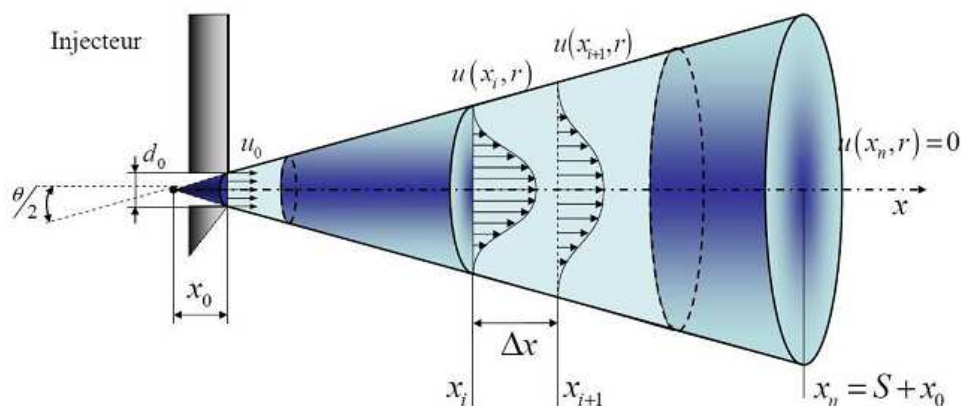


Figure 41 : Principe de base de l'approche mono dimensionnelle Eulérienne pour le spray Diesel [133]

Les équations monodimensionnelles de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie sont écrites dans une forme semblable à celle décrite dans les modèles de spray du CMT [23][135]. Le taux de réaction combine une composante liée à la chimie, évaluée par tabulation et une composante liée au micro mélange avec une approche basée sur le modèle Eddy Break-Up (EBU) [102]:

$$\dot{\omega}_c(x, r, t) = (1 - f(c)) \cdot \dot{\omega}_c(x, r, t)_{chim} + f(c) \cdot \dot{\omega}_c(x, r, t)_{mel} \quad \text{Éq. 54}$$

Où $f(c)$ est une fonction qui dans [137] peut avoir plusieurs formes.

Bordet propose également un sous modèle pour prendre en compte l'impact du spray sur les parois. Il distingue deux phénomènes : l'impact vapeur / parois et l'impact liquide / parois. Concernant le premier, à partir de travaux réalisés par Bruneaux [138], l'impact du flux de gaz sur la paroi se traduit uniquement par un débit de gaz sortant de la dernière zone de spray vers des zones virtuelles. Comme montré dans la Figure 42, à chaque pas de temps, un calcul pour le jet libre est tout-à-bord effectué afin d'évaluer le volume des zones « virtuelles ». Ensuite, en supposant que les volumes de jet libre ou ayant impacté une paroi sont sensiblement équivalents, la hauteur h_{paroi} est obtenue. Le nombre des zones impactées par l'effet de paroi peut se calculer avec la longueur des zones. Dans toutes ces zones impactées, la masse dans le volume équivalent est répartie équitablement. Par ailleurs, pour le second phénomène la réduction d'une approche utilisée en modélisation 3D est suggérée.

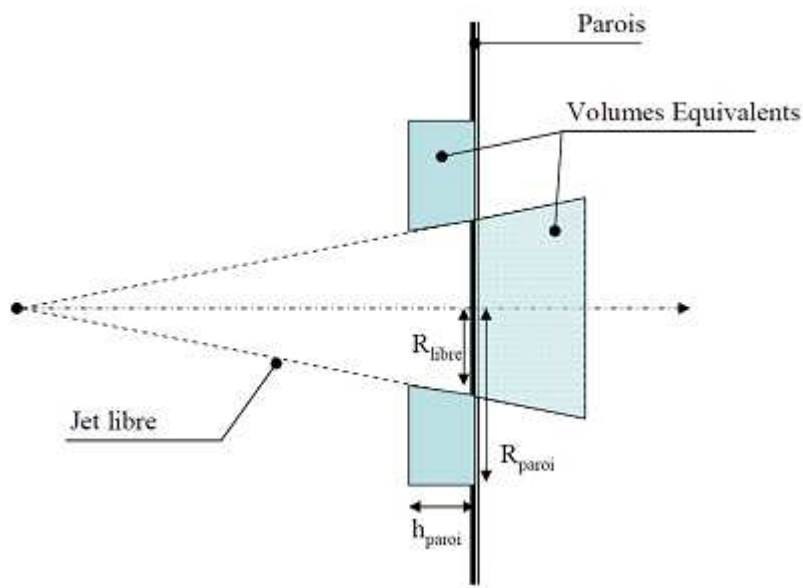
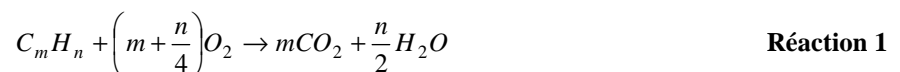


Figure 42 : Schéma de principe de la prise en compte de l'impact avec les parois sur la géométrie du spray [133]

A partir d'un modèle de spray Diesel initialement développé pour étudier les conditions inertes (et présenté en détail dans le chapitre suivant), les chercheurs du CMT ont proposé une extension aux conditions réactives [135] visant à comprendre la relation entre le mélange de l'air avec carburant, l'évolution dynamique, la pénétration et le dégagement de chaleur. Comme dans de spray inerte, l'équation de conservation de la quantité de mouvement est résolue, et les équations d'état sont appliquées à partir des équations de flux pour déterminer les propriétés thermodynamiques locales. Mais pour un spray réagissant, la fraction massique de carburant n'est plus conservative. Cependant, le problème peut encore être résolu avec la même approche que dans des conditions inertes si f , qui a été utilisé pour représenter la fraction massique de carburant dans le cas inerte, est considérée comme la fraction de mélange. Pour tout point dans le spray, cette variable peut être définie comme la proportion massique du mélange local venant de la sortie de la buse, qu'il ait ou non réagi. Du point de vue chimique, une réaction en une seule étape irréversible est utilisée :



La validation du modèle a été effectuée par comparaison avec des calculs CFD pour les jets gazeux et avec des relevés expérimentaux pour les sprays Diesel. Les prédictions du modèle semblent être adéquates dans les deux cas : une estimation raisonnable des propriétés de la flamme est obtenue avec ce modèle 1D par rapport aux résultats de CFD. Il apparaît que l'évolution transitoire de jet réactif est principalement régie par deux effets : la réduction de la densité locale et l'augmentation de la dimension radiale de la flamme. Ces deux effets se compensent, et conduisent à une augmentation de l'angle du spray quand le jet brûle, par rapport au jet inerte. La comparaison avec les expériences montre qu'une estimation raisonnable de la pénétration et du taux de combustion est obtenue avec le modèle. En revanche, ce modèle ne tient pas compte de l'interaction avec la paroi

1.4.2.5 Modèles mixtes

Certains chercheurs travaillent en mélangeant les deux types de modèles (découpage « qualitatif » et « systématique »). Li et al. [139] proposent un modèle avec un découpage « systématique » pour calculer l'entraînement de l'air dans le spray. En fait, ils utilisent des équations empiriques ou semi-empiriques pour une description détaillée de l'évolution du spray (l'entraînement et la pénétration). Ensuite, comme l'objectif de l'étude est d'évaluer les émissions, le processus de combustion et les émissions sont calculés en considérant une zone totale de spray et deux autres zones de carburant liquide et d'air, respectivement. La Figure 43 et la Figure 44 montrent le découpage des zones pour le spray et pour la combustion.

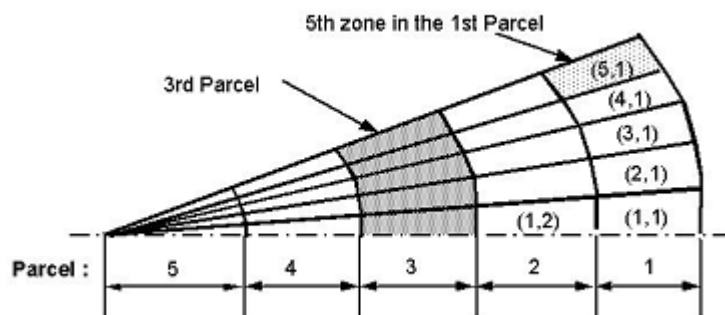


Figure 43 : Découpage des zones et des paquets pour le spray [139]

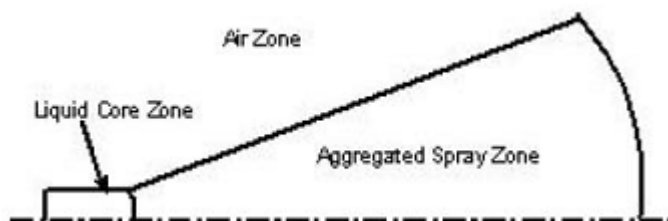


Figure 44 : Découpage des zones pour le calcul de combustion et des émissions [139]

Finesso et al. développent un modèle qui mélange les approches lagrangienne et eulérienne. Sur la base du couplage du modèle de spray 1D présenté par Musculus et Kattke [22] avec un modèle de diagnostic multizone thermodynamique spécifiquement développé par Finesso et al. [140], un modèle de combustion multizones quasi-dimensionnel est proposé et appliqué pour l'analyse de la combustion et de la formation des émissions dans un moteur Diesel. L'approche multizones a été développée à partir du schéma conceptuel de Dec, et est basée sur l'identification de plusieurs zones homogènes dans la chambre de combustion, à laquelle les lois de conservation de

la masse et de l'énergie sont appliquées. Pour éviter un temps de calcul excessif, ce modèle regroupe les volumes de contrôle du modèle original de Musculus en plusieurs zones en fonction de la richesse et du phasage de la combustion : il distingue les zones de mélange carburant - gaz non-brulés, les zones de combustion de pré-mélange et les zones de combustion diffusive. Suivant le niveau de richesse dans les zones de mélange, le schéma du modèle est divisé en trois cas, illustrés sur la Figure 45.

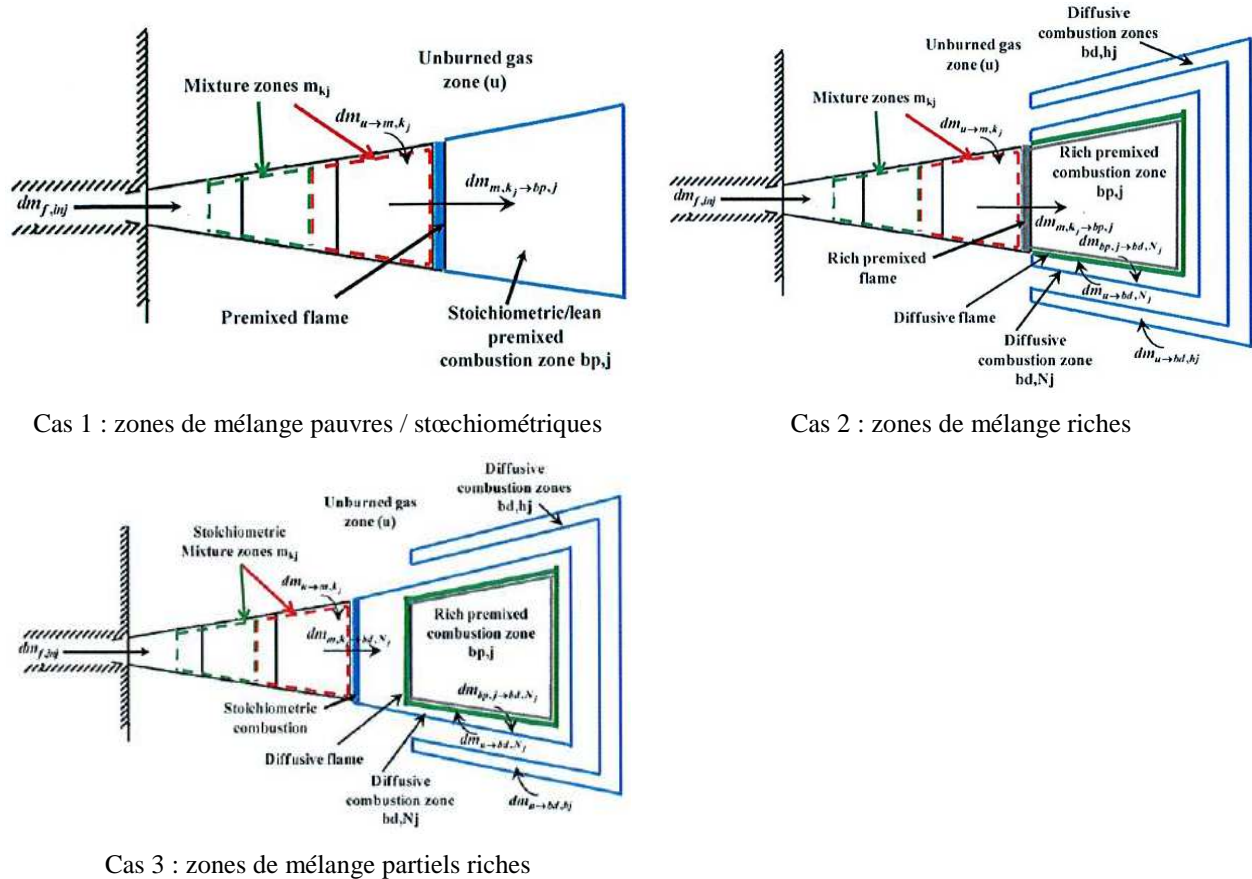


Figure 45 : Schéma de combustion conceptuel pour le modèle de Finesso [140]

Dans les trois cas, les parcelles de carburant commencent par suivre une phase de combustion de pré mélange. Dans le cas 1 ce pré mélange est globalement stœchiométrique ou pauvre, ce qui correspond à un pic de combustion de pré mélange situé bien après la fin de l'injection. Le cas 2 correspond à des conditions où le délai d'inflammation est court, le pic de combustion se situe donc avant la fin d'injection, et le pré mélange est riche. Enfin, le cas 3 est un cas intermédiaire qui correspond à un pic de combustion vers la fin de l'injection. La combustion de pré mélange est riche en tête de spray, puis stœchiométrique. Lorsque la combustion de pré mélange se produit dans des conditions riches, les espèces résultant de la combustion incomplète (suie par exemple) sont oxydées par la suite dans une flamme de diffusion stœchiométrique à la périphérie du spray. Les équations de conservation de la masse dans chaque zone sont écrites ci-dessous (M zones de mélange et N zones de combustion diffusive):

Pour la zone de gaz ambiants m_u :

$$dm_u = -\sum_1^M dm_{u \rightarrow mix} - \sum_1^N dm_{u \rightarrow diff} \quad \text{Éq. 55}$$

Pour les zones de mélange m_{mix} :

$$dm_{mix} = dm_{inj} + dm_{u \rightarrow mix} - dm_{mix \rightarrow pre} \quad \text{Éq. 56}$$

Pour la zone de pré mélange m_{pre} :

$$dm_{pre} = \sum_1^M dm_{mix \rightarrow pre} - dm_{pre \rightarrow N,diff} \quad \text{Éq. 57}$$

Pour la zone de combustion diffusive autour de la zone de combustion de pré mélange $m_{N,diff}$:

$$dm_{N,diff} = dm_{pre \rightarrow N,diff} + dm_{u \rightarrow N,diff} \quad \text{Éq. 58}$$

Pour les autres zones de combustion diffusive m_{diff} :

$$dm_{diff} = dm_{u \rightarrow diff} \quad \text{Éq. 59}$$

Concernant la conservation de l'énergie, ce modèle utilise les tables JANAF pour calculer les propriétés thermodynamiques des espèces. Ce modèle 1D est capable de calculer le processus de mélange air / carburant à partir de la vitesse d'injection expérimentale, et ainsi d'évaluer la richesse des zones de mélange en fonction du temps. La vitesse d'oxydation dans les zones de mélange est calculée à partir de la pression expérimentale, qui est utilisée comme une variable d'entrée pour le modèle, l'approche étant du type diagnostic.

1.4.2.6 Modèles utilisant des PDF

Les modèles PDF (Probability Density Function : fonction de densité de probabilité) servent aussi à faire un découpage qualitatif ou systématique. Cependant, le découpage n'est pas géométrique, mais basé sur un profil de richesse et de température présumé. Cette approche permet un gain en temps de calcul, tout en gardant une précision correcte.

Kraft et al. [141] développent la suite SRM (Modèle de Réacteur stochastique) basée sur les PDF. Par rapport aux modèles multizones où chaque zone est supposée homogène, le modèle de réacteur stochastique permet de modéliser l'inhomogénéité par PDF, en supposant que cette fonction ne varie pas pour toutes les quantités physiques. Le modèle SRM est zéro dimensionnel, ce qui signifie que les quantités sont indépendantes de l'espace. Les "particules stochastiques" (à ne pas confondre avec des atomes ou des molécules physiques) sont différentes des parcelles fluides, ou des zones dans une approche multizones. En effet, elles ne portent aucune information géométrique ni spatiale, mais sont seulement définies par leurs fractions massiques et leur température. Ainsi, la composition de la chambre de combustion du moteur est réduite à un nombre de particules "stochastiques", supposées être homogènes, suivant la distribution des conditions dans le cylindre. La suite SRM peut prendre en compte la cinétique chimique détaillée, le micro-mélange turbulent, ainsi que la combustion et les émissions. Le modèle SRM a été appliqué dans différents cas, certains en combinaison avec de la CFD pour obtenir des informations locales détaillées [142], d'autres travaux étant centrés sur la prédiction des émissions polluantes [143] [144].

Mauviot [145][146] et ses co-auteurs développent un modèle 0D qui découpe la chambre de combustion en deux zones : une zone de spray et une autre zone de gaz frais. Le sous-modèle de spray, qui est divisé en trois parties – le modèle géométrique, le modèle d'évaporation de carburant et le modèle turbulent, est construit à partir des modèles de Siebers et al. [13][109]. Le synoptique général du modèle de Mauviot est présenté sur la Figure 46. Prenant en compte la stratification en richesse du spray, le modèle définit un temps caractéristique de la turbulence qui sera utilisé pour déterminer les mécanismes de micro-mélange en modifiant la forme de la fonction de probabilité (PDF). Pour le calcul du dégagement de chaleur dans la chambre de combustion, ce modèle utilise des tables contenant la cinétique chimique du n-heptane, déterminées par la théorie ILDM de prolongation de flamme [147], et pouvant s'appliquer à une large gamme de combustions car elles incluent des taux d'EGR élevés. Confronté à des données expérimentales, ce modèle a un bon niveau de prévision, avec un coût raisonnable en temps CPU. Néanmoins, il a encore des points à améliorer, par exemple pour traiter les multi-injections.

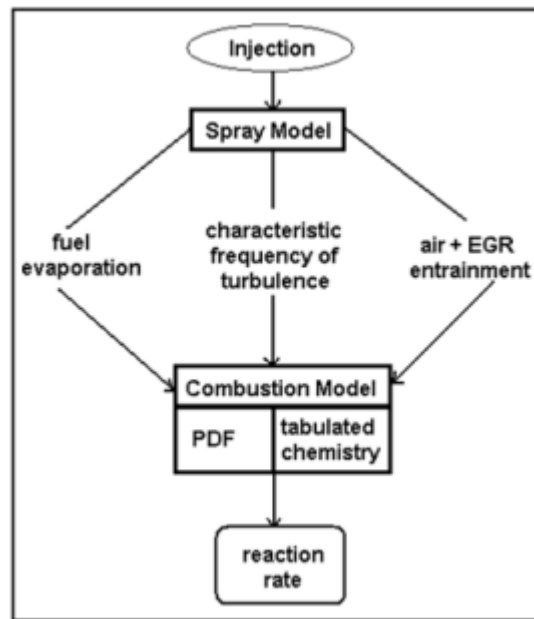


Figure 46: Synoptique général du modèle de Mauviot [146]

A la suite des travaux de Mauviot et Jaine, Bordet et al. [148] développent un modèle phénoménologique de combustion 0D. Ce modèle thermodynamique suppose que, à tout moment pendant le processus de combustion, le volume du cylindre est divisé en deux zones, correspondant à la zone de gaz brûlés et la zone de gaz non brûlés. Ce modèle thermodynamique quasi-dimensionnel intègre plusieurs sous-modèles pour tenir compte de plusieurs phénomènes physiques (turbulence, vaporisation, , etc.), qui est représentée à la Figure 47.

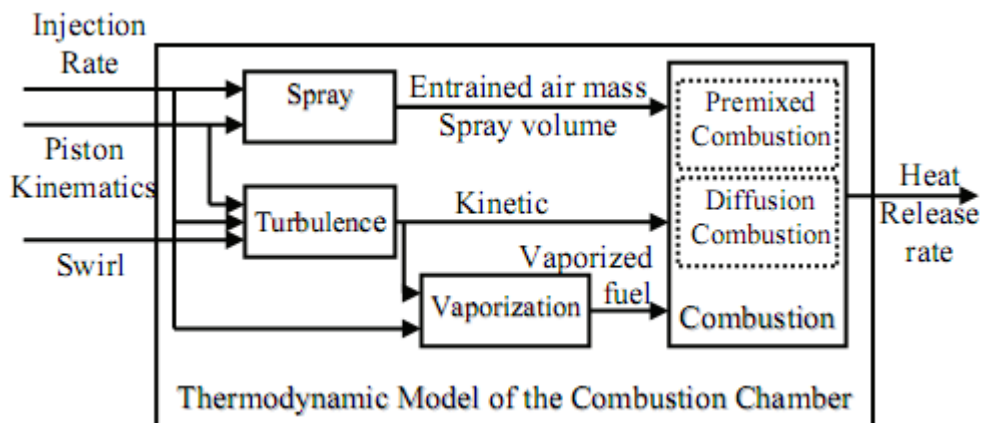


Figure 47 : Synoptique général du modèle de Bordet [148]

Comme les modèles de Chmela et Barba, le modèle de Bordet scinde la combustion en deux phase : pré mélange et diffusion. La combustion de diffusion est traitée avec l’approche de Barba. Pour le sous-modèle de combustion de pré mélange, il améliore le modèle de Mauviot pour l’adapter à l’approche PDF, avec une méthode tabulée pour le taux de réaction du carburant à partir de fraction de mélange Z .

$$\bar{\omega}_f = \int_0^1 P_{\tilde{Z}, \tilde{Z}^{r_2}}(\tilde{Z}) \dot{\omega}_f(\tilde{Z}) d\tilde{Z} \quad \text{Éq. 60}$$

Où $\bar{\omega}_f$ est le taux de réaction de carburant moyen, $\dot{\omega}_f$ le taux de réaction de carburant tabulé, $P_{\tilde{Z}, \tilde{Z}^2}$ représente la β -PDF de fraction de mélange.

Dans la β -PDF, la fraction de mélange moyenne \tilde{Z} et la fluctuation de fraction de mélange \tilde{Z}^2 sont modifiées séparément ci-dessous :

$$\tilde{Z} = \frac{\nu Y_{f,s} - Y_{O_2,s} + Y_{O_2,a,mm}}{\nu + Y_{O_2,a,mm}} \quad \text{Éq. 61}$$

$$\frac{d\tilde{Z}^2}{dt} = \underbrace{\frac{1}{m_s} \left[(1 - \tilde{Z})^2 - \tilde{Z}^2 \right] \dot{m}_{vap}}_{\text{flux de carburant vaporise}} + \underbrace{\frac{1}{m_s} (\tilde{Z}^2 - \tilde{Z}^2) \dot{m}_{a,s}}_{\text{flux d'air entraine}} - \underbrace{2C_\Phi \frac{\tilde{Z}^2}{k/\varepsilon}}_{\text{dissipation}} \quad \text{Éq. 62}$$

Les sous-modèles d'évaporation, d'entraînement de l'air et de turbulence de type k- ε sont développés afin de résoudre l'équation de fluctuation de fraction de mélange [148]. Pour une large gamme de points de fonctionnement du moteur, les calculs de la pression cylindre et du taux de dégagement de chaleur montrent un bon accord avec les relevés expérimentaux.

K. Inagaki et al. [149] développent un modèle en utilisant des PDF en divisant le volume du cylindre en 3 zones, une zone de spray en combustion de pré mélange, une zone de spray en combustion diffusive, et une zone d'air. La zone de spray en combustion diffusive est créée après le délai d'inflammation, qui est défini par le moment où la température de la zone de spray dépasse 1000 K. Des PDF sont utilisées pour calculer la richesse dans les zones du spray avant et après le délai d'inflammation. Concernant la combustion, le modèle simplifié de LTCTC proposé par Kong et al. [150] est utilisé. Il calcule le taux de réaction de carburant dans chaque zone par le temps caractéristique :

$$\frac{dY_{f,i}}{dt} = -\frac{Y_{f,i}}{\tau_{c,i}} \quad \text{Éq. 63}$$

Où $\tau_{c,i}$ représente le temps caractéristique de la zone i. Il est la combinaison de deux termes : un temps caractéristique laminaire $\tau_{l,i}$ qui est contrôlé par la chimie et se calcule avec une loi d'Arrhénius, et un temps caractéristique turbulent $\tau_{t,i}$ qui est modélisé par le modèle k- ε .

$$\tau_{c,i} = \tau_{l,i} + f \cdot \tau_{t,i} \quad \text{Éq. 64}$$

Où f est la fraction massique de carburant.

De plus, ce modèle est applicable à la multi-injection, en rajoutant pour la combustion pilote deux zones de spray, comme décrit précédemment.

J. Kwon et al. [151] développent un modèle basé sur deux sous-modèle – le sous-modèle de mélange type Hiroyasu et al. [113] et le sous-modèle de combustion type CMC (Conditional Moment Closure) proposé par Klimenko et Bilger [152]. Dans le modèle, il utilise le modèle du spray de Hiroyasu pour la pénétration, la vitesse et le temps d'atomisation. Par contre, pour calculer la fraction dans chaque paquet, un profil PDF est utilisé, défini par :

$$F(\eta) = \int_v \bar{\rho} \tilde{P}(\eta) dV \quad \text{Éq. 65}$$

Ici, $\tilde{P}(\eta)$ est une PDF de Favre, qui est intégrée entre 0 et 1 dans le η -espace, $F(\eta)$ représente la somme des masses des zones dont les fractions de mélange correspondent à l'intervalle d'espace dans le η -espace. Les fractions des espèces calculées par la PDF sont utilisées à la prochaine étape par le modèle de combustion de type ISR (Incompletely Stirred Reactor).

Récemment, Dulbecco et al. [153] ont développé le modèle initié par Mauviot et utilisant les PDF pour l'adapter à la combustion HCCI en se basant sur un modèle CFD 3D. Dans ce modèle, plusieurs sous-modèles qui sont utilisés dans le modèle 3D sont implantés dans le modèle 0D. Une fonction β -PDF est utilisée pour caractériser la distribution de mélange air-carburant. La turbulence est estimée par le modèle $k-\varepsilon$. Concernant la combustion, la cinétique chimique détaillée est prise en compte, via une méthode tabulée. Ces développements ont ensuite été poursuivis par Bernard et Lebas pour évaluer les émissions polluantes [154]

1.5 Sous modèles

1.5.1 Modélisation des Sprays

1.5.1.1 Modèle Lagrangien de Naber et Siebers [109]

A la suite des travaux sur l'analyse de la pénétration du spray réalisés par Hays [155], Naber et Siebers développent un modèle du spray qui est illustré sur la Figure 48.

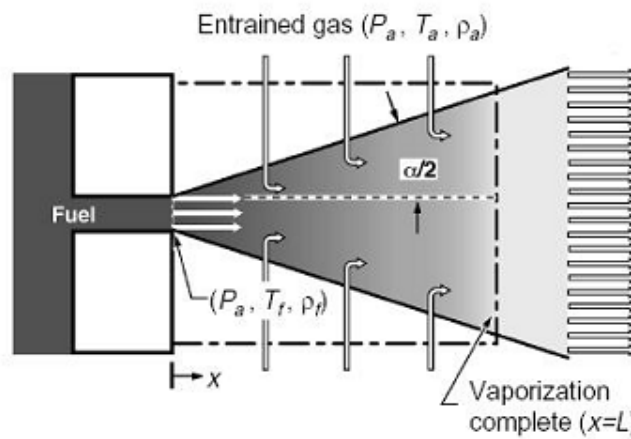


Figure 48 : Schéma du modèle de Naber et Siebers [109]

Le modèle de spray de Naber et Siebers est basé sur l'écriture de la conservation de la masse et la conservation de la quantité de mouvement dans le sens axial sur la surface de contrôle (ligne pointillée), ce qui donne respectivement :

$$\rho_f \cdot A_f(0) \cdot U_f = \rho_f \cdot A_f(x) \cdot U(x) \quad \text{Éq. 66}$$

$$\rho_f \cdot A_f(0) \cdot U_f^2 = \rho_f \cdot A_f(x) \cdot U(x)^2 + \rho_a \cdot A_a(x) \cdot U(x)^2 \quad \text{Éq. 67}$$

Avec :

ρ_f : La densité du carburant

ρ_a : La densité des gaz ambiants

U_f : La vitesse axiale du carburant à la sortie de l'orifice

$A_f(0)$: La section occupée par le carburant à la sortie de l'orifice

$U(x)$: La vitesse du spray à l'abscisse x

$A_f(x)$: La section occupée par le carburant à l'abscisse x

$A_a(x)$: La section occupée par l'air à l'abscisse x

Une troisième équation est rajoutée pour la section du spray à l'abscisse x - $A(x)$:

$$A_a(x) = A(x) - m \cdot A_f(x) \quad \text{Éq. 68}$$

Où m est un paramètre variant entre 0 et 1. Si $m=0$, la section occupée par le carburant est négligée.

Éliminant les termes $A_f(x)$ et $A_a(x)$, on peut obtenir la vitesse en fonction de l'abscisse x du spray :

$$U(x) = \frac{U_f}{2} \cdot \frac{A_f(0)}{A(x)} \cdot \left(\frac{\rho_f}{\rho_a} - m \right) \cdot \left(\sqrt{1 + 4 \cdot \frac{A(x)}{A_f(0)} \cdot \frac{\rho_f}{\rho_a}} - \left(\frac{\rho_f}{\rho_a} - m \right) \right) \quad \text{Éq. 69}$$

En effectuant les changements de variables suivants dans l'équation:

$$\tilde{\rho} = \frac{\rho_f}{\rho_a} \quad \text{Éq. 70}$$

$$x_0 = \frac{m}{2} \cdot \frac{d_f}{\tan(\alpha/2)} \quad \text{Éq. 71}$$

$$x' = x + x_0 \quad \text{Éq. 72}$$

$$\frac{dx'}{dt} = \frac{dx}{dt} = U(x) \quad \text{Éq. 73}$$

$$A(x) = \pi \cdot [x' \cdot \tan(\alpha/2)]^2 \quad \text{Éq. 74}$$

$$A_f(0) = \frac{\pi}{4} \cdot d_f^2 \quad \text{Éq. 75}$$

$$x^+ = d_f \cdot \tilde{\rho}^{1/2} \cdot \left(\frac{\tilde{\rho} - m}{\tilde{\rho}} \right) \cdot \frac{1}{\tan(\alpha/2)} \quad \text{Éq. 76}$$

$$t^+ = d_f \cdot \tilde{\rho}^{1/2} \cdot \left(\frac{\tilde{\rho} - m}{\tilde{\rho}} \right) \cdot \frac{1}{U_f \cdot \tan(\alpha/2)} \quad \text{Éq. 77}$$

$$\tilde{x} = \frac{x'}{x^+} \quad \text{Éq. 78}$$

$$\tilde{t} = \frac{t'}{t^+} \quad \text{Éq. 79}$$

L'équation devient alors :

$$\frac{d\tilde{x}}{d\tilde{t}} = \frac{2}{\sqrt{1 + 16 \cdot \tilde{x}^2 + 1}} \quad \text{Éq. 80}$$

Qui peut également se mettre sous la forme suivante :

$$d\tilde{t} = \frac{\sqrt{1 + 16 \cdot \tilde{x}^2 + 1}}{2} \cdot d\tilde{x} \quad \text{Éq. 81}$$

La résolution de cette équation différentielle conduit au calcul de la primitive ci-après, en intégrant de $\tilde{x} = 0$ à $\tilde{x} = \tilde{s}$, où \tilde{s} est la pénétration adimensionnée dans le nouveau repère :

$$\tilde{t} = \int_0^{\tilde{s}} \left(\frac{\sqrt{1 + 16 \cdot \tilde{x}^2 + 1}}{2} \right) d\tilde{x} \quad \text{Éq. 82}$$

Et finalement, on peut calculer le temps \tilde{t} mis pour effectuer une pénétration de \tilde{S} :

$$\tilde{t} = \frac{\tilde{S}}{2} + \frac{\tilde{S}}{4} \cdot \sqrt{1+16 \cdot \tilde{S}^2} + \frac{1}{16} \cdot \ln\left(4 \cdot \tilde{S} + \sqrt{1+16 \cdot \tilde{S}^2}\right) \quad \text{Éq. 83}$$

La fonction inverse de l'équation n'existant pas, Naber et Siebers proposent la relation suivante en combinant les limites de la pénétration à court et long terme :

$$\tilde{S} = \left[\left(\frac{1}{\tilde{t}}\right)^n + \left(\frac{1}{\tilde{t}^{1/2}}\right)^n \right]^{-1/n} = \frac{\tilde{t}}{\left(1 + \tilde{t}^{n/2}\right)^{1/n}}, n = 2.2 \quad \text{Éq. 84}$$

Selon Jaine [80], ce modèle donne sensiblement les mêmes pénétrations que le modèle d'Hiroyasu, comme illustré sur la Figure 49.

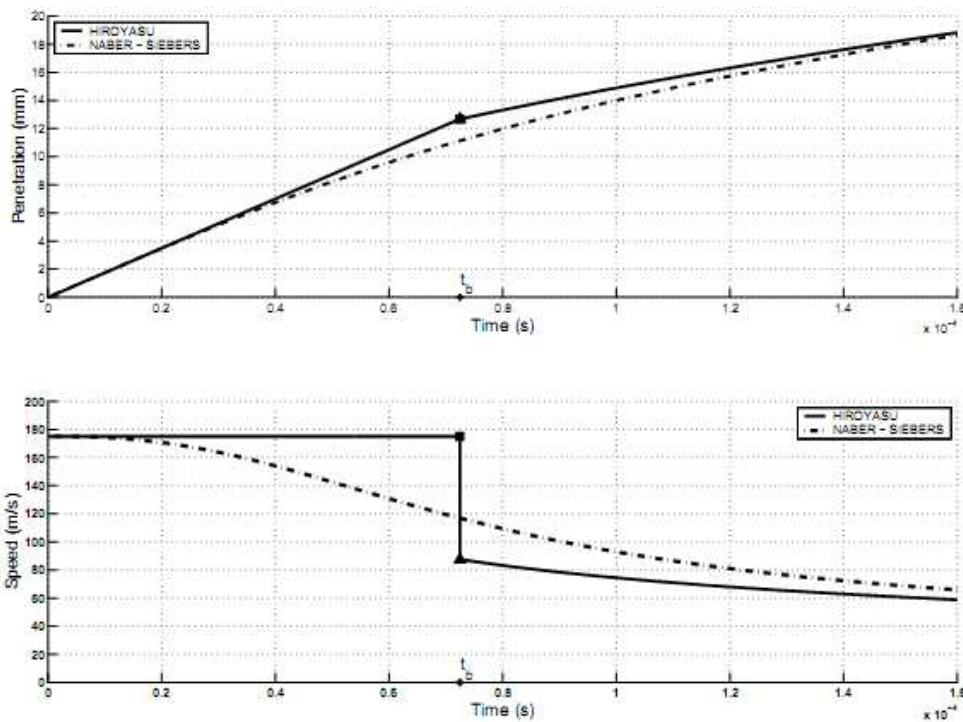


Figure 49 : Comparaison des modèles d'Hiroyasu et de Naber et Siebers selon Jaine[80]

Par ailleurs, Siebers et al. développent aussi un modèle phénoménologique pour la pénétration maximale du spray en phase-liquide (distance au nez de l'injecteur de la dernière goutte de carburant liquide) dans un spray Diesel évaporant, en appliquant l'approche déjà utilisée pour la pénétration vapeur décrite ci-dessus. Des hypothèses similaires sont retenues, auxquelles s'ajoutent les hypothèses suivantes [109]:

- La phase vapeur du carburant est à la saturation.
- La phase vapeur du carburant est en équilibre thermodynamique avec les gaz ambiants entraînés et la phase liquide de carburant.
- L'absorption de vapeur de carburant par la phase liquide est négligée.
- L'énergie cinétique dans la zone de vaporisation du carburant est négligée devant les transferts thermiques mis en jeu.

Sur la base de ces hypothèses, les bilans de masse et l'énergie s'écrivent :

$$\dot{m}_f = \rho_f \cdot A_f \cdot U_f = \dot{m}_f(L) = \rho_f(L) \cdot A(L) \cdot U(L) \quad \text{Éq. 85}$$

$$\dot{m}_a(L) = \rho_a(L) \cdot A(L) \cdot U(L) \quad \text{Éq. 86}$$

$$\dot{m}_f(L) \cdot h_f(T_f, P_a) + \dot{m}_a(L) \cdot h_a(T_a, P_a) = \dot{m}_f(L) \cdot h_f(T_s) + \dot{m}_a(L) \cdot h_a(T_s, P_a - P_s) \quad \text{Éq. 87}$$

Le terme \dot{m}_f est le débit de carburant à la sortie du nez de l'injecteur. $\dot{m}_a(L)$ est le taux d'entraînement de l'air en amont de la distance L, qui est égal au débit massique de gaz ambiant à travers la surface de contrôle à l'abscisse L. $\rho_f(L)$ et $\rho_a(L)$ sont respectivement les densités partielles en carburant et en air à la distance L, h_f et h_a sont les enthalpies spécifiques du carburant et de l'air, T_s est la température de saturation, T_f est la température du carburant à sa sortie du nez de l'injecteur, T_a est la température de l'air, P_a , P_s la pression de l'air et la pression de saturation, respectivement. $P_a - P_s$ est la pression partielle de carburant vapeur. Par définition à $x = L$, le carburant est complètement vaporisé et les densités partielles du carburant et des gaz ambiants sont dépendants de leurs pressions partielles respectives.

En réarrangeant l'équation donne le rapport entre les débits de masse en termes d'enthalpies spécifiques :

$$B = \frac{\dot{m}_f(L)}{\dot{m}_a(L)} = \frac{h_a(T_a, P_a) - h_a(T_s, P_a - P_s)}{h_f(T_s) - h_f(T_f, P_a)} \quad \text{Éq. 88}$$

Et on peut également écrire [13]:

$$\frac{\dot{m}_f(L)}{\dot{m}_a(L)} = \frac{2}{\sqrt{1 + 16 \cdot \tilde{L}^2} - 1} \quad \text{Éq. 89}$$

Et finalement :

$$\tilde{L} = b \cdot \sqrt{\left(\frac{2}{B(T_a, P_a, T_f)} + 1 \right)^2 - 1} \quad \text{Éq. 90}$$

Où b est un coefficient empirique, choisi de sorte de minimiser l'écart entre les pénétrations liquides maximales calculée et mesurée. Siebers obtient $b = 0.41$. Avec ce modèle, il reproduit toutes les grandes tendances observées sur les données expérimentales à l'égard de divers paramètres. Sur la Figure 50, la Figure 51 et la Figure 52, sont présentés les effets importants et non-linéaires de la température et de la densité des gaz ambiants sur la longueur liquide, ainsi que l'augmentation de la longueur liquide avec la diminution de la volatilité du carburant.

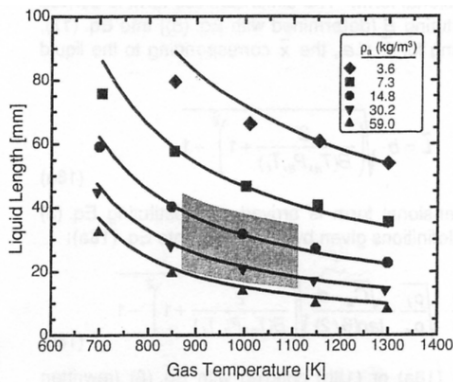


Figure 50 : longueur liquide fonction de la température et de la densité ambiantes (carburant Cétane)

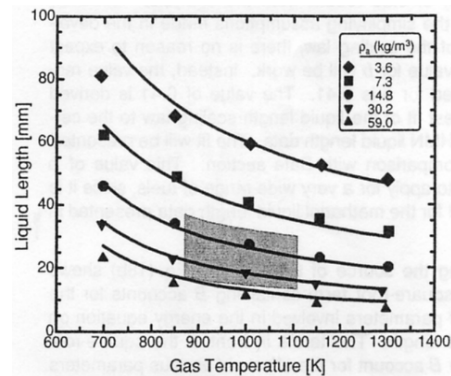


Figure 51 : longueur liquide fonction de la température et de la densité ambiantes (carburant HMN)

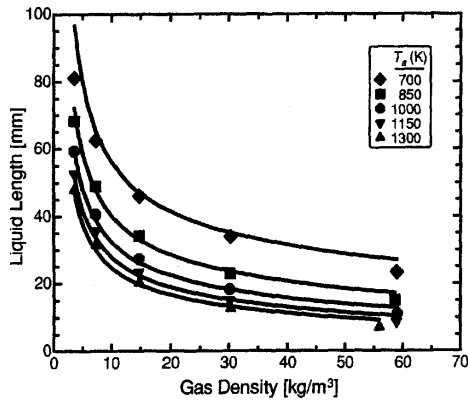


Figure 52 : longueur liquide fonction de la température et de la densité ambiantes (carburant HMN)

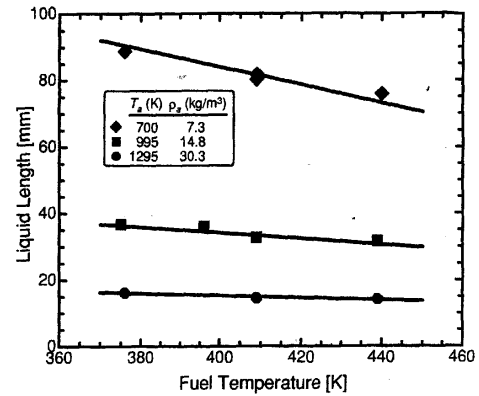


Figure 53 : Longueur liquide en fonction de la température du carburant injecté (Cétane) pour 3 densités ambiantes

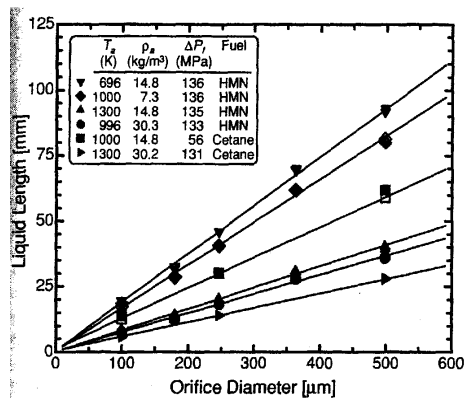


Figure 54 : Longueur liquide en fonction du diamètre de l'orifice d'injection

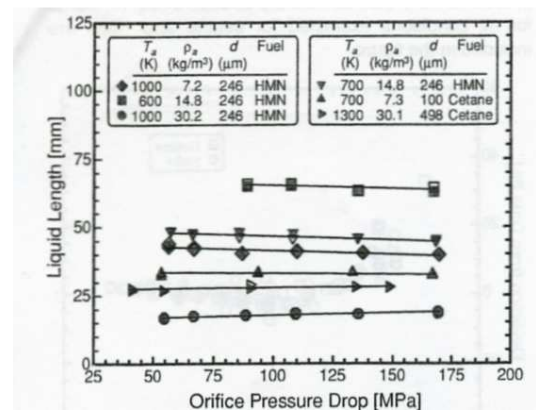


Figure 55 : Longueur liquide en fonction de la chute de pression à travers l'orifice de l'injecteur

La diminution linéaire de longueur liquide avec l'augmentation de la température du carburant apparaît sur la Figure 53. La Figure 54 illustre la dépendance linéaire de la longueur liquide en fonction du diamètre de l'orifice d'injection, tandis que la Figure 55 montre l'absence d'effet significatif de la pression d'injection sur la longueur liquide peut être déduit de.

Enfin, le fait que ce soit le mélange qui limite la vaporisation implique que l'atomisation et les processus locaux de transport en interphase à la surface des gouttelettes ne sont pas des facteurs limitant pour la vaporisation du carburant. Même améliorée, l'atomisation ne favorise pas l'augmentation de la vaporisation du carburant dans un Diesel spray actuel.

1.5.1.2 Modèles Eulérien du CMT

En s'inspirant des travaux de Naber et Siebers [13] [109], des chercheurs du CMT (Université de Valence) ont développé une série de modèles de spray avec une description de plus en plus détaillée et une complexité croissante. Un modèle semi-empirique pour des jets de gaz turbulents et des sprays Diesel a tout d'abord été développé [156]. A partir d'une analyse des équations de conservation et des résultats expérimentaux, il apparaît que les paramètres qui ont le plus d'influence sur la pénétration s du jet gazeux sont la densité de l'air ρ_a , le flux de quantité de mouvement

injectée \dot{M}_0 , et, puisque le processus n'est pas permanent, le temps depuis le début de l'injection t . En effectuant une analyse dimensionnelle entre ces variables et la pénétration de spray, on trouve la dépendance ci-dessous:

$$s \propto \rho_a^{-1/4} \cdot \dot{M}_0^{1/4} \cdot t^{1/2} \quad \text{Éq. 91}$$

Prenant en compte que $\dot{M}_0 = \rho_f \cdot \pi/4 \cdot d_0^2 \cdot u_0^2$, et aussi que $d_{eq} = d_0 \cdot \sqrt{\rho_f/\rho_a}$, l'expression précédente peut être transformée comme suit :

$$s = k_p \cdot \left(\frac{\rho_f}{\rho_a} \right)^{1/4} \cdot (d_0 \cdot u_0 \cdot t)^{1/2} = k_p (d_{eq} \cdot u_0 \cdot t)^{1/2} \quad \text{Éq. 92}$$

Avec

- ρ_f : densité de carburant
- d_0 : diamètre de buse
- u_0 : vitesse d'injection
- d_{eq} : diamètre équivalent
- k_p : constant de proportionnalité

Comme l'angle de cône d'un spray Diesel dans la région principale dépend des conditions ambiantes, et a une influence directe sur le développement du spray, il doit donc apparaître dans l'équation :

$$s = \left(\frac{2 \cdot u_0 \cdot d_{eq} \cdot t}{\sqrt{k_1} \cdot \tan(\theta/2)} \right)^{1/2} \quad \text{Éq. 93}$$

Où k_1 est la constante de profil radial Gaussien du spray et θ est l'angle du cône, calculé à partir du modèle d'Hiroyasu et Arai [12]. Les confrontations avec des résultats de simulation CFD et des résultats expérimentaux sont cohérentes et permettent d'établir la validité des lois d'échelle proposées.

Un modèle est ensuite développé en considérant la variation de densité locale et du nombre de Schmidt [19]. Sur la Figure 56, un système de coordonnées (x, r) est considéré, situé à l'origine du spray, où la coordonnée x coïncide avec l'axe jet, et la coordonnée r est la position radiale. Afin de maintenir la conservation du flux de quantité de mouvement, elle doit être intégrée sur toute la section :

$$\dot{M}_0 = \dot{M}(x) = \int_0^R 2\pi\rho(x, r)rU^2(x, r)dr \quad \text{Éq. 94}$$

Où $\rho(x, r)$ est la densité locale dans le spray et $U(x, r)$ est la vitesse axiale.

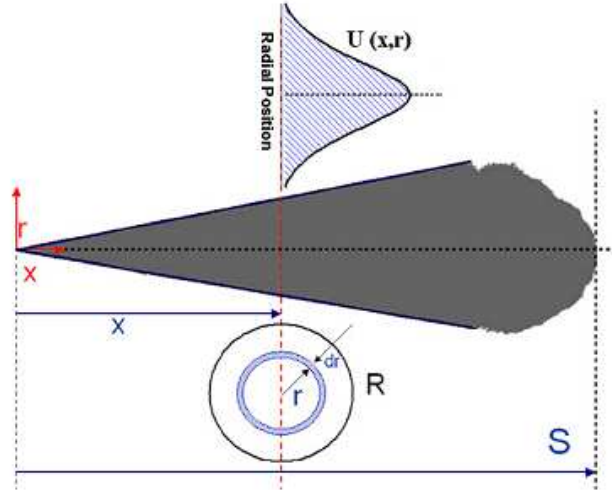


Figure 56 : Représentation générique du spray [19]

La densité en un point du spray, en tenant compte de la concentration locale, peut être écrite comme ci-dessous :

$$\rho(x, r) = \rho_f \frac{1}{C(x, r) \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_a}\right) + \frac{\rho_f}{\rho_a}} \quad \text{Éq. 95}$$

Avec ρ_f , la densité du carburant, ρ_a la densité de l'air et $C(x, r)$ la locale concentration massique de carburant.

Pour la région développée du spray, la concentration de carburant et la vitesse axiale sont supposés suivre un profil radial gaussien :

$$U(x, r) = U_{axis}(x) \exp\left(-\alpha \left(\frac{r}{R}\right)^2\right) \quad \text{Éq. 96}$$

$$C(x, r) = C_{axis}(x) \exp\left(-\alpha Sc \left(\frac{r}{R}\right)^2\right) \quad \text{Éq. 97}$$

Avec Sc le nombre de Schmidt et α un facteur de forme de distribution gaussienne. Comme montré par d'autres auteurs [136][157][158], ces dernières sont les fonctions qui coïncident le mieux avec les données expérimentales disponibles dans la littérature. Finalement, on peut obtenir :

$$\dot{M}_0 = \dot{M}(x) = 2\pi U_{axis}^2 \rho_f \int_0^R \frac{r \exp\left(-2\alpha \left(\frac{r}{R}\right)^2\right)}{C_{axis} \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_a}\right) \exp\left(-\alpha Sc \left(\frac{r}{R}\right)^2\right) + \frac{\rho_f}{\rho_a}} dr \quad \text{Éq. 98}$$

Il peut être démontré que $C_{axis} = \left(\frac{1+Sc}{2}\right) \frac{U_{axis}}{U_0}$. Par conséquent, il est possible d'obtenir la vitesse sur l'axe U_{axis} par l'équation ci-dessus avec une valeur de Sc (dans le spray Diesel, des valeurs du nombre de Schmidt courantes sont proposées dans la littérature [156][159] et sont comprises entre 0.6 et 0.8) puis les valeurs locales $U(x, r)$ et $C(x, r)$ séparément.

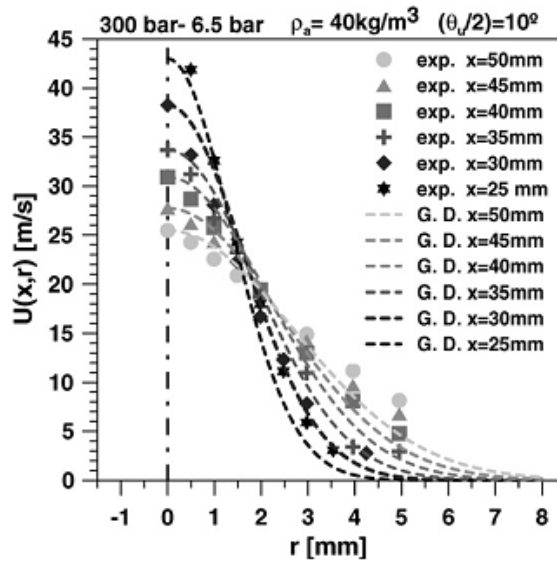


Figure 57 : Profils de vitesse expérimentaux dans les différentes sections du spray et comparaison avec les profils Gaussiens [19]

Le profil radial de vitesse expérimental est représenté sur la Figure 57 et comparé avec un profil gaussien avec $\alpha = 4.6$. Il apparaît que le profil gaussien proposé prédit les valeurs de vitesse avec un bon accord.

A partir des modèles précédents, un modèle 1D pour la description du spray Diesel a été développé, contrôlé par le mélange [23]. Le schéma du modèle est représenté sur la Figure 58.

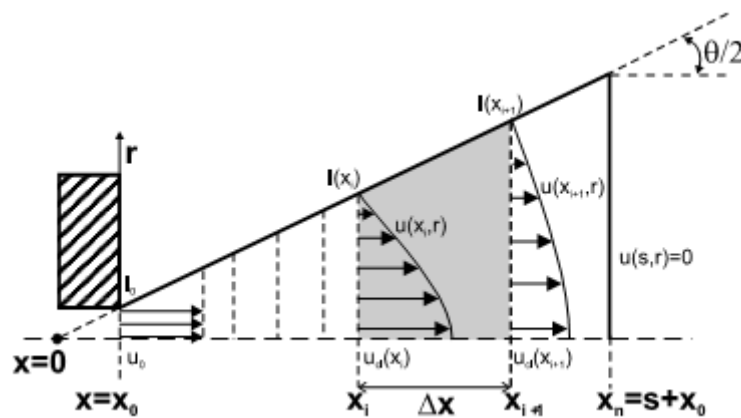


Figure 58 : Schéma du modèle 1D [23]

Le spray Diesel est supposé avoir un profil de vitesse uniforme à la sortie de la buse. Ce flux échange la quantité de mouvement avec l'air ambiant, de sorte qu'il augmente en largeur avec la distance axiale. L'angle du spray θ définit cette croissance radiale, et est une entrée du modèle. Le diamètre de l'injecteur d_0 et l'angle du spray définissent l'origine virtuelle du spray, où $x = x_0 = d_0 / 2 / \tan(\theta/2)$. En raison de la nature transitoire de la problématique générale, le domaine du spray est divisé axialement en un certain nombre de mailles avec une certaine épaisseur Δx couvrant toute la section du spray. Chaque maille est limitée par la section d'entrée et la section de sortie (i et $i+1$, respectivement) afin que $x_{i+1} = x_i + \Delta x$. A chaque instant, la pénétration s est définie par la maille où la vitesse d'entrée est différente de zéro et la vitesse de sortie est nulle. Les équations de conservation sont formulées pour

chaque maille. Les inconnues à résoudre sont celles liées aux équations de conservation, soit la vitesse axiale u , la fraction massique de carburant f et l'enthalpie h . A chaque instant t , les hypothèses suivantes sont faites :

- l'axe du spray constitue un axe de symétrie, en particulier il n'y a pas de swirl.
- le flux turbulent est supposé complètement développé, ce qui signifie que des profils radiaux auto-similaires peuvent être définis pour les variables conservées. Dans ce modèle, comme dans les précédents, une distribution radiale gaussienne est utilisée.
- le mélange est supposé localement homogène.
- La pression est supposée constante, et ainsi les effets de compressibilité sont négligés.
- La densité locale est calculée selon l'hypothèse du mélange idéal.

Pour chaque maille, les équations différentielles de conservation pour la quantité de mouvement axiale I , la masse de carburant M_f et l'énergie H sont formulées comme suit (Une discrétisation temporelle implicite est utilisée) :

$$I_i^{j+1} - I_{i+1}^{j+1} = \frac{\int \rho(x, r, t^{j+1}) u(x, r, t^{j+1}) dV - \int \rho(x, r, t^j) u(x, r, t^j) dV}{\Delta t} \quad \text{Éq. 99}$$

$$M_{f,i}^{j+1} - M_{f,i+1}^{j+1} = \frac{\int \rho(x, r, t^{j+1}) f(x, r, t^{j+1}) dV - \int \rho(x, r, t^j) f(x, r, t^j) dV}{\Delta t} \quad \text{Éq. 100}$$

$$H_i^{j+1} - H_{i+1}^{j+1} = \frac{\int \rho(x, r, t^{j+1}) (h(x, r, t^{j+1}) - h_{a,\infty}) dV - \int \rho(x, r, t^j) (h(x, r, t^j) - h_{a,\infty}) dV}{\Delta t} \quad \text{Éq. 101}$$

Où les indices $(i, i+1)$ correspondent aux coordonnées discrétisées spatiales ($x_{i+1} = x_i + \Delta x$), alors que, les exposants $(j, j+1)$ se réfèrent à la variable de temps ($t^{j+1} = t^j + \Delta t$).

Afin de reformuler les équations, les intégrales de flux d'entrée et de sortie et les intégrales de volume pour chaque maille doivent être exprimées de sorte qu'elles ne dépendent que de la section d'entrée et de la section de sortie. Ainsi, pour toute variable conservée q (correspondant à u, f et h), le flux Q (correspondant à I, M_f et H) peut être exprimé :

$$Q_i^{j+1} = \int_0^\infty \rho(x_i, r, t^{j+1}) \cdot u_{cl}(x_i, t^{j+1}) \cdot q_{cl}(x_i, t^{j+1}) \cdot \exp(-Gk\xi^2) \cdot 2\pi r dr \quad \text{Éq. 102}$$

Où u_{cl} et q_{cl} sont les variables sur l'axe, $\xi = r/x$, k la constante de profil Gaussien, G est un paramètre qui a des valeurs différentes en fonction de la variable conservée q . Si $q=u$ alors $G=2$, si $q=f$ alors $G=(1+Sc)$, et si $q = h - h_\infty$ alors $G=(1+Pr)$. Cette équation peut encore être exprimée comme suit:

$$Q_i^{j+1} = 2\pi x_i^2 \cdot u_{cl,i}^{j+1} \cdot q_{cl,i}^{j+1} \cdot F(f_{cl,i}^{j+1}, Sc, G, k) \quad \text{Éq. 103}$$

Où l'intégrale transversale F a été incluse dans la fonction :

$$F(f_{cl,i}^{j+1}, Sc, G, k) = \int_0^\infty \rho(\xi, f_{cl}(x, t), Sc) \cdot \exp(-Gk\xi^2) \cdot \xi \cdot d\xi \quad \text{Éq. 104}$$

Les équations d'état sont calculées séparément des équations de l'écoulement, afin de déterminer les propriétés thermodynamiques locales à partir des propriétés du carburant pur et de l'air. La description générale de la structure du modèle est illustrée sur la Figure 59.

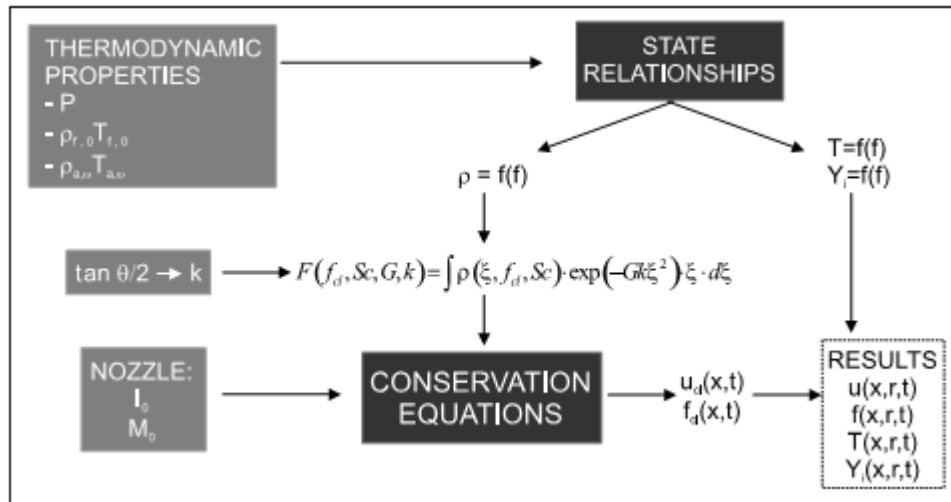


Figure 59 : Description générale de la structure de modèle [23]

Le modèle résout les équations de conservation pour la quantité de mouvement axiale et la masse de carburant en termes de valeurs sur l'axe u_{cl} de f_{cl} . Pour ce faire, l'intégrale radiale F doit être calculée à l'avance. Cette fonction dépend de f_{cl} , du nombre de Schmidt, de l'angle du spray, de la fonction du profil radial et de la densité locale. Cette dernière intervient dans les équations d'état, qui permettent de calculer l'équilibre local à partir des conditions aux limites du problème. Après la résolution des équations de conservation et l'obtention de u_{cl} de f_{cl} , les valeurs de ces variables en n'importe quel endroit du spray peuvent être calculées à l'aide de la fonction de profil radial. Par ailleurs, si f est connue à une certaine position, les valeurs des propriétés thermodynamiques à cette position peuvent être calculées à partir des équations d'état.

1.5.1.3 Modèle de Musculus [22]

Des mesures récentes sur des jets Diesel transitoires ont montré que le carburant se mélange avec les gaz ambiants plus rapidement après la fin de l'injection (EOI), ce qui peut créer des régions pauvres près de l'injecteur, favorables pour une combustion froide peu polluante. Pour étudier ce phénomène, Musculus et al. ont développé un modèle 1D simplifié qui est basé sur une analyse de volumes de contrôle voisine de celle proposée par Naber et Siebers dans le cas d'une injection constante. Le domaine du spray est discrétisé dans la direction axiale et des termes transitoires sont ajoutés pour les équations bilans de quantité de mouvement et de masse de carburant dans chaque volume de contrôle.

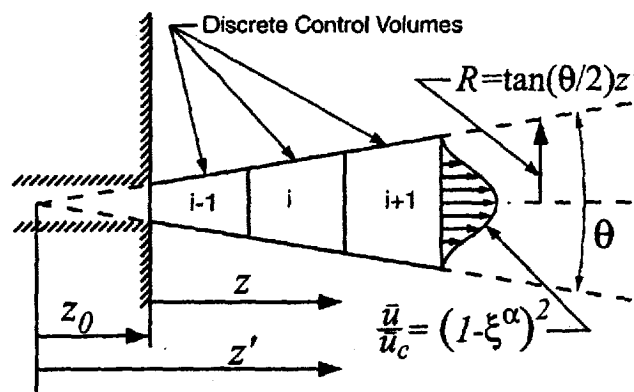


Figure 60 : Discrétisation du spray en volumes de contrôle dans le modèle de Musculus [22]

La Figure 60 est une illustration de la discrétisation unidimensionnelle axiale en volumes de contrôle englobant un spray Diesel. Les équations de transport transitoires peuvent être résolues si les hypothèses suivantes sont appliquées :

- Le jet est non-vaporisant.
- Le spray est incompressible.
- Les forces turbulentes visqueuses agissant sur chaque volume de contrôle sont négligées.
- La quantité de mouvement due à la diffusion turbulente axiale est négligée. En conséquence, seule la convection axiale est considérée dans l'équation de transport transitoire de quantité de mouvement.
- La force nette en raison de tout gradient de pression axial est supposée négligeable.
- L'angle du spray θ est traité comme une constante pendant et après la fin de l'injection.
- Le profil radial de la vitesse reste inchangé pendant et après la fin de l'injection.

En utilisant les hypothèses ci-dessus, les équations discrétisées de transport transitoire pour la masse de carburant et la quantité de mouvement sont développées comme suit.

$$m_{f,i}^{t+1} = m_{f,i}^t + \rho_f \left[\left(\beta \bar{X}_f \bar{u} A \right)_{i-1}^t - \left(\beta \bar{X}_f \bar{u} A \right)_i^t \right] \Delta t \quad \text{Éq. 105}$$

$$M_i^{t+1} = M_i^t + \left[\left(\bar{\rho} \beta (\bar{u})^2 A \right)_{i-1}^t - \left(\bar{\rho} \beta (\bar{u})^2 A \right)_i^t \right] \Delta t \quad \text{Éq. 106}$$

Combinées avec les équations :

$$\bar{X}_f = \frac{m_f / \rho_f}{A \Delta z} \quad \text{Éq. 107}$$

$$\bar{\rho} = \rho_f \bar{X}_f + \rho_a (1 - \bar{X}_f) \quad \text{Éq. 108}$$

$$\bar{u} = \frac{M}{\bar{\rho} A \Delta z} \quad \text{Éq. 109}$$

Où les exposants indiquent le décompte des pas de temps (t) et les indices indiquent le numéro du volume de contrôle (i), et aussi :

- m_f : la masse de carburant
- M : la quantité de mouvement
- ρ_f : la densité de carburant
- ρ_a : la densité d'air
- $\bar{\rho}$: la densité moyenne
- \bar{X}_f : la fraction volumique de carburant
- \bar{u} : la vitesse moyenne
- A : la section transversale
- Δz : la largeur du volume de contrôle
- β : un facteur qui représente le profil radial de fraction volumique de carburant et de vitesse, variant de $\beta = 1$ pour un profil uniforme à environ $\beta = 2$ pour un spray qui est complètement développé.

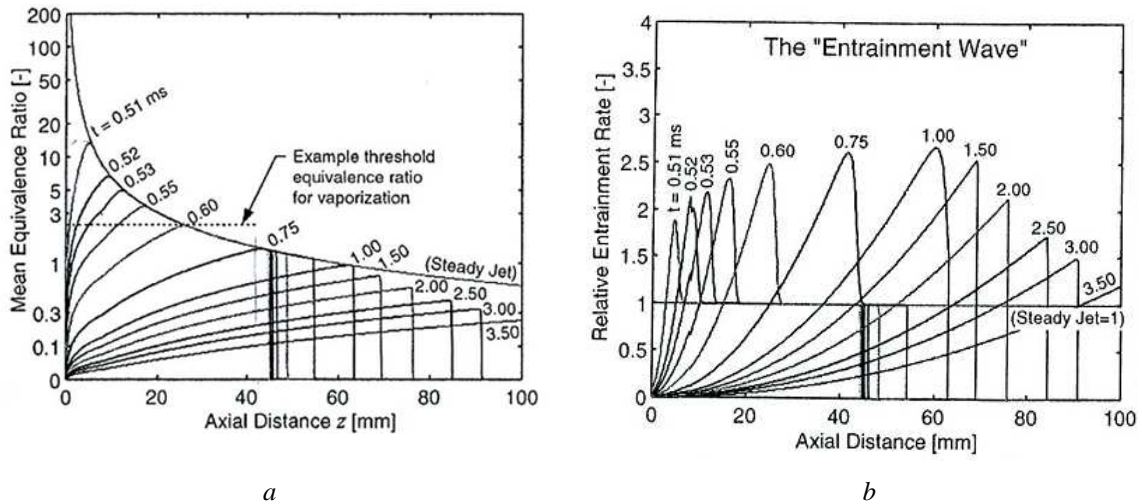


Figure 61 : Les résultats de prédiction du modèle Musculus [22]

La Figure 61 illustre les résultats du modèle de Musculus. La Figure 61a montre la richesse moyenne en fonction de la distance axiale selon le temps de simulation. Le modèle réussit à capturer la formation de régions pauvres très rapidement après la fin de l'injection. Par ailleurs, l'analyse de la prédiction du modèle (Figure 61b) montre que, après la fin de l'injection, l'entraînement du gaz ambiant dans le jet augmente pour atteindre jusqu'à trois fois sa valeur en régime permanent. Le modèle montre également que la région où l'entraînement est augmenté, se déplace comme une onde vers l'aval du spray, à deux fois la vitesse de pénétration, juste après la fin de l'injection (à 0.51 ms). Cette « onde d'entraînement » est une caractéristique intrinsèque des sprays transitoires en général, et elle est très importante pour la combustion conventionnelle et la combustion froide.

1.5.2 Modélisation de la cinétique chimique

1.5.2.1 Mécanismes Globaux, Semi-Globaux et Détaillés

I. Mécanisme Global

Ce type de schéma, d'une grande simplicité, met en jeu un nombre très limité d'espèces et de réactions. Il est pertinent uniquement dans les conditions pour lesquelles il a été élaboré. Généralement basé sur des hypothèses simplificatrices, les mécanismes de ce type de schéma ne donnent pas toujours des résultats précis. Parmi les mécanismes empiriques, les plus simples font appel à une seule équation mettant en jeu quatre espèces chimiques comme dans le modèle de CMT précédent [135] :



Et avec une vitesse de réaction qui est calculé par la loi d'Arrhenius :

$$\frac{d[C_m H_n]}{dt} = A [C_m H_n]^a [O_2]^b e^{-E_a/RT} \quad \text{Éq. 110}$$

Où la loi d'Arrhenius modifiée :

$$\frac{d[C_m H_n]}{dt} = AT^n [C_m H_n]^a [O_2]^b e^{-E_a/RT} \quad \text{Éq. 111}$$

où n_1, n_2, n_3, n_4 sont les coefficients de différentes espèces, a et b sont des facteurs de puissance, E_a est l'énergie d'activation d'Arrhenius en kJ/mol, T la température en K, R la constante des gaz parfaits, A le facteur pré-exponentiel (appelé aussi facteur de fréquence) tenant compte de la fréquence des collisions et des effets stériques.

Dans la loi d'Arrhenius modifiée, avec des mesures plus précises effectuées sur une large plage de température, il apparaît que A fait intervenir un facteur en T^n selon les cas. Dans ce type de mécanisme, la valeur de l'énergie d'activation a une importance prépondérante sur la vitesse des réactions, les réactions ayant les énergies d'activation les plus faibles étant les plus rapides. L'application d'un mécanisme global est limitée à la prévision des vitesses de flammes et de certaines limites d'inflammabilité (pauvre et riche). Un tel modèle est incapable de prévoir l'évolution des espèces intermédiaires stables; de plus il conduit à une température finale adiabatique trop élevée [160]. Pour prendre en compte l'évolution des espèces intermédiaires, par exemple CO, ou H₂, le mécanisme global passe à 3 équations en rajoutant les étapes réversibles suivantes :



II. Mécanisme Semi-Global

Légèrement différente, cette approche consiste à distinguer deux étapes dans la réaction, une première où le combustible est oxydé en CO et H₂ et une seconde où sont fabriqués CO₂ et H₂O, comme montré ci-dessous :

Première étape :



Seconde étape :



Pour chaque étape, la vitesse de réaction est calculée par la loi d'Arrhenius, donc les vitesses de réactions des deux étapes sont différentes par rapport au mécanisme global où la vitesse de réaction est unique. Au cours de la combustion des alcanes, il est également possible de prendre en compte la chimie d'oxydation des hydrocarbures intermédiaires, tels C₂H₄ par exemple :



Ce type de mécanisme peut prévoir le délai d'auto-inflammation assez correctement, mais par contre, il conduit à une mauvaise représentation des profils de concentrations des espèces dans les flammes. Gasnot [160] montre que certains auteurs proposent un modèle où une première étape de schéma est suivie d'un schéma cinétique détaillé correspondant à l'oxydation des systèmes H₂/O₂ et CO/CO₂ (environ 30 réactions élémentaires réversibles), qu'on peut qualifier de « schéma quasi-détaillé ». Les profils de concentrations des espèces sont alors améliorés.

III. Mécanisme chimique détaillé

Un mécanisme chimique détaillé décrit de façon fine les différentes étapes d'une transformation chimique. Il décrit chaque état de transition, quelles liaisons sont rompues et dans quel ordre, quelles liaisons sont reformées et dans quel ordre, ainsi que la vitesse relative de chaque étape. Ce type de mécanisme complet fournit aussi la quantité de chaque réactif consommé et celle de chaque produit formé. Il décrit la catalyse éventuelle et la stéréochimie des espèces chimiques qui entrent en jeu. L'ordre des réactions des molécules qui réagissent doit aussi être indiqué. Finalement, un mécanisme chimique détaillé peut être écrit en considérant toutes les espèces intermédiaires

possibles et toutes les réactions possibles entre ces espèces. Ainsi, les espèces doivent donc être sélectionnées d'une part en prenant en compte au moins toutes les espèces dosées expérimentalement (par exemple les émissions polluantes) et d'autre part à partir de considérations thermodynamiques (espèces dans les réactions fortes). Il faut connaître la précision recherchée, savoir si on cherche à déterminer précisément uniquement les espèces stables ou également les espèces réactives, la complexité du mécanisme devenant rapidement croissante avec la précision [160] [161]. Le Tableau 1 ci dessous donne un exemple de la comparaison de complexité des mécanismes pour la combustion du n-heptane (C_7H_{16}).

Nom de mécanisme	Nombre d'espèces	Nombre de réactions	Temps CPU* (s)
ERC	30	52	4.69^E-02
Stanford	45	112	4.69^E-02
Chalmers_heptane_toluene	75	325	2.97^E-01
Chalmers_PRF	120	619	5.00^E-01
LLNL_heptane_reduit	161	1540	1.53^E+00
LCSR_heptane_toluene	533	2894	2.50^E+00
LLNL_heptane	561	2539	2.31^E+00
LLNL_PRF	1034	4236	5.69^E+00
LCSR_PRF_NO	1063	4459	1.16^E+01

* pour une itération.

Tableau 1 : Comparaison de quelques mécanismes détaillés pour la combustion du n-heptane

Les réactions impliquées dans les mécanismes détaillés à basse et à haute température sont généralement pris en compte. Séparément, Battin-Leclerc et Simmie ont rédigé des aperçus pour les mécanismes à basse et à haute température. Simmie [162] se concentre sur la modélisation de l'oxydation des hydrocarbures dans la phase gazeuse à haute température par la cinétique chimique détaillée. La validation du modèle est aussi effectuée en comparant les résultats avec les expériences. Toutes les classes d'hydrocarbures sont couvertes, notamment les alcanes linéaires et cycliques, les alcènes, les alcynes, ainsi que les aromatiques. Afin d'étudier des conditions proches de celles observées dans les moteurs, Battin-Leclerc [161] analyse les modèles cinétiques détaillés en phase gazeuse, qui ont été récemment développés pour modéliser l'oxydation et l'auto-inflammation des composants de plusieurs familles (les alcanes, les éthers, les esters, les alcènes, les cyclo-alcanes, les aromatiques) et de mélanges de plusieurs d'entre eux. Afin de se restreindre à des composés réellement représentatifs de ceux inclus dans l'essence et le gazole, seuls ceux contenant plus de quatre atomes de carbone sont pris en compte dans l'étude. En outre, étant donné le développement de combustions à basse température, par exemple HCCI et LTC, seuls les modèles qui ont été conçus pour reproduire les phénomènes à la température initiale relativement basse, en dessous de 900-1000K, sont analysés dans l'étude. Le Tableau 2 ci-dessous montre la comparaison des mécanismes à basse et à haute température, pour quelques alcanes. Les mécanismes les plus détaillés pour tous les types d'hydrocarbures sont disponibles dans les revues de Battin-Leclerc et Simmie. Mais en général, les mécanismes pour les combustions à basse température sont plus complexes par rapport aux mécanismes pour les conditions à haute température, car ils comportent plus d'espèces et de réactions.

Type of alkane	Low temperature		High temperature	
	Number of species ^a	Number of reactions ^a	Number of species ^a	Number of reactions ^a
<i>n</i> -Butane	128	731	80	585
<i>n</i> -Pentane	196	989	97	674
<i>iso</i> -Pentane	210	1039	104	716
<i>neo</i> -Pentane	148	789	98	666
2-Methyl-pentane	325	1643	127	841
<i>n</i> -Heptane	360	1817	114	783
<i>iso</i> -Octane	351	1684	156	958
<i>n</i> -Decane	530	3834	145	966

Tableau 2 : Comparaison des mécanismes pour les basses et hautes températures [161]

Cependant, pour de nombreuses combustions ou pour de nombreux systèmes qui se présentent sous la forme de plasma, les mécanismes détaillés ne sont pas connus. Même dans le cas contraire, identifier et rassembler les données de sources variées et parfois contradictoires, extrapoler à des conditions différentes, etc., reste difficile. Donc, dans tous les mécanismes détaillés, les paramètres cinétiques (A , n , E_a) sont issus de travaux antérieurs effectués sur le même système réactionnel, de mesures directes ou indirectes de constantes de vitesse de réactions élémentaires publiées dans la littérature (compilations de Baulch [163][164], NIST (NBS)[165]), de calculs ou d'estimations théoriques. Il reste encore un grand nombre de constantes de vitesse qui n'ont pas été mesurées dans le domaine de température des flammes. Certains schémas cinétiques d'oxydation dans les flammes ainsi qu'un grand nombre de constantes de vitesse sont encore mal connus ou inconnus, par exemple dans le cas des composés organiques volatils. Normalement, la plupart des constantes de vitesse connues dans les mécanismes sont données avec une erreur moyenne comprise entre 10 et 100 % [160]. Lorsque qu'un mécanisme détaillé est utilisé il est également nécessaire d'évaluer les propriétés thermodynamiques des différentes espèces mises en jeu. Ces données se trouvent dans des tables présentées sous différents formats (JANAF [166]; NIST (NBS [165]; SANDIA [167] [168]) ou elles peuvent être calculées à partir de programmes (THERGAS [169], CHEMKIN [167][168][170][171]).

1.5.2.2 Structure de CHEMKIN II [168]

CHEMKIN II est un logiciel très répandu, destiné au calcul de grands systèmes de réactions chimiques. Il est constitué d'une bibliothèque de programmes de calculs cinétiques en phase gazeuse et de divers utilitaires écrits en langage Fortran. Il permet à l'utilisateur, à partir de la formulation de n'importe quel problème de cinétique en phase gazeuse décrit par un système d'équations et par un mécanisme réactionnel, de développer son propre code de calcul en faisant appel aux divers sous-programmes et utilitaires disponibles.

CHEMKIN II est composé de deux blocs de codes Fortran et deux fichiers :

- L'interpréteur (code)
- La librairie de sous-programmes de calculs cinétiques en phase gazeuse (code)
- La base de données thermodynamique (fichier)
- Le fichier lien (fichier)

La structure générale de CHEMKIN II est illustrée sur la Figure 62:

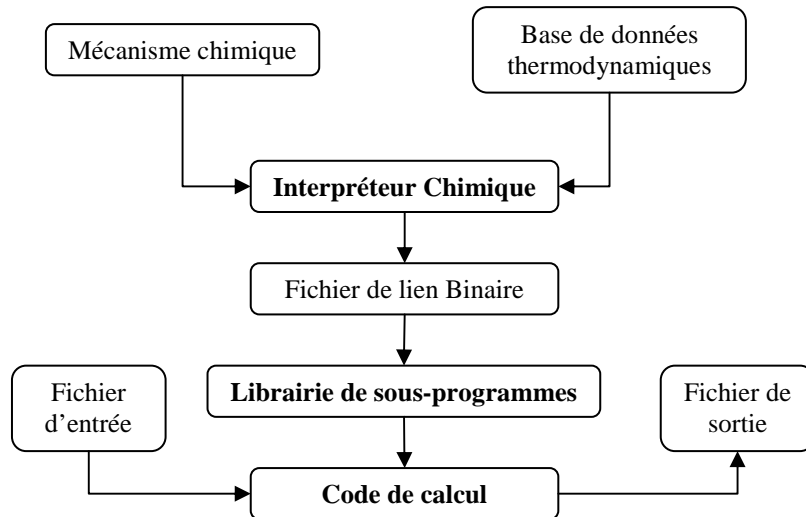


Figure 62 : Structure de CHEMKIN II

L'interpréteur chimique est un programme qui lit une description symbolique d'un mécanisme de réaction chimique, puis extrait les données thermodynamiques nécessaires pour chacune des espèces concernées à partir de la base de données thermodynamiques. La sortie principale de l'interpréteur est un fichier binaire appelé le fichier lien. Ce fichier contient toutes les informations nécessaires sur les éléments, les espèces, et les réactions dans le mécanisme de l'utilisateur. Il est utilisé par les autres modules pour la suite des calculs.

La bibliographie sur la combustion Diesel est divisée en deux parties distinctes : la caractérisation et la modélisation.

Les caractéristiques essentielles de la combustion Diesel classique sont tout d'abord rappelées, avec les différentes phases : délai d'inflammation, combustion de pré mélange, et combustion diffusive. Les principaux facteurs susceptibles d'influencer les différentes phases sont recensés. La complexité de la combustion Diesel apparaît liée à la complexité propre de chaque processus élémentaire (injection, atomisation, évaporation, développement du spray, mélange turbulent, cinétique chimique,...), mais aussi aux nombreux couplages existant entre ces processus.

Une attention particulière est ensuite portée au modèle conceptuel développé par Dec à partir d'études expérimentales locales impliquant plusieurs techniques de visualisation. Il fournit ainsi une description détaillée d'une séquence typique de combustion Diesel « classique », jusqu'à la fin de l'injection.

Cependant, sous la pression des normes anti-pollution, ces dernières années ont vu l'émergence de plusieurs combustions alternatives à allumage par compression, plus ou moins étroitement dérivées de la combustion Diesel classique. Les principales voies proposées (combustion partiellement ou totalement pré mélangée, combustion froide,...) sont présentées et analysées, dans le but de pouvoir ensuite les modéliser.

Dans un deuxième temps, un point bibliographique est fait sur les modélisations phénoménologiques de la combustion Diesel. Les modèles les plus simples, avec une approche monozone, permettent de calculer le dégagement de chaleur avec une précision suffisante pour l'évaluation des performances du moteur, mais ils requièrent le recalage numérique de plusieurs paramètres et la description est trop succincte pour évaluer les émissions. Il existe ensuite plusieurs voies, plus ou moins complexes pour décrire les hétérogénéités de richesse et température caractéristiques de la combustion Diesel. Les approches de type « quelques zones » consistent en un découpage « qualitatif » de la chambre de combustion pour retrouver les zones caractéristiques (spray, gaz environnants, flamme de pré mélange, flamme de diffusion,...) telles que décrites par exemple par Dec. Les approches multizones sont elles basées sur un découpage « systématique » du spray, avec une approche soit lagrangienne soit eulérienne. Certains modèles reposent sur une approche « hybride » ou bien encore sur l'utilisation de fonctions de densité de probabilité (PDF) pour décrire les hétérogénéités.

Quelque soit le type de modélisation envisagée, la description du spray est primordiale. C'est pourquoi plusieurs sous-modèles de spray sont ensuite analysés en détail. Cette partie inclut les développements récents sur les sprays transitoires et leur comportement après la fin de l'injection. La cinétique chimique peut aussi jouer un rôle clef dans certains types de combustion fortement pré mélangées ou à basse température. Aussi, les différents niveaux de modélisation possibles de la cinétique chimique sont également présentés à la fin de ce chapitre.

Chapitre 2 : Développement d'un modèle phénoménologique multizones de combustion 1D

Dans ce chapitre, on présente le développement d'un modèle de combustion Diesel 1D. Les objectifs généraux du modèle sont :

- *De proposer une description fine de la combustion, en s'inspirant notamment du modèle d'évolution du spray transitoire de Musculus et al. décrit au chapitre précédent, et en utilisant des mécanismes de chimie détaillée*
- *De minimiser le nombre de paramètres de recalage de manière à disposer d'un modèle prédictif,*
- *De couvrir une large gamme de combustions allant de modes très pré mélangés (ex : pcci) au cas diffusif*

Ce chapitre se décompose comme suit :

Dans une première partie, on décrit tout d'abord un modèle de jet 1D inerte basé sur le modèle de Musculus. On propose quelques compléments par rapport au modèle originel, en ce qui concerne notamment le remplissage des zones pendant l'injection de carburant.

Dans une deuxième partie, on décrit le calcul explicite de l'entraînement des gaz ambiants par le jet de carburant.

Le modèle est ensuite complété par un bilan d'énergie et un bilan des espèces chimiques. Un sous-modèle d'évaporation du carburant est également introduit.

Finalement, dans une dernière partie, on introduit une nouvelle équation pour tenir compte de la dilation du jet en modifiant la section du spray, et on inclut un modèle de pertes thermiques aux parois de la chambre de combustion. Enfin, on propose différentes approches pour le calcul du taux de combustion à proprement parler :

- *Un modèle à chimie détaillé (CD) utilisant l'outil CHEMKIN,*
- *Un modèle à chimie simplifiée à 1 réaction (CS),*
- *Un modèle à chimie simplifiée et limite de richesse (CS_LR)*
- *Un modèle sans chimie à délai d'inflammation fixé (SC)*
- *Un modèle sans chimie avec « micro-mélange » (SC_MM)*

2.1 Modèle de jet 1D inerte basé sur le modèle de Musculus

2.1.1 Description du modèle

Le modèle de spray développé par Musculus et al. sert de base au développement d'un modèle de combustion Diesel 1D. Les différentes équations du modèle de Musculus sont données ci-après.¹

Musculus écrit les équations de transport transitoire pour la masse de carburant et la quantité de mouvement dans chaque volume de contrôle (zone) comme données ci-dessous :

$$\frac{\partial m_f}{\partial t} = \dot{m}_{f,in} - \dot{m}_{f,out} \quad \text{Éq. 112}$$

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \dot{M}_{in} - \dot{M}_{out} \quad \text{Éq. 113}$$

Où les flux sont donnés par :

$$\dot{m}_f = \rho_f \int \bar{X}_f \bar{u} dA \quad \text{Éq. 114}$$

$$\dot{M} = \int \bar{\rho} (\bar{u})^2 dA \quad \text{Éq. 115}$$

Où \bar{u} , $\bar{\rho}$ et \bar{X}_f sont la vitesse moyenne, la densité moyenne et la fraction volumique moyenne de carburant respectivement.

Tout comme Pastor et al. [23], Musculus utilise le profil du spray radial proposé par Abramovich [172] :

$$\frac{\bar{X}_f}{\bar{X}_{f,c}} = (1 - \xi^\alpha)^2 \quad \text{Éq. 116}$$

$$\frac{\bar{u}}{\bar{u}_c} = (1 - \xi^\alpha)^2 \quad \text{Éq. 117}$$

Où l'indice c représente les valeurs sur l'axe central et ξ le ratio de la coordonnée r sur la largeur du spray r_m . L'exposant α est un paramètre ajustable qui permet au profil d'évoluer à partir d'un profil uniforme « top-hat » à l'injecteur vers une forme entièrement développée à une certaine distance en aval, comme illustrés sur la Figure 63 :

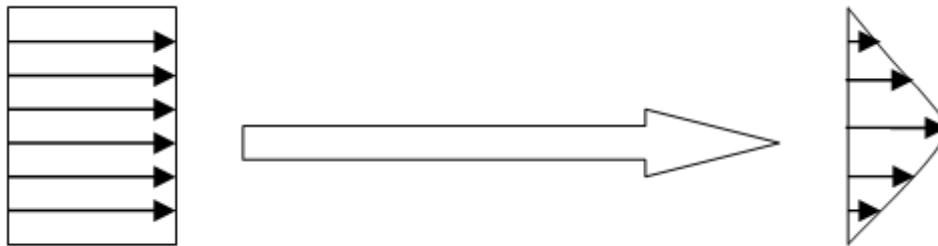


Figure 63 : évolution du profil de spray (gauche : « top-hat », droite : complètement développé (Gaussien))

Le processus du calcul de α est décrit par Musculus. Les équations pour les calculs de α et β sont :

$$6 \left(\frac{A}{A_0} - 1 \right) \alpha^4 - \left(7 + 18 \frac{\rho_f}{\rho_a} \right) \alpha^3 - \left(2 + 33 \frac{\rho_f}{\rho_a} \right) \alpha^2 - 20 \frac{\rho_f}{\rho_a} \alpha - 4 \frac{\rho_f}{\rho_a} = 0 \quad \text{Éq. 118}$$

¹ En cours de thèse, le code de Musculus a été rendu disponible en ligne (programme Matlab). Le modèle de Musculus avait auparavant été codé en Fortran, afin d'être compatible avec CHEMKIN, d'après les indications fournies dans l'article.

$$\beta = \frac{6(\alpha+1)(\alpha+2)}{(3\alpha+2)(2\alpha+1)} \quad \text{Éq. 119}$$

Chaque zone i est un cylindre de section A_i constante. Pour pouvoir utiliser un nombre faible de zones (10 par exemple), il est particulièrement important que le volume du cylindre soit équivalent au tronçon de jet i (un cône tronçonné). On calcul donc le volume de la zone i par :

$$V_{\text{cylindre}} = A\Delta z = \frac{\pi}{3} \Delta z (r_{i-1}^2 + r_{i-1} \cdot r_i + r_i^2) = V_{\text{spray}} \quad \text{Éq. 120}$$

La section pour la zone i se calcule par :

$$A_i = \frac{\pi}{3} (r_{i-1}^2 + r_{i-1} \cdot r_i + r_i^2) \quad \text{Éq. 121}$$

La Figure 64 montre le schéma du spray :

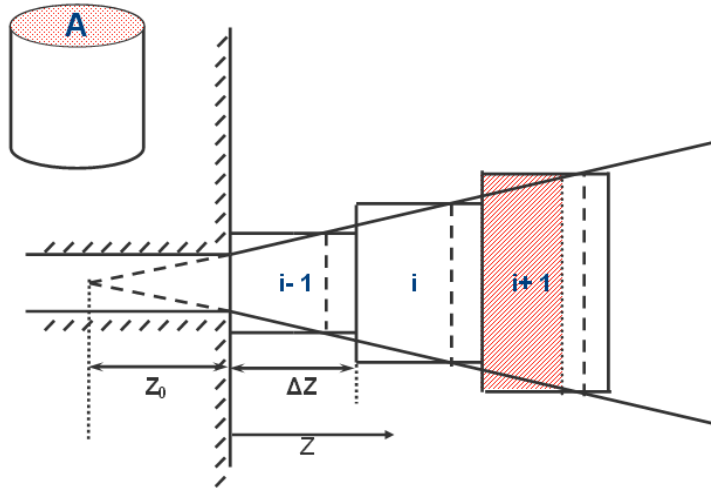


Figure 64 : schéma du spray avec une section « Equivalente au trapèze »

Dans le code de Musculus originel il n'y a pas de test pour le remplissage des zones : les zones contiennent initialement des gaz ambiants, et au i ème pas de temps la i ème zone commence à contenir du carburant, ce qui n'est pas conforme à la réalité. Pour traiter ce problème, la pénétration du spray est définie grâce à une valeur seuil de teneur en carburant au dessus de laquelle le spray est considéré avoir atteint la zone. Dans le modèle développé ici, on définit une nouvelle manière de remplir les zones :

- Avant l'injection, les zones n'existent pas (pas de masse dans les zones),
- La zone $i+1$ n'est créée que lorsque la zone i est complètement pleine.

Les flux sont donc donnés par :

Si la zone n'est pas encore pleine ($Z' < \Delta Z$) :

$$m_{f,i}^{t+1} = m_{f,i}^t + \rho_f \left[\left(\overline{\beta X_f u A} \right)_{i-1}^t \right] \Delta t \quad \text{Éq. 122}$$

$$M_i^{t+1} = M_i^t + \left[\left(\overline{\rho \beta (\overline{u})^2 A} \right)_{i-1}^t \right] \Delta t \quad \text{Éq. 123}$$

$$Z_i^{t+1} = Z_i^t + \overline{\beta \overline{u}} \Delta t \quad \text{Éq. 124}$$

Si la zone est pleine ($Z' \geq \Delta Z$) :

$$m_{f,i}^{t+1} = m_{f,i}^t + \rho_f \left[\left(\beta \bar{X}_f \bar{u} A \right)_{i-1}^t - \left(\beta \bar{X}_f \bar{u} A \right)_i^t \right] \Delta t \quad \text{Éq. 125}$$

$$M_i^{t+1} = M_i^t + \left[\left(\bar{\rho} \beta (\bar{u})^2 A \right)_{i-1}^t - \left(\bar{\rho} \beta (\bar{u})^2 A \right)_i^t \right] \Delta t \quad \text{Éq. 126}$$

$$Z_i^{t+1} = \Delta Z \quad \text{Éq. 127}$$

On calcule alors la concentration de carburant de la zone i, la vitesse moyenne, et la richesse par :

$$\bar{X}_f = \frac{m_f / \rho_f}{Az'} \quad \text{Éq. 128}$$

$$\bar{u} = \frac{M}{\rho Az'} \quad \text{Éq. 129}$$

$$\bar{\phi} = \frac{\bar{X}_f \rho_f}{(1 - \bar{X}_f) \rho_a} (m_a / m_f)_{Stoich} \quad \text{Éq. 130}$$

On compare ci-après le modèle originel de Musculus avec le nouveau modèle développé ici.

Les conditions de simulation sont les suivantes :

Température ambiante	900 K	Diamètre de l'injecteur	0.2 mm
Fraction O₂	12.7 %	Ca	0.83
Cd	0.58	Angle du spray	17 °
Pression d'injection	1200 bar	Taille de zone ΔZ	0.1 mm
Densité de carburant	670 kg/m ³	Durée d'injection	0.5 ms (taux d'introduction carré)

Tableau 3 : Conditions de simulation pour la comparaison avec Modèle de Musculus

Les comparaisons de la vitesse axiale moyenne et de la richesse moyenne dans le nouveau modèle de spray (nommé Modèle 1D_MRET) avec les résultats de modèle de Musculus (code Matlab disponible en ligne à l'adresse <http://www.sandia.gov/ecn/code.php>) sont représentées sur la Figure 65.

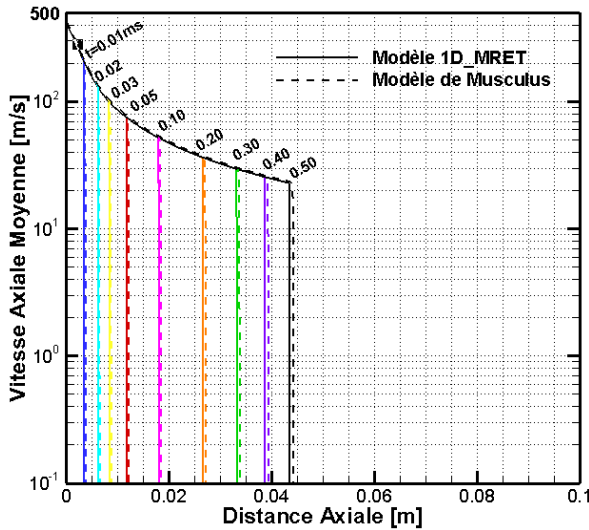


Figure 65a : Prédiction de la Vitesse axiale moyenne avant EOI

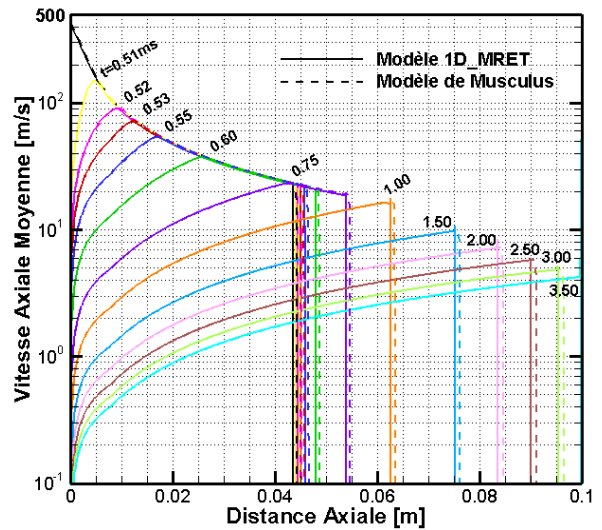


Figure 65b : Prédiction de la Vitesse axiale moyenne après EOI

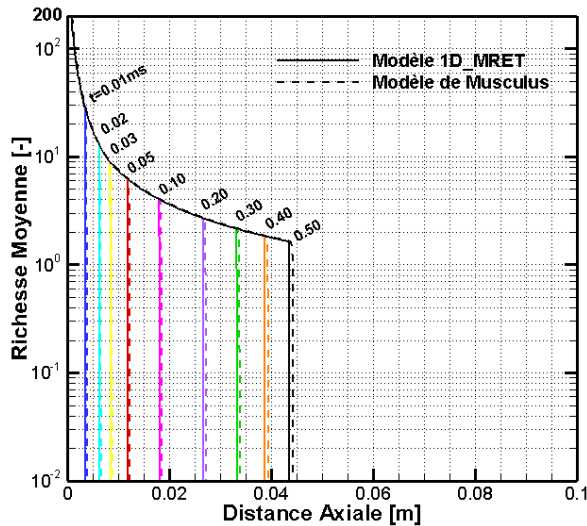


Figure 65c : Prédiction de la richesse moyenne avant EOI

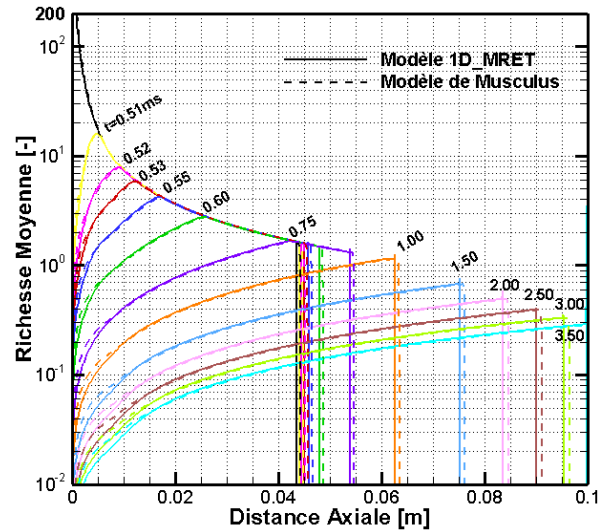


Figure 65d : Prédiction de la richesse moyenne après EOI

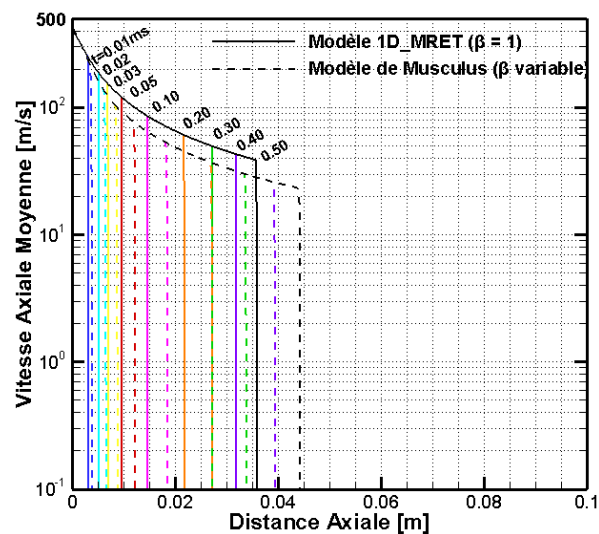
On constate que le modèle modifié donne des résultats similaires du point de vue qualitatif, et extrêmement proches du point de vue quantitatif. La vitesse - et donc également la pénétration - sont très légèrement plus faibles avec le nouveau modèle. Ceci vient de la gestion légèrement différente du début du remplissage de chaque zone. Ce modèle de jet est retenu pour la suite.

2.1.2 Première analyse de sensibilité aux paramètres du modèle

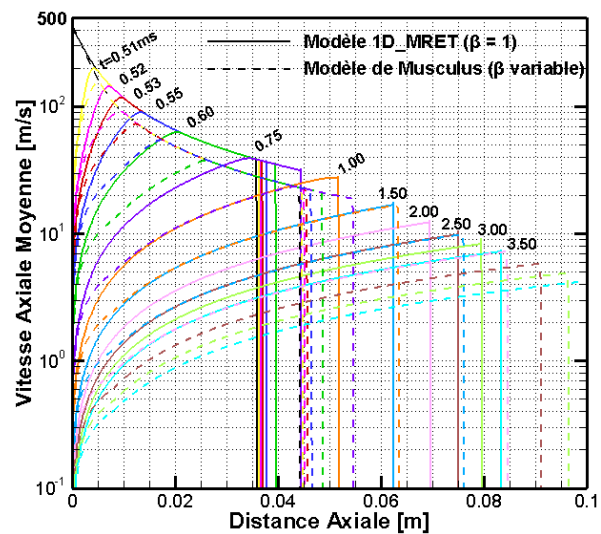
2.1.2.1 Impact du profil de spray (paramètres α et β)

Selon la définition des paramètres α et β , β varie entre $\beta=1$ pour un profil uniforme ($\alpha=\infty$) à approximativement $\beta=2$ ($\alpha=1.5$) pour un spray complètement développé.

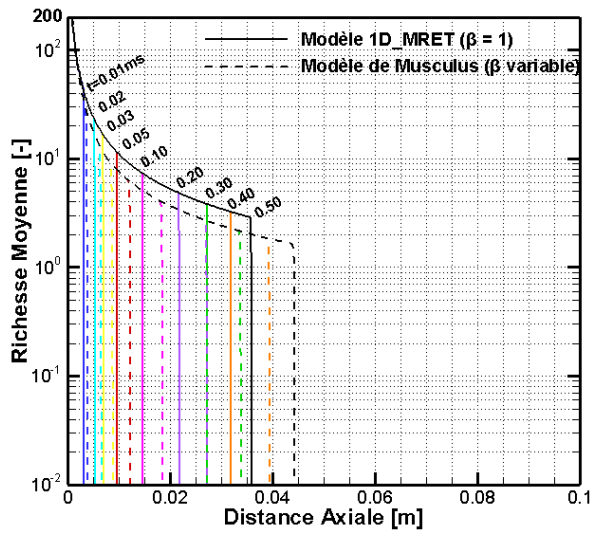
Les mêmes paramètres que précédemment (vitesse axiale moyenne et richesse pendant et après la fin de l'injection) sont calculés en prenant 2 valeurs fixes de β : $\beta=1$ et $\beta=2$ (Figure 66 et Figure 67 respectivement).



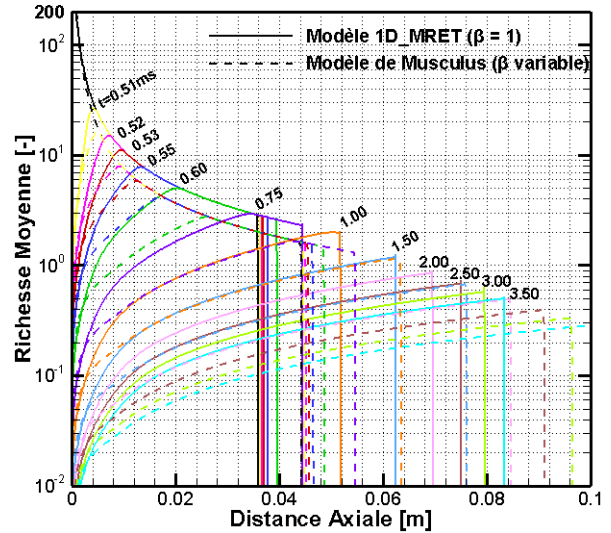
a : Prédiction de la Vitesse axiale moyenne avant EOI



b : Prédiction de la Vitesse axiale moyenne après EOI

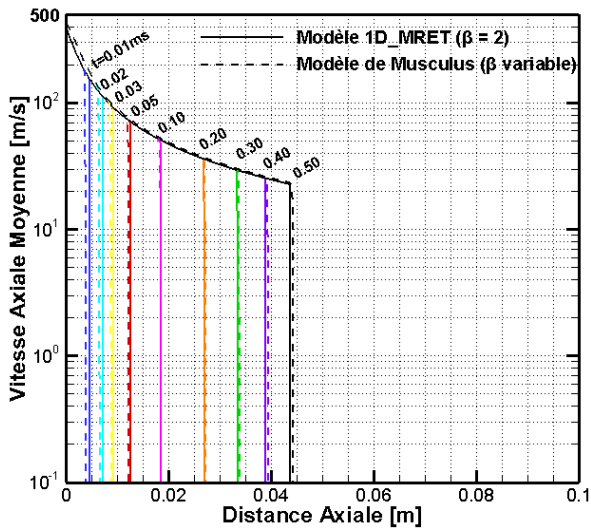


c : Prédiction de la richesse moyenne avant EOI

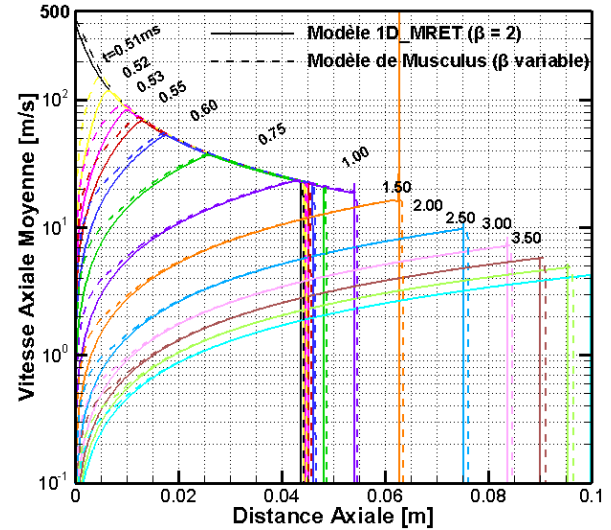


d : Prédiction de la richesse moyenne après EOI

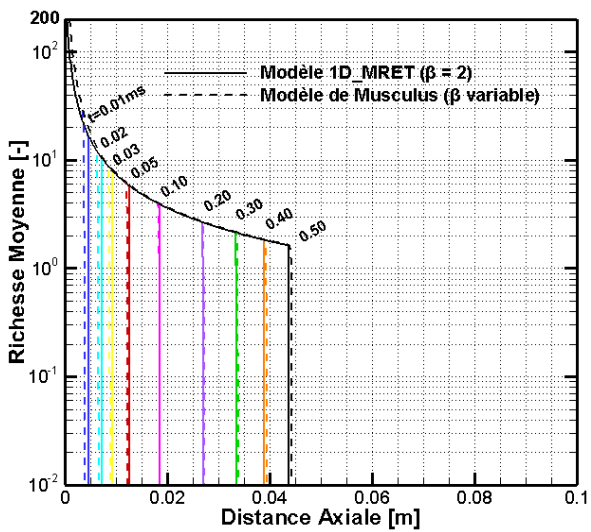
Figure 66 : Comparaison entre le modèle 1D MRET ($\beta=1$) et Modèle de Musculus



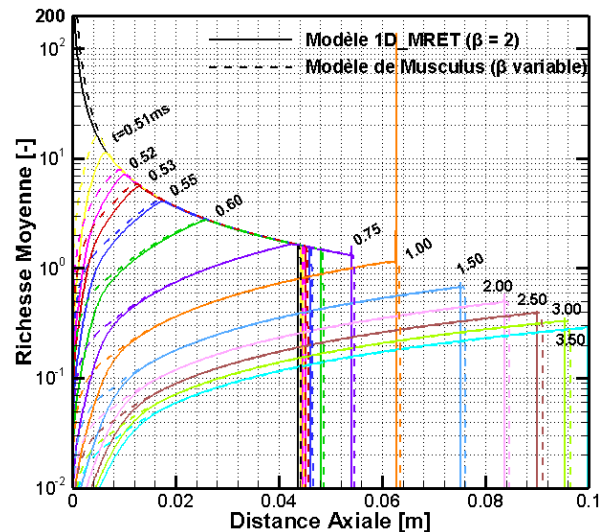
a : Prédiction de la Vitesse axiale moyenne avant EOI



b : Prédiction de la Vitesse axiale moyenne après EOI



c : Prédiction de la richesse moyenne avant EOI



d : Prédiction de la richesse moyenne après EOI

Figure 67 : Comparaison entre le modèle 1D MRET ($\beta=2$) et Modèle de Musculus

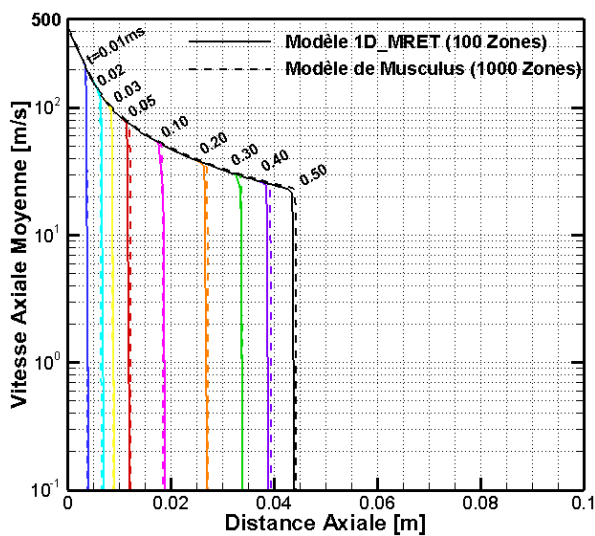
Comme représenté sur la Figure 66, la pénétration calculée avec le modèle 1D_MRET et une valeur fixe $\beta=1$ est plus lente que le modèle de Musculus. Ceci vient directement de l'équation qui gouverne la pénétration des zones. Au début de la simulation, où le spray est sous la période de développement ($Z < 8.5\text{mm}$), la différence entre la simulation et le modèle de Musculus est faible. En revanche, dès que le spray est pleinement développé ($Z > 8.5\text{mm}$), la différence s'accroît.

Lorsque la valeur de β est fixée à 2 pour toutes les zones avec le modèle 1D_MRET, le spray pénètre plus vite que pour le modèle de Musculus pour $Z < 8.5\text{mm}$. Par la suite, il y a équivalence entre le modèle 1D_MRET et le modèle de Musculus.

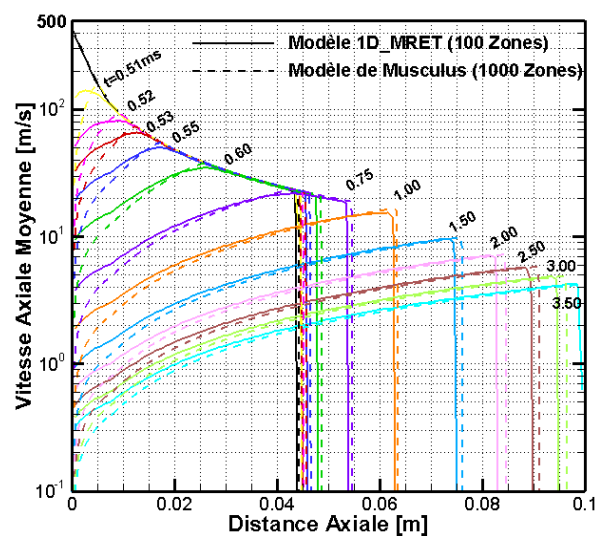
Cette étude de sensibilité montre très clairement l'impact des valeurs de α et β sur la pénétration du spray, et donc souligne l'importance de bien calculer les valeurs dans chacune des zones, notamment pendant la période de développement du spray.

2.1.2.2 Impact du nombre de zones

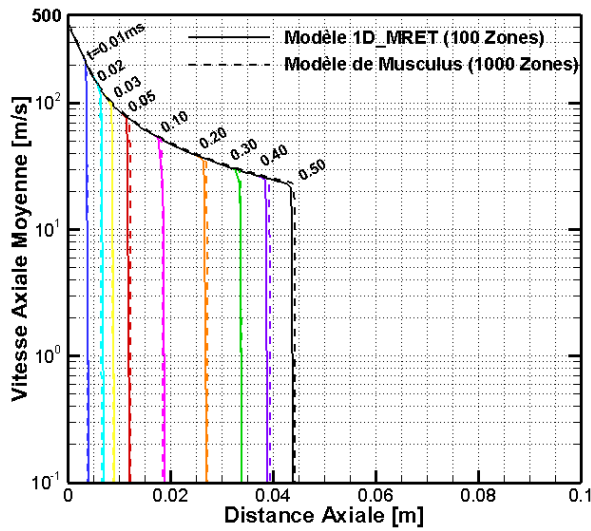
Par la suite, on sera amené à utiliser un nombre restreint de zones. On étudie donc dans ce paragraphe l'impact du nombre de zones. On donne ci-après le développement du jet (vitesse moyenne et richesse moyenne) pour un nombre de zones de 100 (taille de chaque zone : 1mm) et 10 (taille de la zone : 0.1mm). Les résultats sont comparés avec ceux du modèle de Musculus (1000 zones) : cf. Figure 68 et Figure 69 respectivement.



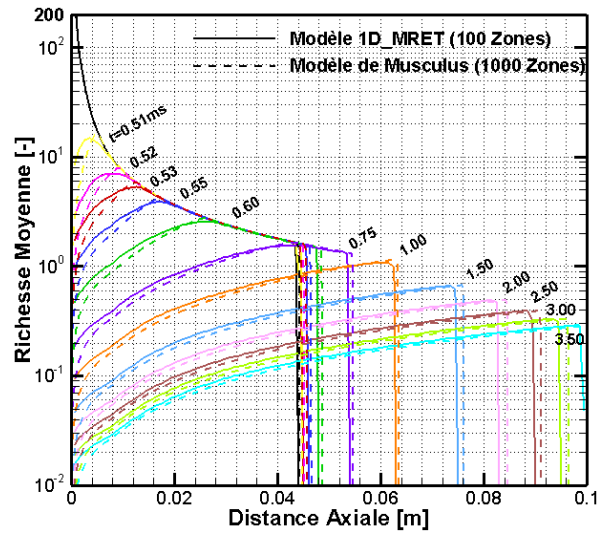
a : Prédiction de la Vitesse axiale moyenne avant EOI



b : Prédiction de la Vitesse axiale moyenne après EOI

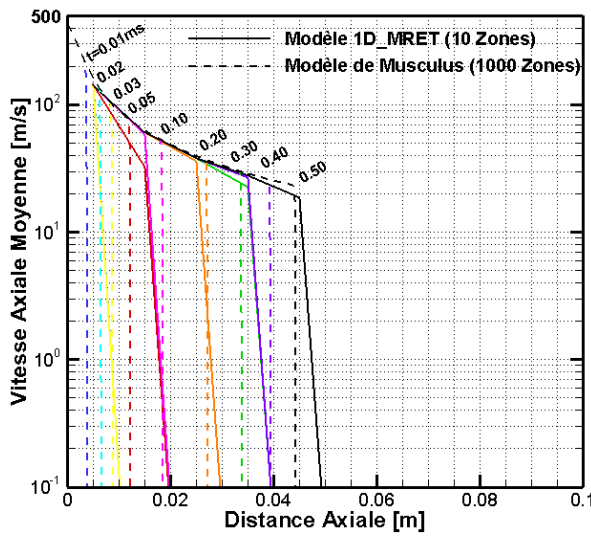


c : Prédiction de la richesse moyenne avant EOI

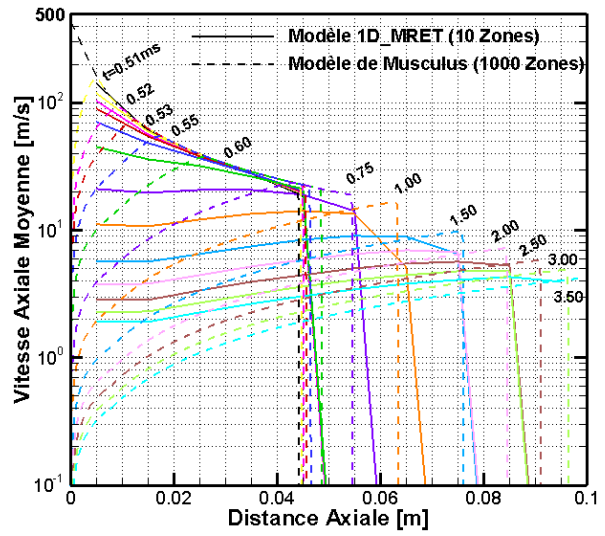


d : Prédiction de la richesse moyenne après EOI

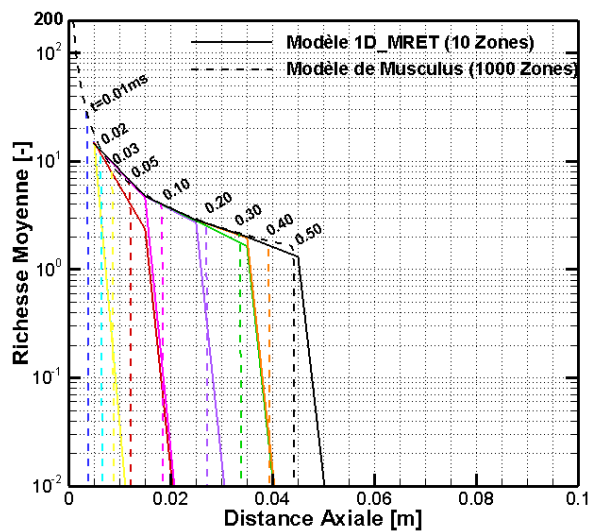
Figure 68: Comparaison entre le code 1D MRET (100 zones) et le Modèle de Musculus



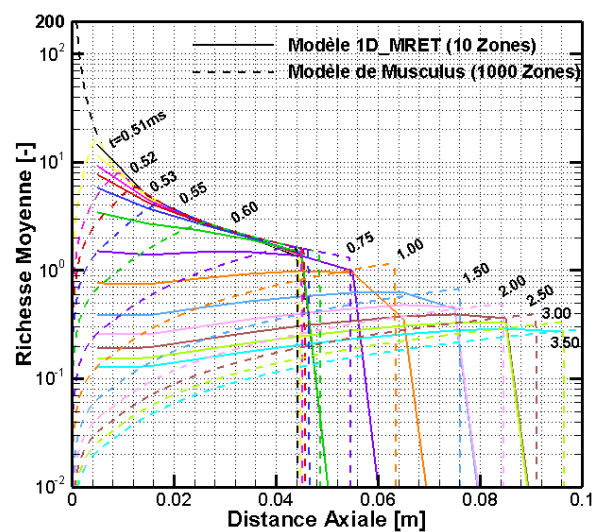
a : Prédiction de la Vitesse axiale moyenne avant EOI



b : Prédiction de la Vitesse axiale moyenne après EOI



c : Prédiction de la richesse moyenne avant EOI



d : Prédiction de la richesse moyenne après EOI

Figure 69 : Comparaison entre le code 1D MRET (10 zones) et le Modèle de Musculus

On constate que pour un nombre de zones de 100, les écarts avec le modèle de Musculus (1000 zones) sont faibles, que ce soit avant ou après la fin de l'injection.

Pour un nombre réduit de zones (10), les écarts restent raisonnables pendant l'injection, que ce soit pour la vitesse ou la richesse. En revanche, des écarts importants sont obtenus près du nez de l'injecteur après la fin de l'injection. Ceci vient du fait que la « vague d'entraînement d'air » observée juste après la fin de l'injection entraîne un gradient élevé du champ de vitesses et de richesses. La discrétisation en 10 zones ne permet donc pas de capturer la décroissance rapide de la vitesse et de la richesse très près du nez de l'injecteur.

On donne sur la Figure 70 la pénétration du spray et l'évolution de la section des zones pour 10, 100, et 1000 zones.

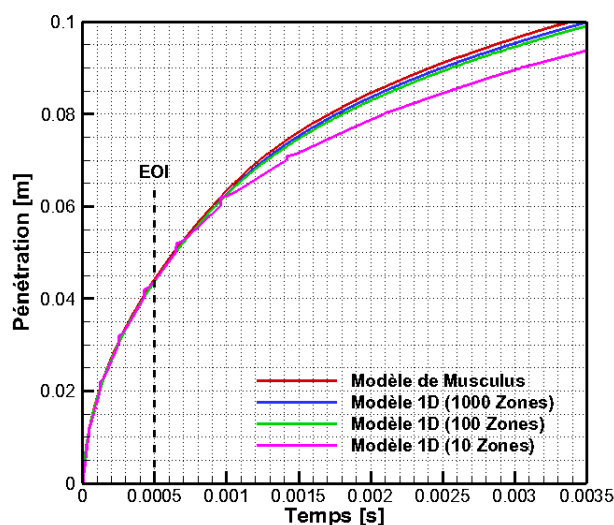


Figure 70: Influence du nombre de zones sur la pénétration du spray

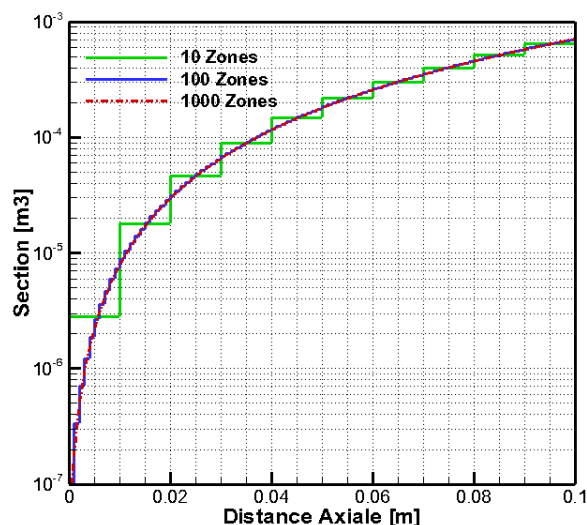


Figure 71 : Comparaison des sections pour différents nombres de zones

Là-encore on constate qu'avant la fin de l'injection, la discrétisation du jet en un nombre réduit de zones affecte peu le résultat. En revanche, un écart plus important est observé après la fin de l'injection.

Cependant, dans le modèle de Musculus original les changements de température et de pression dans les volumes de contrôle (zones) ne sont pas considérés. Ensuite, même si Musculus évalue l'« onde d'entraînement » et calcule le transfert de masse de carburant, la composition dans les zones et la masse entraînée dans les zones ne sont pas explicitement calculés. Dans les trois parties suivantes, plusieurs versions de modèles de jet 1D sont décrites et analysées pour montrer les évolutions successives qui ont conduit au modèle de jet 1D brûlant.

2.2 Modèle de jet 1D inerte avec calcul explicite de l'entraînement des gaz ambiants

Le modèle de Musculus et al. propose une approche novatrice pour ce qui est des modèles de spray 1D, car un calcul transitoire permet de mieux appréhender le développement du spray, notamment après le fin de l'injection. Il permet en particulier de décrire « l'onde d'entraînement de l'air » observée expérimentalement après la fin de l'injection. Celle-ci se traduit par une décroissance rapide de la richesse près du nez de l'injecteur, et cette décroissance se « propage » vers l'aval du spray. Pour autant, dans leur publication, Musculus et al. ne proposent pas de calcul explicite de l'entraînement des gaz ambiants par le spray. On se propose dans cette partie de compléter le modèle en calculant explicitement les différents débits de gaz aux frontières des différents volumes de contrôle, notamment entre les gaz ambiants et le spray.

2.2.1 Subdivision de la masse

Le transport transitoire pour la masse totale dans chaque volume de contrôle (zone) est donné par :

$$\frac{\partial m_{trsf}}{\partial t} = \dot{m}_{trsf,in} - \dot{m}_{trsf,out} \quad \text{Éq. 131}$$

Où le flux se calcule par :

$$\dot{m}_{trsf} = \int \bar{\rho} \cdot \bar{u} dA \quad \text{Éq. 132}$$

Ce qui donne :

$$dm_{i,trsf} = (\bar{\rho}\bar{\beta}\bar{u}A)_{in} - (\bar{\rho}\bar{\beta}\bar{u}A)_{out} \quad \text{Éq. 133}$$

Le carburant injecté dans la première zone est transférée aux zones en aval du spray. De manière similaire à Musculus et al., on écrit donc :

$$dm_{f,i} = (\bar{\rho}\bar{Y}_f\bar{\beta}\bar{u}A)_{in} - (\bar{\rho}\bar{Y}_f\bar{\beta}\bar{u}A)_{out} \quad \text{Éq. 134}$$

Les indices *in* et *out* représentent les flux qui entrent dans la zone *i* et qui sortent de la zone *i* respectivement. Le flux de sortie est non nul lorsque le test de remplissage de zone est satisfait.

Par ailleurs, on fait une nouvelle hypothèse en assimilant les éléments en phase gazeuse à des gaz parfaits. On applique ainsi la loi des gaz parfaits :

$$PV = m \frac{R}{W} T \quad \text{Éq. 135}$$

La masse en phase gazeuse se calcule donc par :

$$P_g V_g W_g = m_g RT_g \quad \text{Éq. 136}$$

La dérivée de masse en phase gazeuse dans la zone *i* peut être écrite :

$$dm_{g,i} = m_{g,i} \left(\frac{dP_{g,i}}{P_{g,i}} + \frac{dV_{g,i}}{V_{g,i}} + \frac{dW_{g,i}}{W_{g,i}} - \frac{dT_{g,i}}{T_{g,i}} \right) \quad \text{Éq. 137}$$

Où *P*, *V*, *W*, *T* représentent la pression, le volume, la masse molaire et la température, respectivement. L'indice *g* représente la phase gazeuse.

La dérivée de masse totale peut être donnée par la somme des dérivées des masses de carburant et des autres gaz :

$$dm_i = dm_{f,i} + dm_{g,i} \quad \text{Éq. 138}$$

Concernant les flux aux frontières, on distingue la masse transférée (d'une zone *i* vers la zone *i+1*) de la masse entraînée (depuis les gaz ambiants vers la zone *i*) :

$$dm_i = dm_{i,trsf} + dm_{i,entr} \quad \text{Éq. 139}$$

$$dm_{i,entr} = dm_i - dm_{i,trsf} = dm_{f,i} + dm_{g,i} - dm_{i,trsf} \quad \text{Éq. 140}$$

La Figure 72 montre le schéma de la variation de masse.

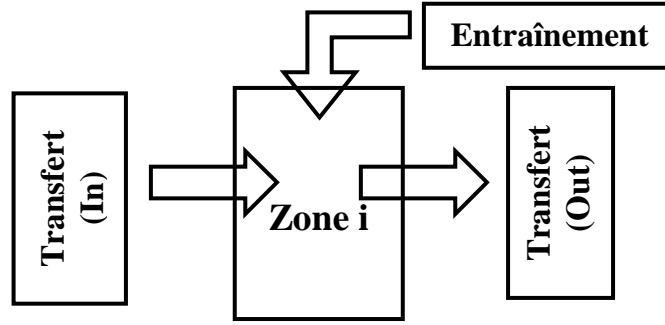


Figure 72 : Schéma de la variation de masse pour la zone i

2.2.2 Validation du modèle (carburant en phase liquide)

De même que dans le modèle de Musculus, on considère que la pression et la température ne changent pas, c'est-à-dire $dP=0$, $dT=0$. Donc la loi gaz parfait se simplifie en :

$$dm_{g,i} = m_{g,i} \left(\frac{dV_{g,i}}{V_{g,i}} \right) = \rho_{g,i} dV_{g,i} = \rho_{g,i} (dV_i - dV_{f,i}) = \rho_{g,i} \left(dV_i - d \left(\frac{m_{f,i}}{\rho_f} \right) \right) \quad \text{Éq. 141}$$

De même, dans un premier temps, on assume que le carburant reste en phase liquide, sa densité est donc aussi constante, ce qui permet d'écrire :

$$dm_{g,i} = \rho_{g,i} \left(dV_i - d \left(\frac{m_{f,i}}{\rho_f} \right) \right) = \rho_{g,i} dV_i - \frac{\rho_{g,i}}{\rho_f} dm_{f,i} \quad \text{Éq. 142}$$

Où la densité moyenne du gaz dans la zone i est la densité de l'air.

Sur la base du modèle 1D_MRET, une version intermédiaire du modèle est codée, dénommé 1D_MRET_SM.

On représente ci-après une comparaison des résultats entre les modèles 1D_MRET_SM et 1D_MRET, en reprenant les conditions du Tableau 3, et en fixant un nombre de zone égal à 10 (longueur des zones de 1cm).

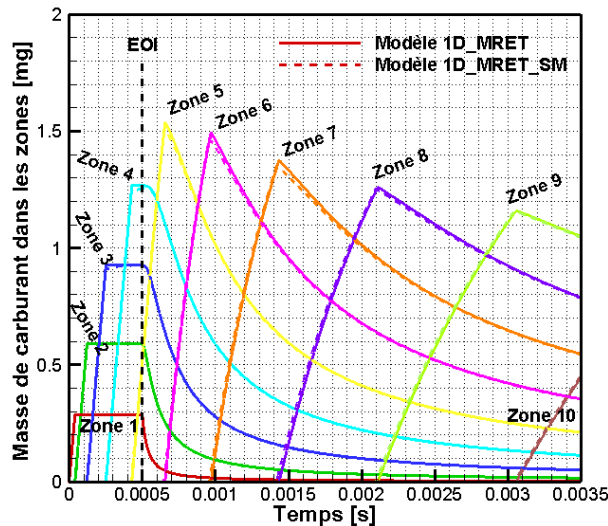


Figure 73 : Masse de carburant dans les zones (Comparaison des modèles 1D_MRET et 1D_MRET_SM)

La Figure 73 montre que les deux modèles donnent les mêmes résultats. Le détail des masses entraînées et transférées calculées avec le modèle 1D_MRET_SM est donné ci-après :

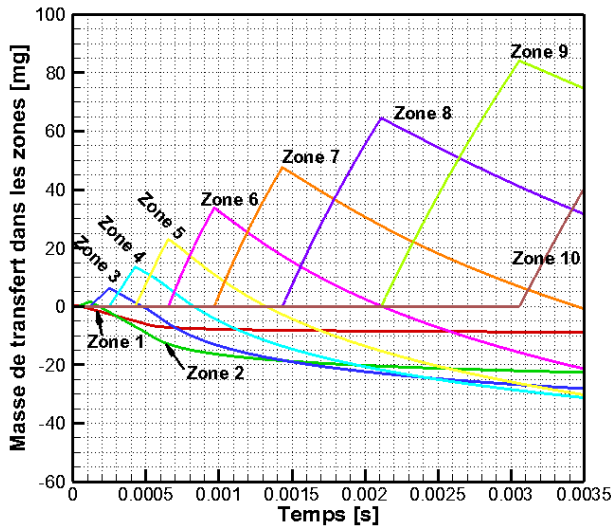


Figure 74 : Masse de transfert dans les zones (1D MRET SM)

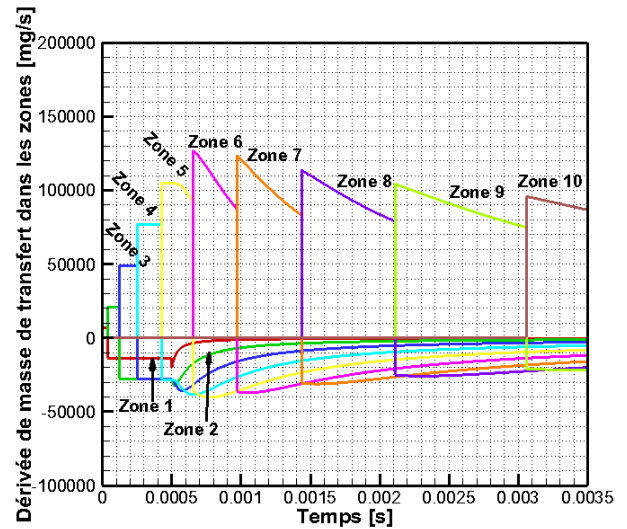


Figure 75 : Dérivée de masse de transfert dans les zones (1D MRET SM)

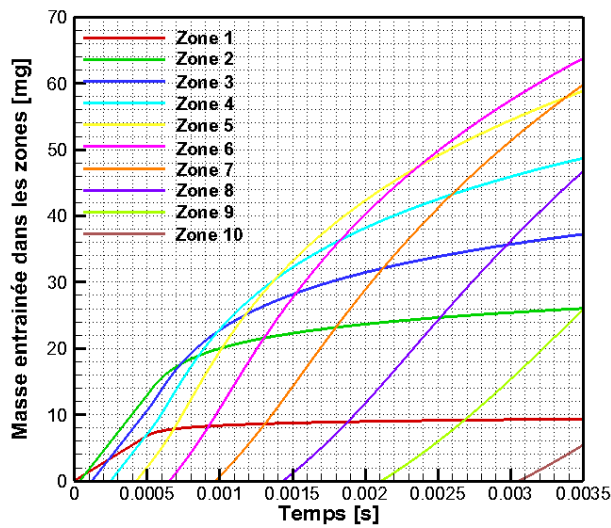


Figure 76 : Masse entraînée dans les zones (1D MRET SM)

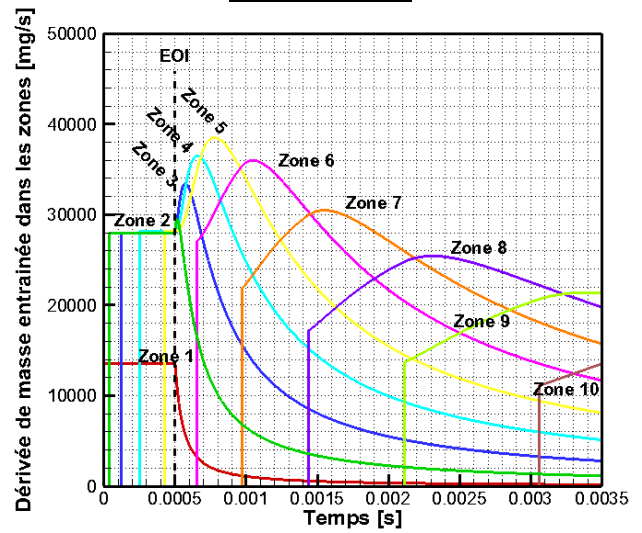


Figure 77 : Dérivée de masse entraînée dans les zones (1D MRET SM)

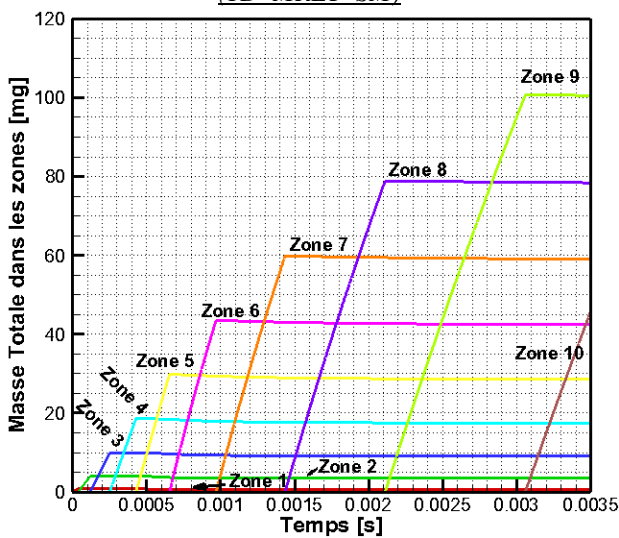


Figure 78 : Masse totale dans les zones (1D MRET SM)

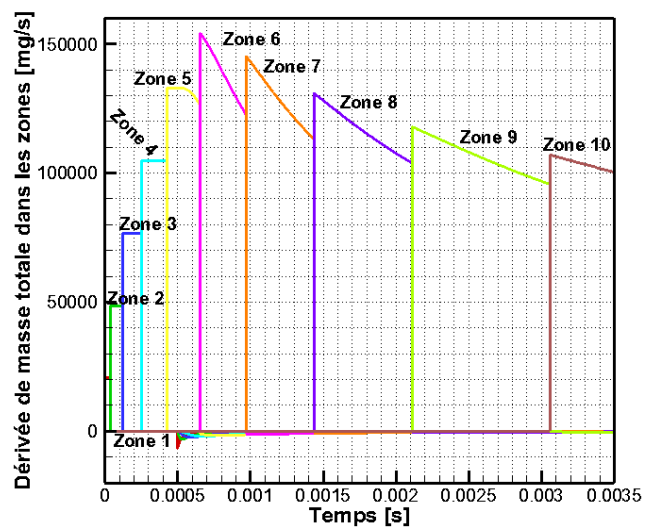


Figure 79 : Dérivée de masse totale dans les zones (1D MRET SM)

Avant la fin de l'injection (EOI), les dérivées de masse totale, de masse entraînée et de masse de transfert sont toutes constantes dans chaque zone. Comme le taux d'introduction est ici constant, le débit de carburant qui entre dans la 1^{ère} zone est constant, donc quand la 1^{ère} zone est pleine la composition dans cette zone est stable. Aussi, les fractions massiques des espèces ne changent pas, ce qui conduit à un débit de sortie stable (terme $\overline{\rho\beta uA}$) à l'interface entre la zone 1 et la zone 2. Il en est de même pour toutes les autres zones.

Au moment de la fin de l'injection, Le débit de carburant entrant dans la zone 1 est nul instantanément. La dérivée de masse de transfert dans les zones prend ainsi directement des valeurs négatives, le terme de sortie étant plus grand que le terme d'entrée. Par conséquent, afin de conserver la quantité de mouvement, les flux de masse entraînée dans les zones augmentent pour compenser la diminution du débit transféré, ce qui conduit un « surentraînement » des gaz ambiants qui se propage aux zones en aval du spray.

L'évolution des fractions massiques des espèces après la fin de l'injection souligne également cette « onde d'entraînement » (Figure 80 et Figure 81). Si on considère les deux espèces carburant et « air », on observe que la fraction massique de carburant chute rapidement dans chaque zone après la fin de l'injection. Cette chute se « propage » de la première zone vers les zones en aval du spray. A l'inverse la fraction massique de l'air augmente rapidement dans chaque zone après la fin de l'injection.

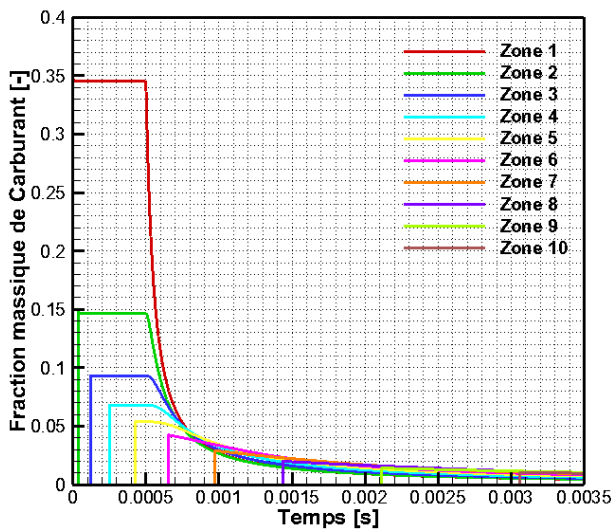


Figure 80 : Fraction massique de carburant dans les zones (carburant en phase liquide)

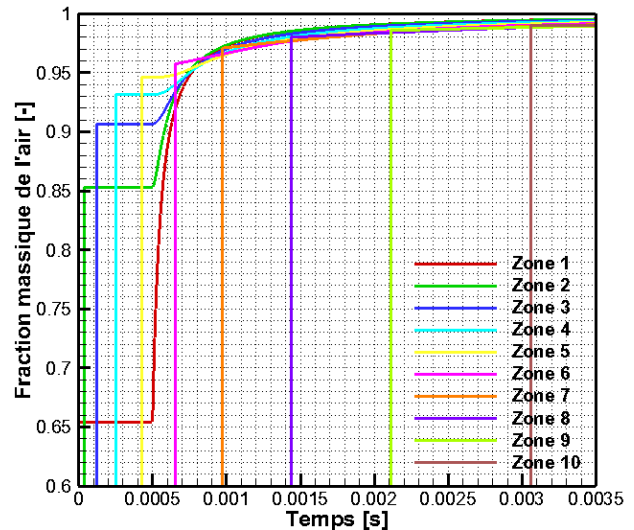


Figure 81 : Fraction massique de l'air dans les zones (carburant en phase liquide)

2.3 Modèle de jet 1D vaporisant avec bilan d'énergie et d'espèces

Dans cette partie, on complète le modèle avec un bilan d'énergie et d'espèces chimiques.

2.3.1 Bilan d'énergie

De manière générale, le premier principe de la thermodynamique appliqué à un volume de contrôle ouvert s'écrit :

$$dU = \delta w + \delta Q_p + \sum h_k dm_k \quad \text{Éq. 143}$$

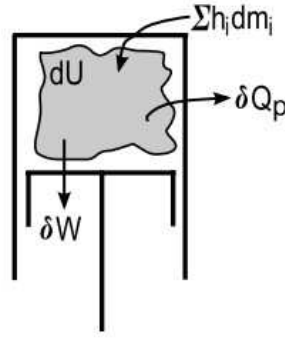


Figure 82 : Bilan d'énergie pour un volume de contrôle ouvert

Le premier terme du membre de droite représente le travail échangé par la zone avec l'environnement extérieur. Le deuxième terme représente l'échange sous forme de chaleur. Le troisième terme représente la variation d'enthalpie du fait des échanges de masse à l'interface du volume de contrôle. h représente ici l'enthalpie spécifique et l'indice k est relatif aux différentes espèces.

Le travail échangé s'exprime sous la forme différentielle suivante :

$$\delta W = PdV \quad \text{Éq. 144}$$

L'énergie interne se calcule par :

$$U = \sum m_k \cdot e_k = m \cdot \sum Y_k \cdot e_k \quad \text{Éq. 145}$$

La variation peut s'écrire :

$$dU = dm \cdot \sum Y_k \cdot e_k + m \cdot \sum dY_k \cdot e_k + m \cdot \sum Y_k \cdot de_k \quad \text{Éq. 146}$$

Comme

$$de_k = c_{v,k} \cdot dT \quad \text{Éq. 147}$$

Cela donne :

$$dU = dm \cdot \sum Y_k \cdot e_k + m \cdot \sum dY_k \cdot e_k + m \cdot \sum Y_k \cdot c_{v,k} \cdot dT \quad \text{Éq. 148}$$

Avec la définition de la capacité calorifique à volume constant $c_v = \sum Y_k \cdot c_{v,k}$ et l'énergie interne par unité de masse $e = \sum Y_k \cdot e_k$, la dérivation de l'énergie interne peut s'écrire de manière simplifiée comme suit :

$$dU = e \cdot dm + m \cdot \sum dY_k \cdot e_k + m \cdot c_v \cdot dT \quad \text{Éq. 149}$$

A ce stade, on considère l'enceinte adiabatique, soit $\delta Q_p = 0$.

Dans chaque zone, comme pour le bilan de masse, l'échange d'énergie peut être écrit ainsi :

$$\sum h_i \cdot m_i = (\sum h_i \cdot m_i)_{trsf} + (\sum h_i \cdot m_i)_{entr} \quad \text{Éq. 150}$$

Combiné au modèle d'entraînement de gaz présenté précédemment, cela donne :

$$\sum h_i \cdot m_i = h_{i-1} \cdot dm_{trsf,in,i} - h_i \cdot dm_{trsf,out,i} + h_{ambiant} \cdot dm_{entr,i} \quad \text{Éq. 151}$$

Ainsi, le premier principe de la thermodynamique est modifié comme indiqué ci-dessous :

$$e_i \cdot dm_i + m_i \cdot \sum dY_{k,i} \cdot e_{k,i} + m_i \cdot c_{v,i} \cdot dT_i = -P_i \cdot dV_i + h_{i-1} \cdot dm_{trsf,in,i} - h_i \cdot dm_{trsf,out,i} + h_{ambiant} \cdot dm_{entr,i} \quad \text{Éq. 152}$$

L'équation différentielle pour l'évolution de la température dans la zone i s'écrit :

$$\frac{dT_i + m_i \cdot \sum dY_{k,i} \cdot e_{k,i} + P \cdot dV_i + dm_i \cdot e_i - (h_{i-1} \cdot dm_{trsf,in,i} - h_i \cdot dm_{trsf,out,i} + h_{ambiant} \cdot dm_{entr,i})}{m_i \cdot c_{v,i}} = 0 \quad \text{Éq. 153}$$

2.3.2 Bilan d'espèces

Pour les changements de composition dans les zones, la loi des mélanges est appliquée pour chaque espèce. A chaque instant, la masse de l'espèce k dans la zone i $m_{k,i}$ est la somme de la masse initiale de cette espèce $m_{k,i,0}$ et de la variation de masse induite par l'ajout de masse dans la zone :

$$m_{k,i} = m_{k,i,0} + \int dm_{k,i} \quad \text{Éq. 154}$$

Donc la fraction massique de l'espèce k peut être calculée en divisant par la masse totale dans la zone m_i :

$$Y_{k,i} = \frac{m_{k,i}}{m_i} = \frac{m_{k,i,0} + \int dm_{k,i}}{m_i} \quad \text{Éq. 155}$$

La dérivée de la fraction massique de l'espèce k s'écrit alors :

$$dY_{k,i} = d\left(\frac{m_{k,i,0} + \int dm_{k,i}}{m_i}\right) = \frac{m_i dm_{k,i} - (m_{k,i,0} + \int dm_{k,i}) dm_i}{m_i^2} = \frac{dm_{k,i}}{m_i} - Y_{k,i} \frac{dm_i}{m_i} \quad \text{Éq. 156}$$

La variation de masse de l'espèce k peut se calculer à partir de la variation de masse, comme illustrée sur la Figure 72 :

$$dm_k = Y_{k,trsf} dm_{i,trsf} + Y_{k,entr} dm_{i,entr} = Y_{k,trsf,in} dm_{i,trsf,in} - Y_{k,trsf,out} dm_{i,trsf,out} + Y_{k,entr} dm_{i,entr} \quad \text{Éq. 157}$$

La fraction massique de l'espèce k dans la zone i ($i \neq 1$) s'écrit :

$$\begin{aligned} dY_{k,i} &= \frac{dm_{k,i}}{m_i} - Y_{k,i} \frac{dm_i}{m_i} \\ &= \frac{1}{m_i} (Y_{k,i-1,trsf,in} dm_{i,trsf,in} - Y_{k,i,trsf,out} dm_{i,trsf,out} + Y_{k,entr} dm_{entr} - Y_{k,i} dm_i) \end{aligned} \quad \text{Éq. 158}$$

Pour la zone 1, La fraction massique de l'espèce k s'écrit :

$$dY_{k,i} = \frac{1}{m_i} (Y_{k,inj} dm_{inj} - Y_{k,i,trsf,out} dm_{i,trsf,out} + Y_{k,entr} dm_{entr} - Y_{k,i} dm_i) \quad \text{Éq. 159}$$

De plus, la densité moyenne des espèces en phase gazeuse dans la zone i est le ratio entre la somme des fractions massiques des espèces en phase gazeuse et le volume spécifique de ces espèces. Comme seul le carburant peut être sous forme liquide, on considère le carburant liquide comme la première espèce dans le calcul ($k=1$). Ce qui donne pour les autres espèces ($k>1$) :

$$\rho_{g,i} = \frac{\sum_{k=2}^{KK} Y_{k,i}}{\sum_{k=2}^{KK} \frac{Y_{k,i}}{\rho_k}} \quad \text{Éq. 160}$$

Où la densité de l'espèce k se calcule par :

$$\rho_k = \frac{PW_k}{RT} \quad (k=2, 3, \dots, KK) \quad \text{Éq. 161}$$

Où KK est le nombre total d'espèces.

La masse molaire de la zone i s'écrit par ailleurs :

$$W_i = \frac{1}{\sum_{k=1}^{KK} \left(\frac{Y_{k,i}}{W_k} \right)} \quad \text{Éq. 162}$$

Avec les expressions des dérivées des espèces k et de la masse molaire dans la zone i, cela permet d'obtenir :

$$dW_i = d \frac{1}{\sum_{k=1}^{KK} \left(\frac{Y_{k,i}}{W_k} \right)} = - \frac{d \left(\sum_{k=1}^{KK} \left(\frac{Y_{k,i}}{W_k} \right) \right)}{\left(\sum_{k=1}^{KK} \left(\frac{Y_{k,i}}{W_k} \right) \right)^2} = - \frac{\sum_{k=1}^{KK} \left(\frac{dY_{k,i}}{W_k} \right)}{\left(\sum_{k=1}^{KK} \left(\frac{Y_{k,i}}{W_k} \right) \right)^2} \quad \text{Éq. 163}$$

2.3.3 Distinction entre la zone ambiante et le spray

Concernant l'ensemble de la masse contenue dans la chambre de combustion, on distingue 2 « zones » : la zone ambiante et la zone du spray :

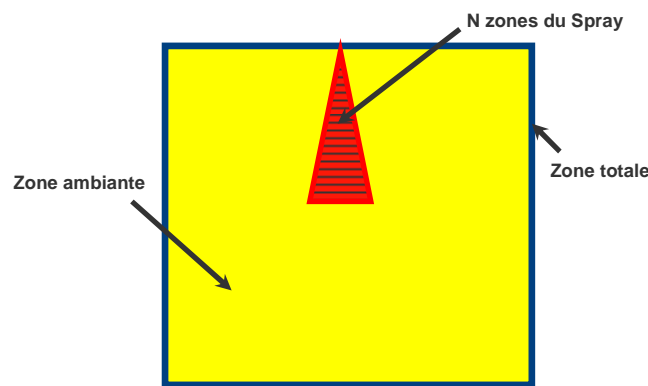


Figure 83 : Définition des zones

On résume dans le tableau suivant les différentes équations pour la zone ambiante et la zone « totale » :

	La Zone ambiante	La Zone totale
Masse de transfert	$dm_{trsf,amb} = -\sum_{i=1}^{nz} dm_{entr,i}$	$dm_{trsf,tot} = dm_{inj}$
Masse entraînée	$dm_{entr,amb} = 0$	$dm_{entr,tot} = 0$
Masse de carburant	$dm_{f,amb} = 0$	$dm_{f,tot} = dm_{inj}$
Masse d'autres espèces gazeuses	$dm_{g,amb} = -\sum_{i=1}^{nz} dm_{entr,i}$	$dm_{g,tot} = 0$
Masse totale	$dm_{amb} = -\sum_{i=1}^{nz} dm_{entr,i}$	$dm_{tot} = dm_{inj}$
Quantité de mouvement	$dM_{amb} = 0$	$dM_{tot} = \sum_{i=1}^{nz} dM_i$
Pénétration	$dZ_{amb} = 0$	$dZ_{tot} = 0$
Volume	$dV_{amb} = -\sum_{i=1}^{nz} dV_i$	$dV_{tot} = 0$

Fraction d'espèce	$dY_{k,amb} = 0$	$dY_{k,tot} = \frac{1}{m_{tot}} (Y_{k,inj} dm_{inj} - Y_{k,tot} dm_{tot})$
Température	$dT_{amb} = -\frac{1}{m_{amb} \cdot c_{v,amb}} \cdot \left(P \cdot dV_{amb} + (dm_{amb} \cdot e_{amb} - h_{amb} \cdot dm_{trsf,amb}) \right)$	$dT_{tot} = -\frac{1}{m_{tot} \cdot c_{v,tot}} \cdot \left(m_{tot} \cdot \sum dY_{k,tot} \cdot e_{k,tot} + dm_{tot} \cdot e_{tot} - h_{inj} \cdot dm_{trsf,tot} \right)$

Tableau 4 : Dérivées des variables dans la zone ambiante et la zone totale

Dans la zone « totale », la dérivation de la masse peut être écrite directement :

$$dm_{tot} = dm_{inj} \quad \text{Éq. 164}$$

La dérivée de la masse molaire s'écrit :

$$dW_{tot} = d \frac{1}{\sum_{k=1}^{KK} \left(\frac{Y_{k,tot}}{W_k} \right)} = -\frac{\sum_{k=1}^{KK} \left(\frac{dY_{k,tot}}{W_k} \right)}{\left(\sum_{k=1}^{KK} \left(\frac{Y_{k,tot}}{W_k} \right) \right)^2} \quad \text{Éq. 165}$$

Ainsi, la loi de gaz parfait peut être utilisée pour calculer la pression dans l'ensemble de la zone :

$$dP_{tot} = dP_i = P_{tot} \cdot \left(\frac{dm_{tot}}{m_{tot}} + \frac{dT_{tot}}{T_{tot}} - \frac{dV_{tot}}{V_{tot}} - \frac{dW_{tot}}{W_{tot}} \right) \quad \text{Éq. 166}$$

2.3.4 Calcul des propriétés thermodynamiques (CHEMKIN)

CHEMKIN est un « package » largement utilisé par la communauté des combustionnistes. Il regroupe plusieurs mécanismes de cinétique chimique en phases gazeuse. Il contient également une procédure pour le calcul des propriétés thermodynamiques des différentes espèces. L'outil CHEMKIN est donc tout d'abord utilisé dans notre cas pour calculer les propriétés thermodynamiques.

Les propriétés thermodynamiques à l'état standard sont calculées de la manière suivante :

$$\frac{C_{pk}^o}{R} = \sum_{n=1}^N a_{nk} T^{(n-1)} \quad \text{Éq. 167}$$

Où l'exposant o indique l'état standard à la pression atmosphérique. Avec l'hypothèse des gaz parfaits, la chaleur spécifique à pression constante ne dépend pas de la pression.

L'enthalpie standard de l'espèce k s'obtient par :

$$H_k^o = \int_0^T C_{pk}^o dT \quad \text{Éq. 168}$$

Ce qui donne :

$$\frac{H_k^o}{RT} = \sum_{n=1}^N \frac{a_{nk} T^{(n-1)}}{n} + \frac{a_{N+1,k}}{T} \quad \text{Éq. 169}$$

Où la constante d'intégration $Ra_{(N+1),k}$ est l'enthalpie standard de formation de l'espèce k à 0 Kelvin.

L'entropie s'obtient par la relation

$$S_k^o = \int_0^T \frac{C_{pk}^o}{T} dT \quad \text{Éq. 170}$$

Soit :

$$\frac{S_k^o}{R} = a_{1k} \ln T + \sum_{n=2}^N \frac{a_{nk} T^{(n-1)}}{n-1} + a_{N+2,k} \quad \text{Éq. 171}$$

Où la constante d'intégration, $Ra_{(N+2),k}$ représente l'entropie standard de l'espèce k à 298 K.

Les équations ci-dessus sont indiquées pour un polynôme d'ordre arbitraire, mais les données thermodynamiques des espèces dans CHEMKIN II sont conçues pour fonctionner avec les tables thermochimiques de JANAF [166] (1971), des compilations de Burcat [173] (1984), ainsi que le formalisme utilisé par la NASA (Gordon et McBride [170], 1971). Dans ce cas là, sept coefficients sont nécessaires pour les polynômes de degré quatre en fonction de la température T et sur deux intervalles de température :

$$\frac{C_{pk}^o}{R} = a_{1k} + a_{2k} T + a_{3k} T^2 + a_{4k} T^3 + a_{5k} T^4 \quad \text{Éq. 172}$$

$$\frac{H_k^o}{RT} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2} T + \frac{a_{3k}}{3} T^2 + \frac{a_{4k}}{4} T^3 + \frac{a_{5k}}{5} T^4 + \frac{a_{6k}}{T} \quad \text{Éq. 173}$$

$$\frac{S_k^o}{R} = a_{1k} \ln T + a_{2k} T + \frac{a_{3k}}{2} T^2 + \frac{a_{4k}}{3} T^3 + \frac{a_{5k}}{4} T^4 + a_{7k} \quad \text{Éq. 174}$$

Les autres propriétés thermodynamiques se calculent facilement en fonction de C_p^o , de H^o et de S^o :

La chaleur spécifique à volume constant se calcule par la relation $C_v = C_p - R$.

L'énergie interne U^o est donnée par $U^o = H^o - RT$.

L'enthalpie libre standard de Gibbs, G^o s'écrit $G^o = H^o - TS$.

L'énergie libre standard de Helmholtz est définie par $A^o = U^o - TS^o$.

Donc, on constate que les données thermodynamiques d'une espèce sont parfaitement définies à partir des 14 coefficients a_{ik} ($i = 1$ à 14), avec 7 coefficients pour un domaine de basses températures et 7 autres coefficients pour un domaine de hautes températures. En général, la température intermédiaire est de l'ordre de 1000 K mais elle dépend des espèces [160].

Par ailleurs, on fait l'hypothèse que les gaz se comportent comme des gaz parfaits. Les valeurs de la chaleur spécifique, de l'enthalpie, et de l'énergie interne sont donc données par :

$$c_{p,k} = \frac{C_{p,k}^o}{W_k} \quad \text{Éq. 175}$$

$$c_{v,k} = \frac{C_{v,k}^o}{W_k} \quad \text{Éq. 176}$$

$$e_k = \frac{U_k^o}{W_k} \quad \text{Éq. 177}$$

$$h_k = \frac{H_k^o}{W_k} \quad \text{Éq. 178}$$

En reprenant les conditions du Tableau 3, et en supposant pour l'instant que le carburant est évaporé dès qu'il entre dans la 1^{ère} zone du spray, on donne ci-après une comparaison de pénétration, de pression, et de température lorsque l'on utilise les propriétés thermodynamiques calculées par CHEMKIN (fonction de la température) et lorsque l'on utilise des valeurs fixes (indépendantes de la température) :

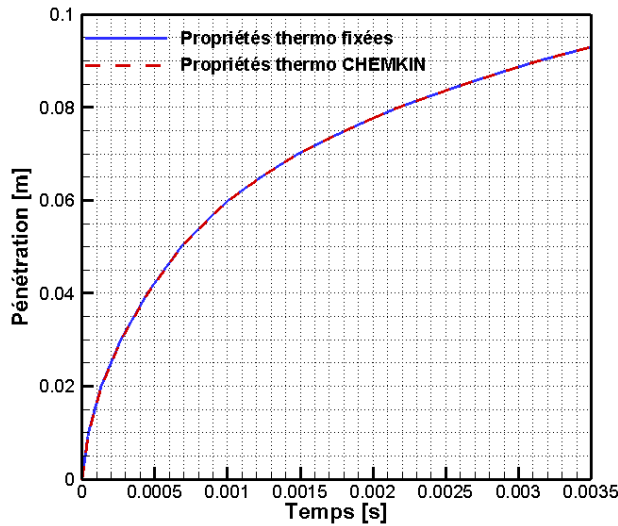


Figure 84 : Comparaison de la Pénétration

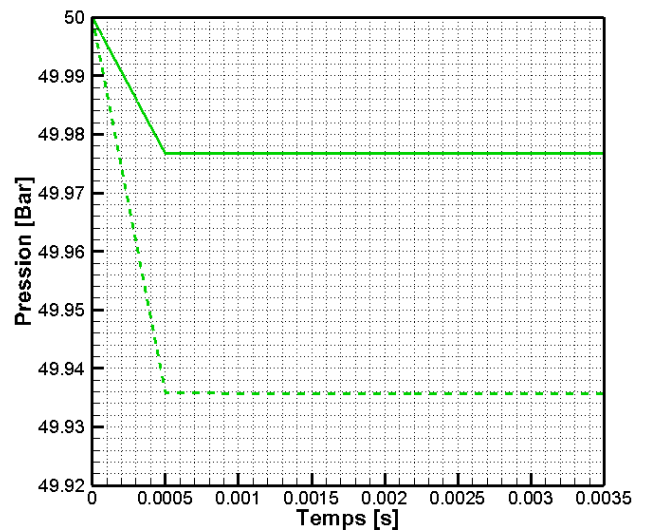


Figure 85 : Comparaison de la Pression

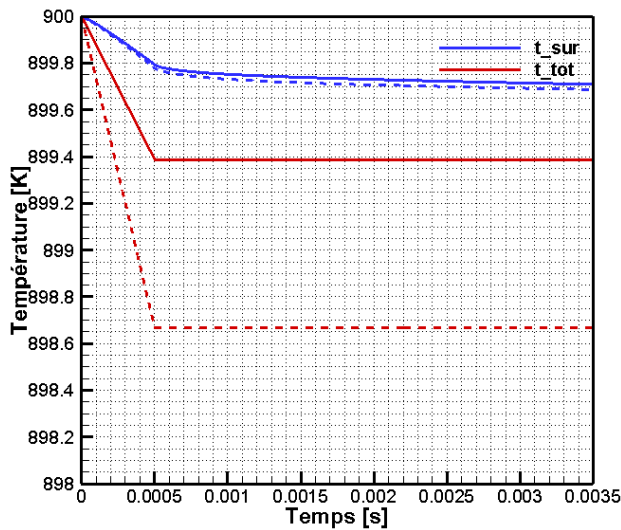


Figure 86 : Comparaison de la température moyenne

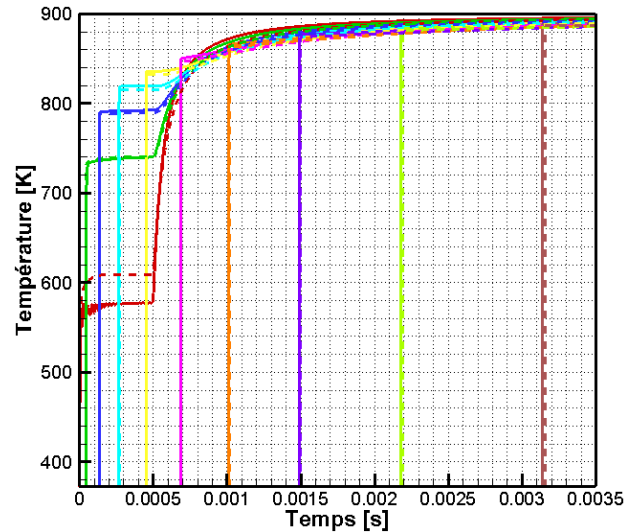


Figure 87 : Comparaison des températures des zones

Si les pénétrations calculées sont très similaires avec les deux approches, les températures et pression sont en revanche différentes, bien qu'il n'y ait pas encore de réactions chimiques exothermiques faisant augmenter la température. Ceci souligne bien l'importance de tenir compte de la variation des propriétés thermodynamiques avec la température.

2.3.5 Description de l'évaporation du carburant

2.3.5.1 Présentation du modèle d'évaporation

Pour éviter la discontinuité à cause du changement de phase du carburant dans la 1^{ère} zone, il convient de développer un modèle d'évaporation. Cela consiste à rajouter une nouvelle espèce « carburant liquide » dans le modèle de combustion. Dans ce modèle d'évaporation, on considère l'espèce « carburant liquide » comme une espèce supplémentaire mais sans utiliser la loi des gaz parfaits, et le processus d'évaporation comme une réaction chimique. Dans cette « réaction », le carburant liquide se transforme en carburant vapeur en absorbant l'énergie. Lorsqu'on rajoute le modèle d'évaporation, il faut traiter le système avec précaution en deux parties : une partie gazeuse où la loi gaz parfait peut être appliquée, et une autre partie de liquide.

On utilise un modèle d'évaporation simple, de type « phénoménologique », partant du principe que le taux d'évaporation est proportionnel au carburant injecté non évaporé :

$$\text{Si } T \geq T_{evap} \quad dm_{f, evap} = m_{f, l} \times r_{evap} \quad \text{Éq. 179}$$

$$\text{Si } T < T_{evap} \quad dm_{f, evap} = 0 \quad \text{Éq. 180}$$

r_{evap} représente une constante de taux d'évaporation.

Dans toute la suite, on distingue une « espèce » carburant liquide et une « espèce » carburant gazeux.

De manière similaire aux taux de réactions chimiques, on peut donc définir un « taux de réaction » de « l'espèce » carburant liquide $\dot{\omega}_{f, liq, i}$ comme :

$$\dot{\omega}_{f, l, i} = - \frac{m_{f, l, i} \cdot r_{evap}}{V_i \cdot W_{f, l}} \quad \text{Éq. 181}$$

Où le signe négatif « - » indique que le processus d'évaporation consomme du carburant liquide.

Concernant les propriétés thermodynamiques pour le carburant liquide, un calcul spécifique est nécessaire. Tout d'abord, on considère une température de référence de 371.6 K. A cette température de référence, l'énergie interne et l'enthalpie du carburant liquide sont calculées avec l'aide de CHEMKIN :

$$e_{f, l}(T_{ref}) = \overbrace{e_{f, v}(T_{ref})}^{CHEMKIN} - L_{vap} + \frac{PV}{m} = \overbrace{e_{f, v}(T_{ref})}^{CHEMKIN} - L_{vap} + \frac{RT_{ref}}{W_f} \quad \text{Éq. 182}$$

$$h_{f, l}(T_{ref}) = \overbrace{h_{f, v}(T_{ref})}^{CHEMKIN} - L_{vap} \quad \text{Éq. 183}$$

Comme les valeurs de la capacité calorifique du liquide à pression constante et de la capacité calorifique du liquide à volume constant sont similaires, et dépendent peu de la température, la capacité calorifique de liquide $c_{f, l}$ est fixée. Pour les autres températures :

$$e_{f, l}(T) = e_{f, l}(T_{ref}) + (T - T_{ref}) \cdot c_{f, l} \quad \text{Éq. 184}$$

$$h_{f, l}(T) = h_{f, l}(T_{ref}) + (T - T_{ref}) \cdot c_{f, l} \quad \text{Éq. 185}$$

En parallèle, l'équation de masse du carburant liquide est modifiée pour tenir compte de l'évaporation :

$$dm_{f, l, i} = \overline{(\rho Y_{f, l} \beta u A)_{in}} - \overline{(\rho Y_{f, l} \beta u A)_{out}} - m_{f, l, i} \times r_{evap} \quad \text{Éq. 186}$$

Et le taux de réaction pour « l'espèce » carburant vapeur est écrit comme la somme de deux termes : un premier terme constitue le taux de réaction en phase gazeuse calculé par CHEMKIN (oxydation du carburant), le deuxième terme provient de l'évaporation de carburant liquide:

$$\dot{\omega}_{f, v, i} = \dot{\omega}_{f, v, i}(CHEMKIN) + \dot{\omega}_{f, l \rightarrow v, i} = \dot{\omega}_{f, v, i}(CHEMKIN) - \dot{\omega}_{f, l, i} \quad \text{Éq. 187}$$

De plus, comme le carburant est dans deux phases simultanément, alors que seul le carburant vapeur constitue l'espèce réactive dans le mécanisme chimique, la définition de la richesse moyenne doit être aussi modifiée :

$$\phi_i^{=*} = 3.51 \times \frac{Y_{f, v, i}}{Y_{O_2, i}} \quad \text{Éq. 188}$$

2.3.5.2 Effet de la constante du taux d'évaporation

La valeur du paramètre r_{evap} reflète directement la vitesse du processus d'évaporation. Plus la valeur de r_{evap} est élevée, plus l'évaporation est rapide. La valeur de r_{evap} est choisie de manière empirique de manière à retrouver la pénétration liquide.

Ci-dessous, les résultats pour trois niveaux de valeur de r_{evap} sont présentés. La capacité calorifique de liquide est fixée à $2.3 \text{ J} / (\text{g} \cdot \text{K})$, la chaleur d'évaporation est fixée à une valeur de $280 \text{ kJ} / \text{kg}$. Les zones font 1 cm de longueur.

r_{evap}	Longueur liquide
10000	5-6 cm
100000	2-3 cm
1000000	0-1 cm

Tableau 5 : Comparaison de la longueur liquide pour différents niveaux de r_{evap}

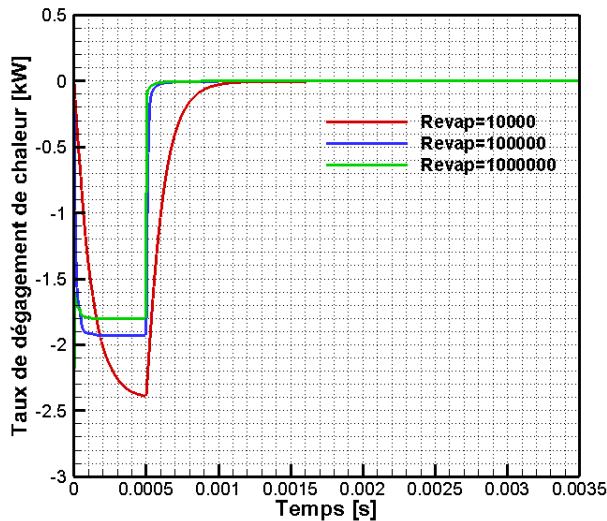


Figure 88 : Comparaison des « taux de dégagement de chaleur »

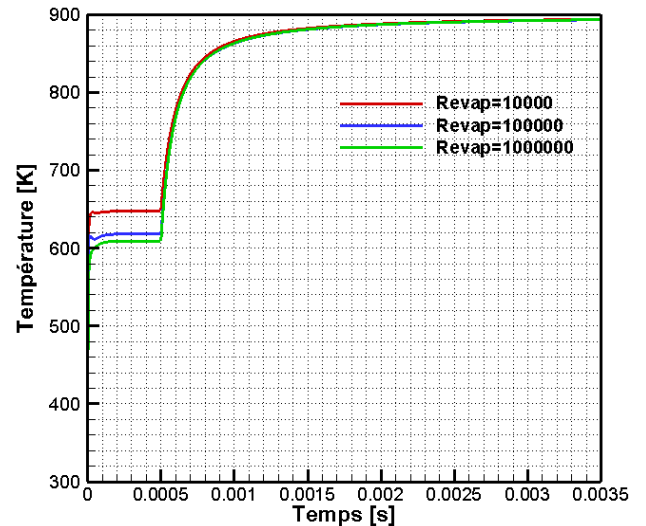


Figure 89 : Comparaison de la température dans la Zone 1(0-1 cm)

On constate à la lumière du Tableau 5 que la longueur liquide diminue lorsque l'on augmente la valeur du coefficient r_{evap} . Parallèlement, avant la fin de l'injection, la température des zones proches du nez de l'injecteur (zone 1 par exemple : cf. Figure 89) diminue. On donne sur les figures suivantes les richesses avant et après la fin de l'injection (EOI) pour les 3 valeurs du coefficient d'évaporation :

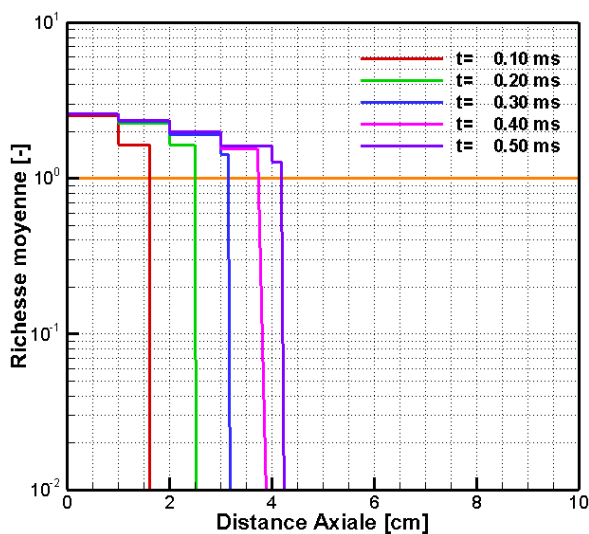


Figure 90a : Richesse moyenne avant EOI ($r_{evap}=10000$)

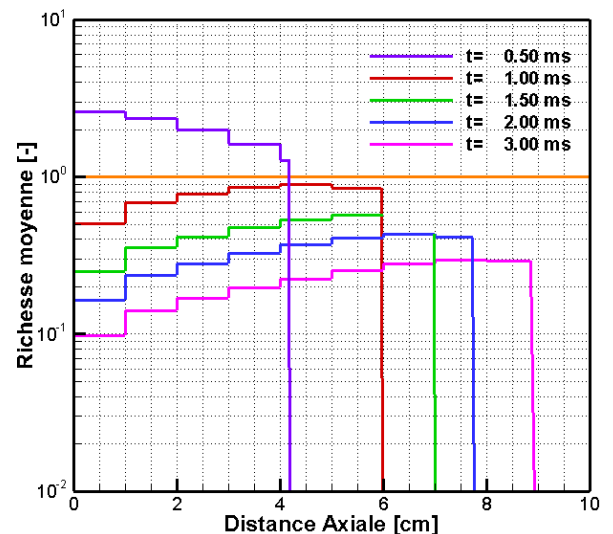


Figure 90b : Richesse moyenne après EOI ($r_{evap}=10000$)

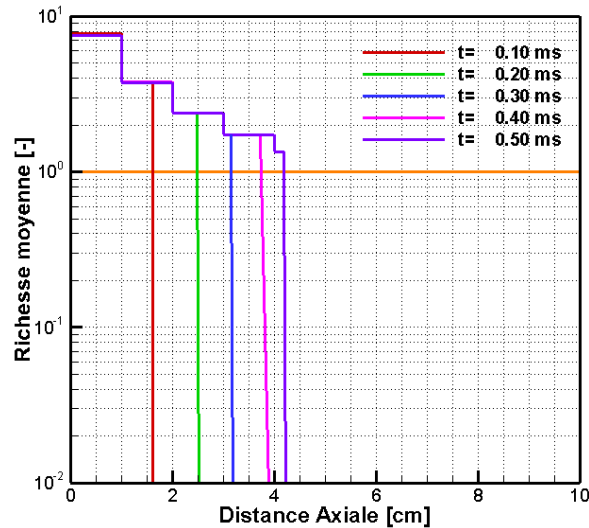


Figure 91a : Richesse moyenne avant EOI ($r_{evap}=100000$)

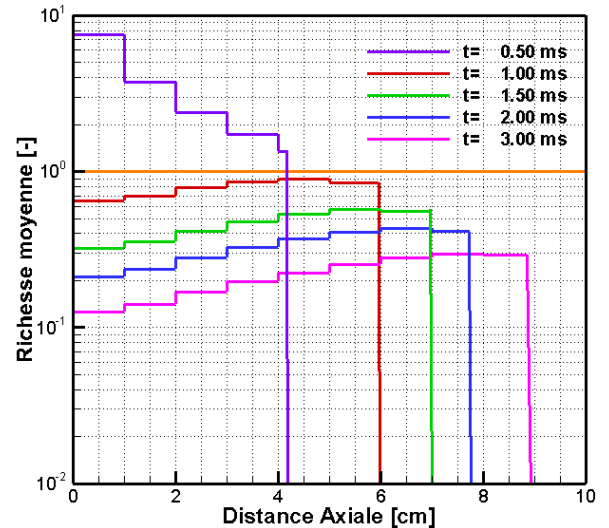


Figure 91b : Richesse moyenne après EOI ($r_{evap}=100000$)

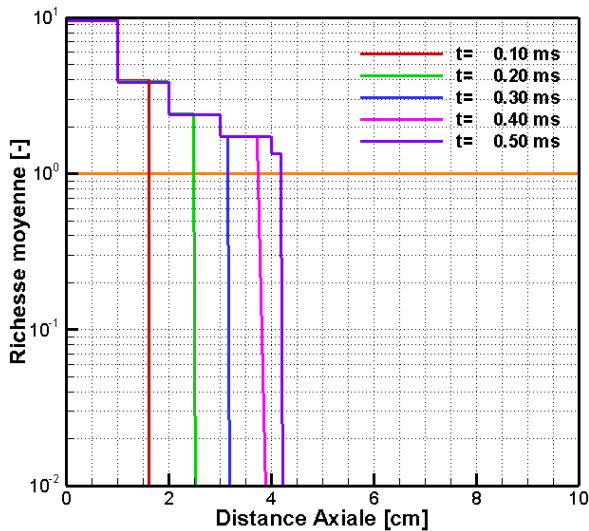


Figure 92a : Richesse moyenne avant EOI ($r_{evap}=1000000$)

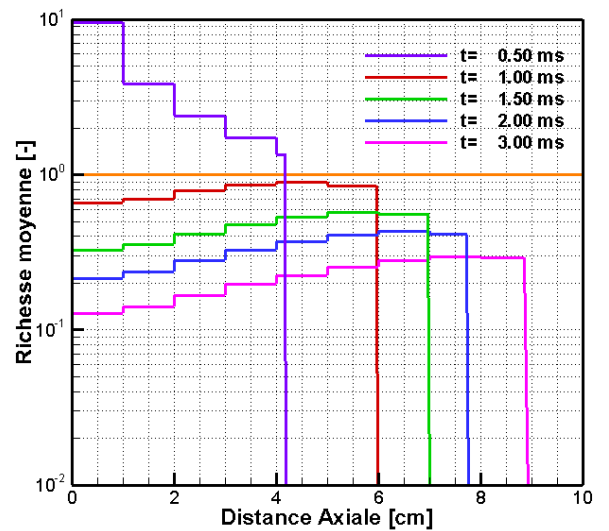


Figure 92b : Richesse moyenne après EOI ($r_{evap}=1000000$)

La ligne orange sur les figures représente la richesse moyenne stœchiométrique. Naturellement, lorsque le processus d'évaporation est plus rapide, la richesse (définie par la quantité de carburant sous forme vapeur) augmente dans les zones où il y a évaporation (près du nez de l'injecteur).

2.4 Modèle de jet 1D brûlant

2.4.1 Prise en compte de la dilatation du jet par modification de la section du spray

Des études expérimentales présentées dans la littérature font apparaître une modification des paramètres géométriques macroscopiques du jet de carburant lorsque celui-ci brûle, comparativement au jet non-brûlant (mêmes conditions d'injection, mais gaz ambiants dépourvus d'oxygène). Sur la Figure 93, on observe ainsi que le jet brûlant conduit à une augmentation de la vitesse de pénétration, ainsi qu'à un élargissement du spray. Ceci provient de la dilatation du spray par augmentation de sa température suite aux réactions chimiques exothermiques.

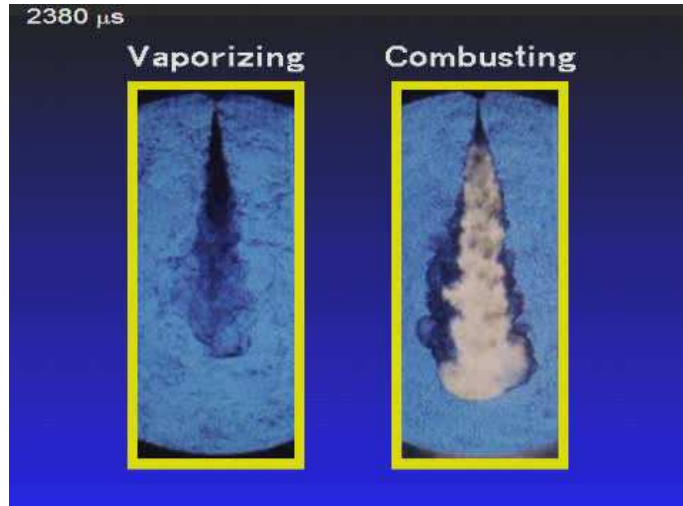


Figure 93 : Visualisation du spray non-combustible (gauche) et combustible (droite) [174]

Afin de se rapprocher au mieux de la physique du jet dans le cas brûlant, on modifie la section des zones comme décrit ci-après.

Un premier calcul est effectué en conditions inertes afin de connaître l'évolution des sections des différentes zones sans chimie. Dans le cas brûlant, on recalcule alors la section de chaque zone à chaque pas de temps de sorte de satisfaire l'équation suivante [135] :

$$\frac{V_{\text{reac}}}{V_{\text{inert}}} = \frac{\rho_{\text{inert}}}{\rho_{\text{reac}}} \quad \text{Éq. 189}$$

Les pas de temps entre les calculs inerte et brûlant étant éventuellement différents, il est nécessaire de réaliser une interpolation pour la masse dans chaque zone dans le cas inerte :

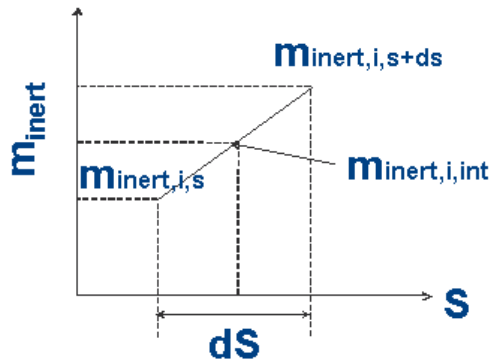


Figure 94 : Interpolation linéaire de la masse inerte

On écrit donc :

$$V_{\text{reac},i} = \frac{m_{\text{inert},i,\text{int}}}{\rho_{\text{reac},i}} \quad \text{Éq. 190}$$

$$A_{\text{reac},i} = \frac{V_{\text{reac},i}}{Z_{\text{reac},i}} \quad \text{Éq. 191}$$

$$dV_{\text{reac},i} = A_{\text{reac},i} \cdot dZ_{\text{reac},i} + dA_{\text{reac},i} \cdot Z_{\text{reac},i} \quad \text{Éq. 192}$$

Où la dérivation de la section transversale est calculée avec une différentielle simple :

$$dA_{\text{reac},i} = \frac{A_{\text{reac},i}^t - A_{\text{reac},i}^{t-1}}{\Delta t} \quad \text{Éq. 193}$$

Le schéma général de calcul de la section des zones pour le jet brûlant est résumé sur la Figure 95.

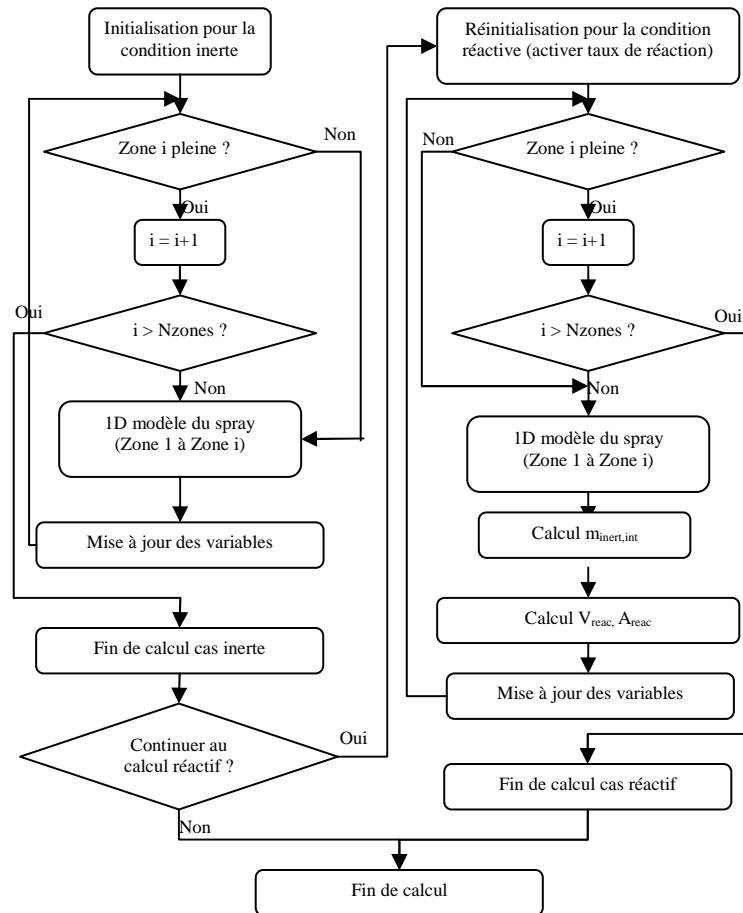


Figure 95 : Schéma général de résolution du code

2.4.2 Modèle de pertes thermiques aux parois de la bombe

On complète encore le modèle en tenant compte des déperditions thermiques aux parois de la chambre de combustion. On utilise un modèle simple de type convectif :

$$dQ_p = h_{ech} A (T - T_p) \quad \text{Éq. 194}$$

L'équation de température est alors modifiée comme suit :

$$\frac{dT_i + \frac{m_i \cdot \sum dY_{k,i} \cdot e_{k,i} + P \cdot dV_i + dQ_p + dm_i \cdot e_i - (h_{i-1} \cdot dm_{trsf,in,i} - h_i \cdot dm_{trsf,out,i} + h_{ambient} \cdot dm_{entr,i})}{m_i \cdot c_{v,i}}}{m_i \cdot c_{v,i}} = 0 \quad \text{Éq. 195}$$

2.4.3 Modèle de taux d'introduction de carburant

Jusqu'à présent, le modèle a été testé avec un taux d'introduction de carburant de type « carré », c'est-à-dire avec un débit injecté parfaitement constant pendant toute la durée de l'injection. Le modèle de combustion est encore amélioré en introduisant un sous-modèle de taux d'introduction de carburant afin de pouvoir décrire des injections transitoires (ce qui est le cas notamment sur les systèmes d'injection classiques utilisés sur les moteurs automobiles).

On utilise ici le modèle de Maiboom et al. [89], lui-même basé sur les travaux de Cerri et al. [121]. Dans ce modèle, le processus d'injection de carburant est découpé en cinq phases : une phase de décalage entre le début de l'activation de l'injecteur et le début de l'introduction de carburant (A-B), une phase stable où le taux d'introduction

est modélisé par l'équation de Bernoulli (D-E), et trois autres phases transitoires où les taux d'introduction sont calculées par des évolutions linéaires et sont des fonctions de la pression d'injection (B-C, C-D, et E-F).

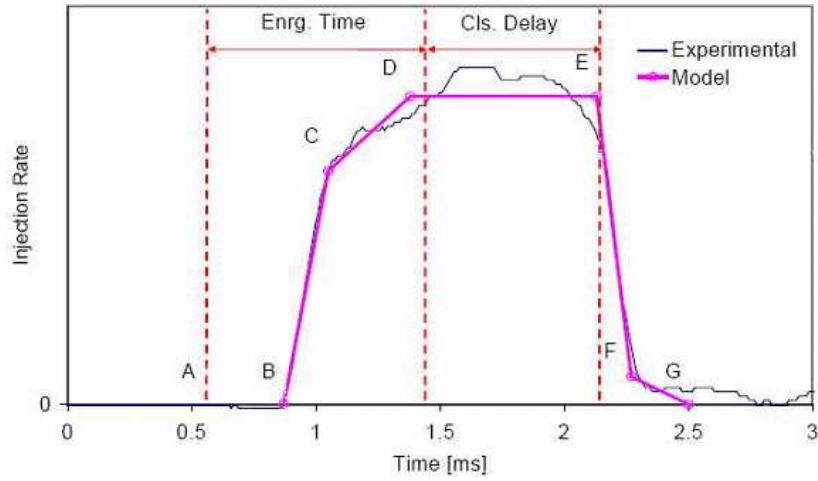


Figure 96 : Modèle de taux d'introduction selon Cerri et al.[121]

Les équations sont les suivantes :

$$\dot{Q}_{DE} = C_V \rho_f u_{inj} A_{trou} \quad \text{Éq. 196}$$

Où

$$u_{inj} = \sqrt{\frac{2(P_{rail} - P_{amb})}{\rho_f}} \quad \text{Éq. 197}$$

$$A_{trou} = C_a \frac{\pi D_{trou}^2}{4} \quad \text{Éq. 198}$$

$$C_V = C_d / C_a \quad \text{Éq. 199}$$

Les calculs des pentes BC, CD et EF en fonction de la pression de rampe commune selon Maiboom et al. sont :

$$a_{BC} = 140.1701 \times P_{rail} - 16033.27 \quad \text{Éq. 200}$$

$$a_{CD} = 5.385 \times P_{rail} + 16651.415 \quad \text{Éq. 201}$$

$$a_{EF} = 225.8079 \times P_{rail} + 6840.624 \quad \text{Éq. 202}$$

L'unité de la pression de rampe commune est *Bar*, et g/s^2 pour les pentes. Il est à noter que les coefficients présentés ci dessus sont adaptés à l'injecteur utilisé dans cette étude et devraient être ajustés en cas de changement d'injecteur. La position du point C est définie comme :

$$\dot{Q}_C = 0.69 \dot{Q}_{DE} \quad \text{Éq. 203}$$

La durée et la masse de carburant injecté dans chaque phase transitoire peuvent être calculés. En conséquence, la durée de la phase stable DE est calculée pour conserver la masse de carburant totale injectée :

$$t_{DE} = \frac{[m_{inj} - (m_{BC} + m_{CD} + m_{EF})]}{\dot{Q}_{DE}} \quad \text{Éq. 204}$$

2.4.4 Modèle de l'angle de spray

Comme il est largement utilisé, le modèle empirique développé par Siebers et al. [13] est appliqué dans ce modèle :

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = c \cdot \left[\left(\frac{\rho_a}{\rho_f}\right)^{0.19} - 0.0043 \sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_a}} \right] \quad \text{Éq. 205}$$

Où c est un coefficient empirique.

2.4.5 Traitement numérique des équations

Après avoir testé différents solveurs numériques des équations, il a été décidé d'utiliser un solveur de type Runge Kutta d'ordre 4 avec un pas de temps variable. Il apparaît que deux phénomènes conduisent à une réduction drastique du pas de temps (et donc par conséquence à une augmentation de la durée de calcul) :

- La création d'une nouvelle zone : ceci vient du fait que les zones ne sont créées qu'au fur et à mesure que le spray avance. Au tout début de la création d'une zone, la masse est très faible, ce qui conduit à des variations relatives élevées et nécessite de limiter le pas de temps (noté dt1).
- Lorsque le taux de combustion est important, cela conduit également à une réduction forte du pas de temps (noté dt2).

Le pas de temps retenu est donc :

$$dt = \min[dt_1, dt_2] \quad \text{Éq. 206}$$

Pour la détermination de dt_2 , on écrit :

$$dt_2 = f \left[\max\left(\frac{dQ_{c,i}}{dt}\right), \max\left(\frac{d^2Q_{c,i}}{dt^2}\right) \right] \quad \text{Éq. 207}$$

Où la dérivée seconde est estimée par :

$$\frac{d^2Q_{c,i}}{dt^2} = \frac{11}{6} \frac{dQ_{c,i}}{dt} - 3 \frac{dQ_{c,i-1}}{dt} + \frac{3}{2} \frac{dQ_{c,i-2}}{dt} - \frac{1}{3} \frac{dQ_{c,i-3}}{dt} \quad \text{Éq. 208}$$

On réalise ensuite une adimensionnalisation :

$$\max\left(\frac{d^2Q_{c,i}}{dt^2}\right)_{\text{non-dim}} = \max\left(\frac{d^2Q_{c,i}}{dt^2}\right) / (b_1 \times b_2) \quad \text{Éq. 209}$$

$$\max\left(\frac{dQ_{c,i}}{dt}\right)_{\text{non-dim}} = \max\left(\frac{dQ_{c,i}}{dt}\right) / b_1 \quad \text{Éq. 210}$$

Où les coefficients non dimensionnels b_1 et b_2 sont :

$$b_1 = \frac{NZ \times m_{inj} \times PCI}{N_{noz} \times t_{inj}} \quad \text{Éq. 211}$$

$$b_2 = dt^{-1}$$

Ici, PCI est le pouvoir calorifique inférieur, NZ est le nombre de zones et Nnoz est le nombre d'injecteurs. Enfin, le pas de temps dt2 pour résoudre les équations liées aux réactions chimiques est écrit comme suit :

$$dt_2 = C \cdot \left\{ \max \left[\max\left(\frac{dQ_{c,i}}{dt}\right)_{\text{non-dim}}, \max\left(\frac{d^2Q_{c,i}}{dt^2}\right)_{\text{non-dim}} \right] \right\}^d \quad \text{Éq. 212}$$

Où c, d sont les coefficients de la fonction.

2.4.6 Différentes approches pour le calcul du taux de réaction (Modèle de combustion)

Dans cette partie, on propose différentes approches pour le calcul du taux de combustion à proprement parler :

- La première approche utilisant un mécanisme de chimie détaillée (notée CD) permet de suivre les évolutions des différentes espèces chimiques, y compris les intermédiaires de réaction.

- La deuxième approche utilise un mécanisme chimique simplifié (notée CS) à une réaction. Elle a pour objectif principal de réduire le temps de calcul par rapport à l'approche précédente. Une variante de cette approche prenant en compte des limites de richesse (notée CS_LR) est également proposée afin de tenter de pallier l'absence de discrétisation radiale

- La troisième approche utilise un taux de réaction indépendant de la chimie (notée SC) et un délai d'inflammation fixé manuellement. Par nature moins prédictive que les approches précédentes, elle est utilisée ici pour analyser les effets d'une mauvaise prédiction du délai sur le calcul de la combustion. Une variante incluant un modèle de micro-mélange (notée SC_MM) a pour but là encore de tenter de corriger l'absence de discrétisation radiale.

2.4.6.1 Modèle à chimie détaillée (CD)

Une première approche consiste à utiliser l'outil CHEMKIN pour réaliser un calcul de chimie détaillée.

La fraction massique de l'espèce k dans la zone i ($i \neq 1$) s'écrit :

$$dY_{k,i} = \frac{1}{m_i} \left(V_i \dot{\omega}_{k,i} W_k + Y_{k,i-1, \text{trsf}, \text{in}} dm_{i, \text{trsf}, \text{in}} - Y_{k,i, \text{trsf}, \text{out}} dm_{i, \text{trsf}, \text{out}} + Y_{k, \text{entr}} dm_{\text{entr}} - Y_{k,i} dm_i \right) \quad \text{Éq. 213}$$

Où le terme $\frac{V_i}{m_i} \dot{\omega}_{k,i} W_k$ représente la dérivation de la fraction massique de l'espèce k du fait des réactions chimiques.

Spécifiquement, pour la zone 1, la fraction massique de l'espèce k est :

$$dY_{k,1} = \frac{1}{m_1} \left(V_1 \dot{\omega}_{k,1} W_k + Y_{k, \text{inj}} dm_{\text{inj}} - Y_{k,1, \text{trsf}, \text{out}} dm_{1, \text{trsf}, \text{out}} + Y_{k, \text{entr}} dm_{\text{entr}} - Y_{k,1} dm_1 \right) \quad \text{Éq. 214}$$

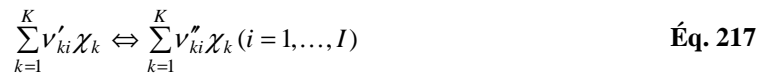
Le dégagement de chaleur total est la somme des chaleurs dégagées par les différentes réactions. Le taux de dégagement de chaleur s'écrit donc :

$$dQ_{c,i} = -m_i \sum_{k=1}^{KK} \left(\frac{V_i}{m_i} \dot{\omega}_{k,i} W_k \cdot u_{k,i} \right) = -V_i \sum_{k=1}^{KK} \left(\dot{\omega}_{k,i} W_k u_{k,i} \right) \quad \text{Éq. 215}$$

Le dégagement de chaleur par la combustion est donné par :

$$Q_c = \sum_{i=1}^{NZ} Q_{c,i} = \sum_{i=1}^{NZ} \int dQ_{c,i} = \sum_{i=1}^{NZ} dQ_{c,i} \cdot dt \quad \text{Éq. 216}$$

Si on considère I réactions élémentaires réversibles (ou irréversibles) impliquant les K espèces chimiques, on a la formulation générale suivante :



Avec ν_{ki} est le coefficient stœchiométrique et χ_k est le symbole chimique de l'espèce k. Normalement, une réaction élémentaire ne comporte que trois ou quatre espèces; alors la matrice de ν_{ki} est assez creuse pour un large éventail de réactions.

Le taux de production $\dot{\omega}_k$ pour l'espèce k peut être écrit comme la somme des variables des vitesses de progrès de toutes les réactions impliquant les K espèces :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{i=1}^I \nu_{ki} q_i \quad \text{Éq. 218}$$

Où $\nu_{ki} = \nu''_{ki} - \nu'_{ki}$

La variable de vitesse de progrès q_i pour la réaction i est donnée par la différence entre le taux direct et le taux inverse :

$$q_i = k_{fi} \prod_{k=1}^{KK} [X_k]^{\nu'_{ki}} - k_{ri} \prod_{k=1}^{KK} [X_k]^{\nu''_{ki}} \quad \text{Éq. 219}$$

Où X_k est la concentration molaire de l'espèce k , k_{fi} et k_{ri} sont les constantes de vitesse direct et de vitesse inverse, respectivement. Les constantes de vitesse des réactions élémentaires qui constituent le mécanisme chimique détaillé sont décrites à l'aide des coefficients d'Arrhenius ($A_{a,i}$, n_i , $E_{a,i}$). Elles correspondent aux constantes de vitesse directe k_{fi} des réactions lues dans le sens direct.

$$k_{fi} = A_{a,i} T^{n_i} \exp\left(\frac{E_{a,i}}{RT}\right) \quad \text{Éq. 220}$$

Une réaction chimique peut être prise en compte uniquement dans le sens direct (signe \Rightarrow entre réactifs et produits) ou dans les deux sens (signe \Leftrightarrow ou $=$). Lorsqu'elles ne sont pas données, les constantes de vitesse inverses k_{ri} sont calculées à partir des constante d'équilibre K_{ci} en utilisant les données thermodynamiques des K espèces mises en jeu dans les I réactions :

$$k_{ri} = \frac{k_{fi}}{K_{ci}} \quad \text{Éq. 221}$$

Bien qu'elles soient données en unités de concentration, les constantes d'équilibre sont plus facilement déterminées à partir des propriétés thermodynamiques dans les unités de pression. Elles sont liées par :

$$K_{ci} = K_{pi} \left(\frac{P_{atm}}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^{KK} \nu_{ki}} \quad \text{Éq. 222}$$

Où P_{atm} est la pression atmosphérique. Les constantes d'équilibre K_{pi} sont définies par :

$$K_{pi} = \exp\left(\frac{\Delta S_i^o}{R} - \frac{\Delta H_i^o}{RT}\right) \quad \text{Éq. 223}$$

Avec :

$$\frac{\Delta S_i^o}{R} = \sum_{k=1}^{KK} \nu_{ki} \frac{S_k^o}{R} \quad \text{et} \quad \frac{\Delta H_i^o}{RT} = \sum_{k=1}^{KK} \nu_{ki} \frac{H_k^o}{RT} \quad \text{Éq. 224}$$

Il est important d'avoir la base de données thermodynamiques la plus complète possible car, pour chaque réaction, la constante de vitesse inverse peut être obtenue à partir de la constante directe et de la constante d'équilibre.

En général, le fichier correspondant au mécanisme doit spécifier quatre points suivants:

- les éléments pris en compte (C, H, O, N, ...),
- les espèces qui interviennent (O₂, CH₄, C₂H₆, ...),
- les réactions élémentaires considérées,
- les constantes de vitesse directe de chacune des réactions élémentaires.

Pour tous les mécanismes de chimie détaillée, la méthodologie de calcul est identique.

On assimile le carburant à du N-heptane (C_7H_{16}), pour lequel 4 mécanismes sont proposés par CHEMKIN:

Mécanisme	Nombre d'espèces	Nombre de réactions
ERC	30	54
Stanford	45	112
LLNL heptane réduit	161	1540
LCSR_PRF_NO	1063	4495

Tableau 6 : Caractéristiques des mécanismes chimiques

Le temps de calcul des taux de réaction augmente de manière drastique avec l'augmentation de la complexité du mécanisme. On présente ici une étude de sensibilité aux mécanismes de cinétique chimique pour différentes conditions ambiantes dans une bombe à volume constant de 500 cm^3 . Les différentes conditions sont données dans le Tableau 7.

Essai	Température initiale [K]	Richesse de mélange [-]	Taux d'EGR [%]
1	1100	1	0
2	1100	1	50
3	750	1	0
4	750	1	50
5	750	0.5	0
6	750	0.5	50
7	750	1.5	0
8	750	1.5	50
9	600	0.5	50
10	750	0.5	70
11	750 (P0=40bars)	0.5	70
12	750	0.3	70

Tableau 7 : Récapitulatif des données d'entrées pour les essais de simulation réalisés en vue de la validation des tables d'auto inflammation. Les différents essais sont réalisés pour une pression initiale de $P_0 = 30\text{bars}$.

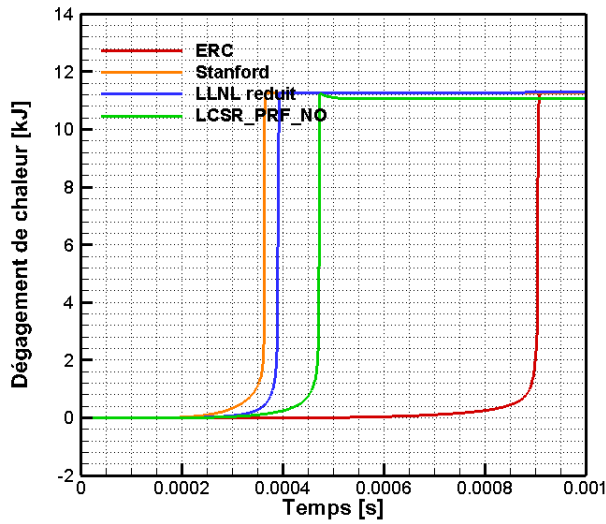


Figure 97 : Dégagement de chaleur (Essai 1)

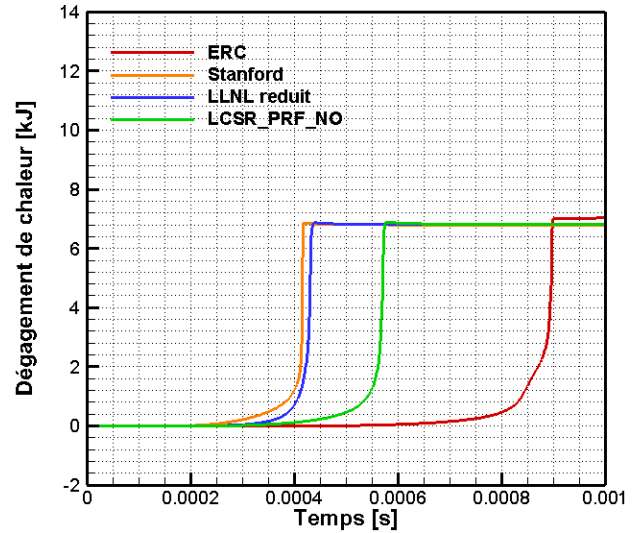


Figure 98 : Dégagement de chaleur (Essai 2)

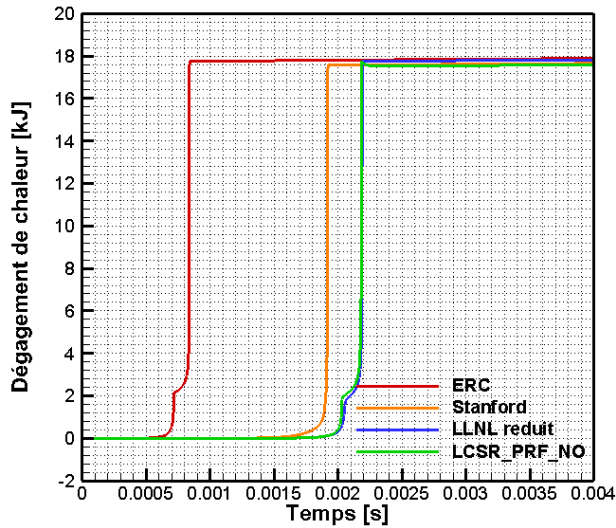


Figure 99 : Dégagement de chaleur (Essai 3)

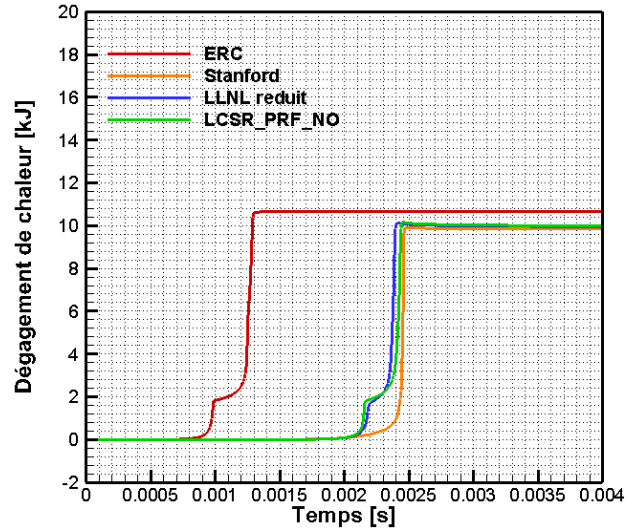


Figure 100 : Dégagement de chaleur (Essai 4)

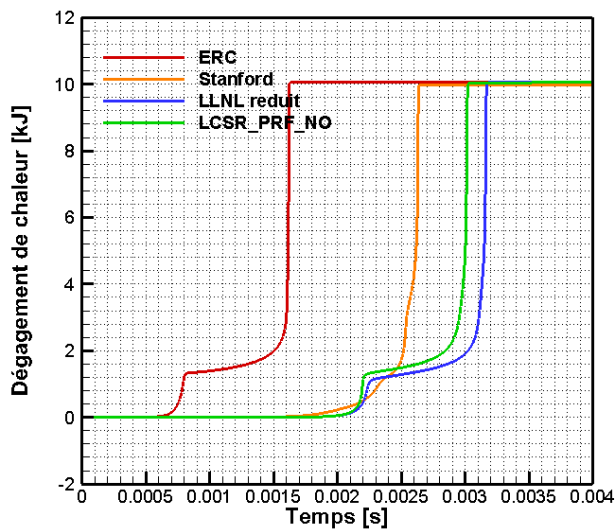


Figure 101 : Dégagement de chaleur (Essai 5)

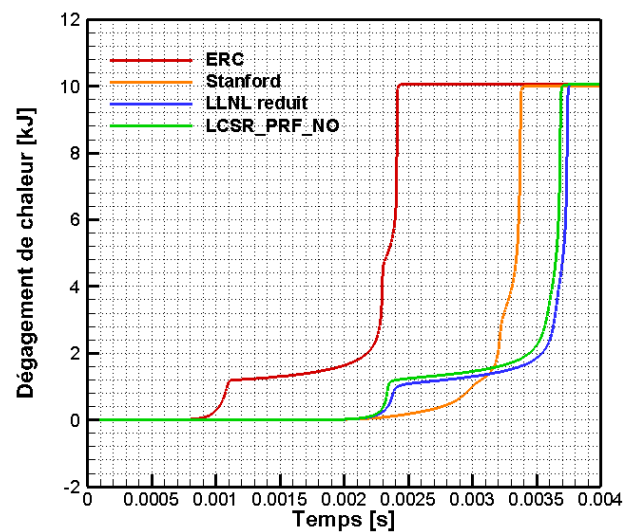


Figure 102 : Dégagement de chaleur (Essai 6)

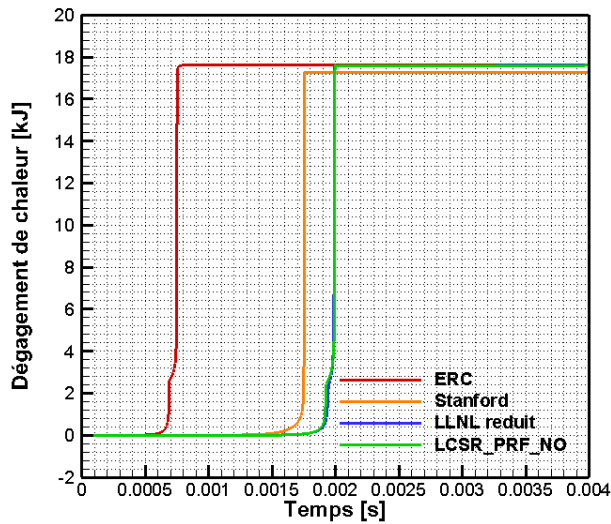


Figure 103 : Dégagement de chaleur (Essai 7)

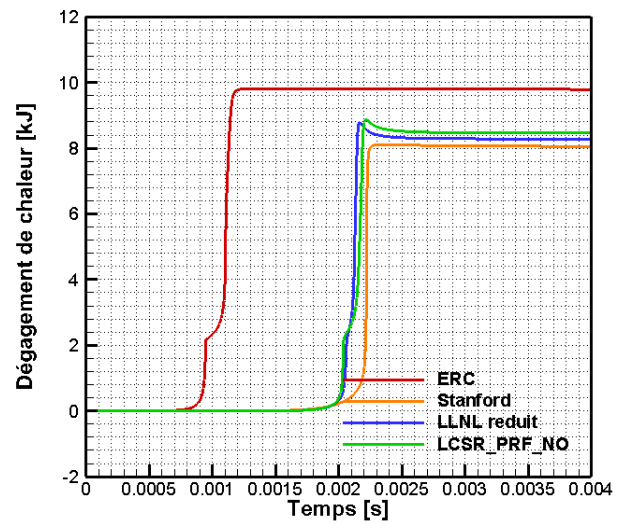


Figure 104 : Dégagement de chaleur (Essai 8)

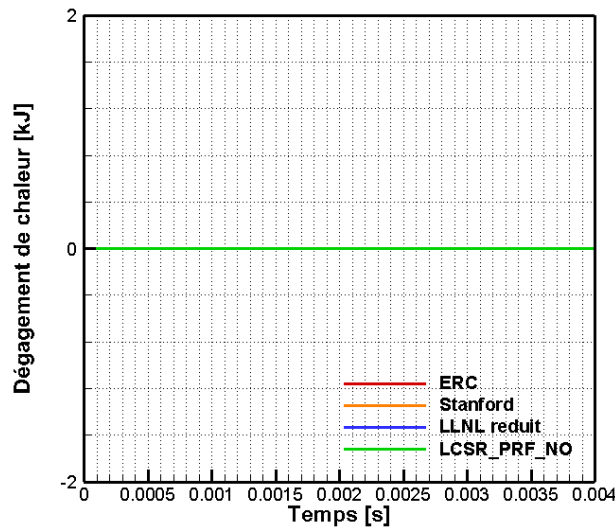


Figure 105 : Dégagement de chaleur (Essai 9)

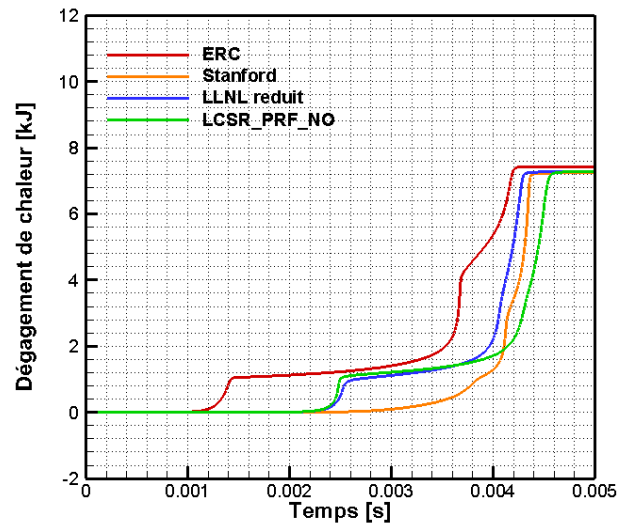


Figure 106 : Dégagement de chaleur (Essai 10)

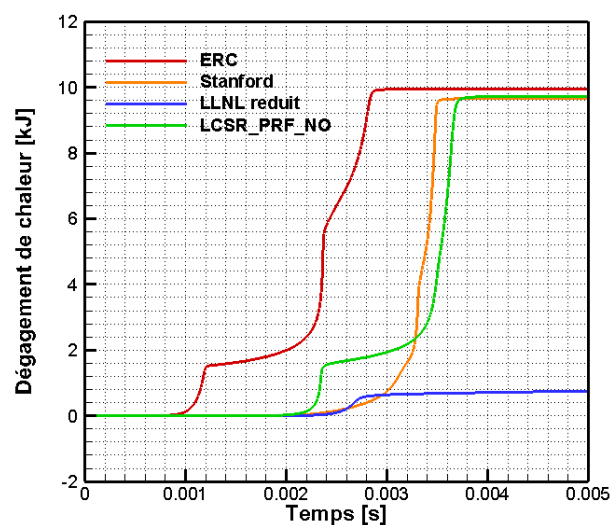


Figure 107 : Dégagement de chaleur (Essai 11)

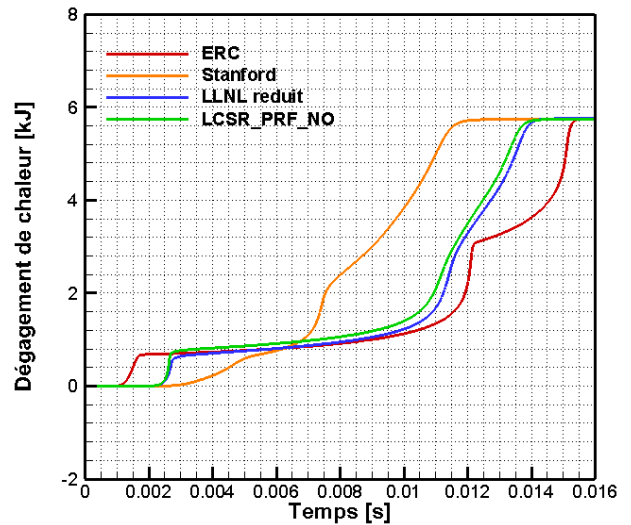


Figure 108 : Dégagement de chaleur (Essai 12)

La Figure 97 et la Figure 98 montrent les résultats pour une température haute (1100 K) et un mélange stœchiométrique. Quel que soit le taux d'EGR, le mécanisme de Stanford a le délai le plus court. L'écart entre le

mécanisme de Stanford et les mécanismes complexes (LLNL heptane réduit et LCSR PRF-NO) est faible. Par contre, le mécanisme le plus simple, ERC, conduit toujours à un délai plus long.

La Figure 99 et la Figure 100 donnent les résultats pour une température basse (750 K) et un mélange stœchiométrique. On peut identifier deux délais, un concernant la combustion froide et l'autre lié à la combustion principale. Les résultats donnés par les mécanismes complexes sont quasiment identiques. Cependant le mécanisme Stanford ne permet pas de prédire la combustion froide et en conséquence, sous-estime le délai de combustion principale par rapport aux autres mécanismes. Le mécanisme très réduit ERC peut capturer deux délais de combustion mais conduit à une combustion plus rapide par rapport aux mécanismes plus détaillés.

La Figure 101 et la Figure 102 donnent les résultats pour une température et une richesse faibles. Dans ces cas, on constate que les deux phases de combustion sont plus marquées. Les observations sont similaires que pour les essais 3 et 4.

La Figure 103 et Figure 104 montrent que pour une richesse supérieure à la stœchiométrie, les mécanismes complexes ont les résultats similaires, le mécanisme ERC a un délai toujours très faible, et le mécanisme Stanford ne peut pas là-encore capturer la flamme froide.

La Figure 105 montre un cas de température très faible pour lequel l'ensemble des mécanismes conduit à un dégagement de chaleur nul. La Figure 106 montre un cas proche de l'essai 6 avec une dilution encore plus importante. Le mécanisme ERC semble conduire à une combustion en deux étapes Cette tendance n'est pas aussi claire pour les autres mécanismes complexes.

La Figure 107 donne un cas avec une pression initiale plus haute par rapport à l'essai 10. Avec l'augmentation de pression, la combustion est plus complète et finit aux mêmes niveaux que l'essai 5 et l'essai 6. Cependant dans ce cas, le mécanisme LLNL heptane réduit ne permet pas de prédire la combustion. La Figure 108 montre le cas d'une faible température, très faible richesse et d'une dilution importante. Dans ce cas, les mécanismes complexes conduisent à des délais de flamme froide plus courts et plus proches que le mécanisme ERC.

D'une manière générale, les premiers tests ci-dessus montrent que les résultats sont très sensibles au choix du mécanisme de cinétique chimique.

2.4.6.2 Modèle à chimie simplifiée à 1 réaction (CS)

Une autres approche pour le calcul du taux de combustion consiste à ne représenter que la réaction suivante (carburant assimilé à du n-heptane) :



Le modèle à chimie simplifiée à 1 réaction (CS) calcule le taux de réaction avec la loi d'Arrhenius :

$$\frac{d[C_7H_{16}]}{dt} = A_a [C_7H_{16}]^m [O_2]^n e^{-E_a/RT} \quad \text{Éq. 225}$$

La valeur par défaut du facteur pré-exponentiel A_a est $2.0E+08$ /s, l'énergie d'activation $E_a = 15780$ kJ/mol, les facteurs m et n sont 0.25 et 1.5 respectivement. Le fichier d'entrée du mécanisme est ensuite codé pour pouvoir être appelé par le package «CHEMKIN». Le taux de production $\dot{\omega}_k$ pour chaque espèce est donc calculé automatiquement avec l'aide des sous-routines de CHEMKIN.

2.4.6.3 Modèle à chimie simplifiée et limite de richesse (CS_LR)

Pour décrire l'impact des inhomogénéités de richesse radiales du jet sur la combustion, on définit également une approche à chimie simplifiée et limite de richesse consistant à exclure de la combustion les zones qui sont trop riches ou trop pauvres en se basant sur le profil de richesse radial :

$$Y_{mix,lim,r} = \frac{\int_{-L_{lim,r}}^{L_{lim,r}} \phi(r) dr}{\int_{-r_m}^{r_m} \phi(r) dr} = \frac{\int_0^{L_{lim,r}} \phi(r) dr}{\int_0^{r_m} \phi(r) dr} \quad \text{Éq. 226}$$

Où R est la largeur de zone, $L_{lim,r}$ est la position entre 0 et R où la richesse de mélange atteint la valeur limite $\phi_{lim,r}$. Avec l'aide du paramètre α qui définit le profil radial, la richesse à chaque distance radiale peut se calculer comme :

$$\phi(r) = \phi_c \left[1 - \left(\frac{r}{r_m} \right)^\alpha \right]^2 \quad \text{Éq. 227}$$

La Figure 109 montre un exemple de la richesse normalisée en fonction de distance radiale normalisée pour un profil complètement développé ($\alpha = 1.5$). Donc, $\int_{-L_{lim,r}}^{L_{lim,r}} \phi(r) dr$ représente la partie de surface jaune sur la Figure 109.

$\int_{-r_m}^{r_m} \phi(r) dr$ est la surface totale en dessous de distribution de richesse.

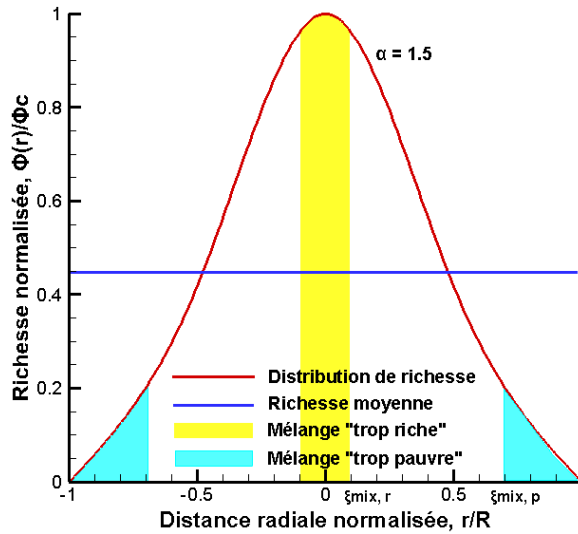


Figure 109 : Richesse normalisée en fonction de distance radiale normalisée

Pour une richesse limite riche donnée $\phi_{lim,r}$, la position radiale vaut :

$$L_{lim,r} = \left[1 - \sqrt{\frac{\phi_{lim,r}}{\phi_c}} \right]^{\frac{1}{\alpha}} \cdot r_m = \xi_{lim,r} \cdot r_m \quad \text{Éq. 228}$$

Par ailleurs, la relation entre la richesse moyenne et la richesse au centre est :

$$\bar{\phi} = \frac{2}{r_m} \int_{-r_m}^{r_m} \phi_c \left[1 - \left(\frac{|r|}{R} \right)^\alpha \right]^2 dr = \phi_c \frac{2\alpha^2}{(\alpha+1)(2\alpha+1)} \quad \text{Éq. 229}$$

Donc :

$$\phi_c = \frac{(\alpha+1)(2\alpha+1)\bar{\phi}}{2\alpha^2} \quad \text{Éq. 230}$$

Où la richesse moyenne est calculée à partir des fractions massiques des espèces carburant vapeur et O₂ :

$$\bar{\phi} = \frac{\overline{Y_{f,v}}}{Y_{O_2}} \cdot \left(\frac{O_2}{F} \right)_{st} \quad \text{Éq. 231}$$

Où $\left(\frac{O_2}{F} \right)_{st}$ représente le rapport stœchiométrique massique d'O₂ et carburant. Pour le n-heptane, cette valeur est

3.51. Et l'équation de la fraction de mélange « trop riche » s'écrit :

$$\begin{aligned} Y_{mix,lim,r} &= \frac{\int_0^L \phi_c \left[1 - \left(\frac{r}{r_m} \right)^\alpha \right]^2 dr}{\int_0^{r_m} \phi_c \left[1 - \left(\frac{r}{r_m} \right)^\alpha \right]^2 dr} \\ &= \frac{(2\alpha^2 + 3\alpha + 1)L_{lim,r} r_m^{2\alpha} - (4\alpha + 2)L_{lim,r}^{\alpha+1} r_m^\alpha + (\alpha + 1)L_{lim,r}^{2\alpha+1}}{(2\alpha^2 + 3\alpha + 1)r_m^{2\alpha}} \\ &= \frac{2\alpha^2 r_m}{(2\alpha^2 + 3\alpha + 1)} \\ &= \frac{(2\alpha^2 + 3\alpha + 1)\xi_{lim,r} - (4\alpha + 2)\xi_{lim,r}^{\alpha+1} + (\alpha + 1)\xi_{lim,r}^{2\alpha+1}}{2\alpha^2} \end{aligned} \quad \text{Éq. 232}$$

On peut utiliser la même méthode pour calculer la fraction massique de carburant dans le mélange « trop pauvre » $Y_{mix,lim,p}$, qui est représentée par la surface bleu clair sur la Figure 109.

$$L_{lim,p} = \overbrace{\left[1 - \sqrt{\frac{\phi_{lim,p}}{\phi_c}} \right]^\alpha}^{\xi_{lim,p}} \cdot r_m = \xi_{lim,p} \cdot r_m \quad \text{Éq. 233}$$

$$\begin{aligned} Y_{f,lim,p} &= \frac{\int_{L_{lim,p}}^{r_m} \phi_c \left[1 - \left(\frac{r}{r_m} \right)^\alpha \right]^2 dr}{\int_0^{r_m} \phi_c \left[1 - \left(\frac{r}{r_m} \right)^\alpha \right]^2 dr} \\ &= 1 - \frac{(2\alpha^2 + 3\alpha + 1)\xi_{lim,p} - (4\alpha + 2)\xi_{lim,p}^{\alpha+1} + (\alpha + 1)\xi_{lim,p}^{2\alpha+1}}{2\alpha^2} \end{aligned} \quad \text{Éq. 234}$$

Au final, la fraction massique de chaque espèce k disponible à la réaction est :

$$Y_{k,dispo} = (1 - Y_{mix,lim,r} - Y_{mix,lim,p}) Y_k \quad \text{Éq. 235}$$

2.4.6.4 Modèle sans chimie à délai d'inflammation fixé (SC)

Il paraît également intéressant de définir une approche consistant à fixer le délai d'inflammation manuellement (égal au délai expérimental). Si bien sûr cette approche réduit le caractère prédictif du modèle, elle permet de s'affranchir des conséquences d'une éventuelle mauvaise estimation du délai (modification des parts de pré-mélange et de diffusion notamment).

Lorsque l'on atteint le délai d'inflammation, on écrit :

Si la richesse moyenne $\bar{\phi}$ est inférieure à 1 :

$$\frac{dm_{f,b}}{dt} = r_{reac} m_{f,dispo} \quad \text{Éq. 236}$$

Si $\bar{\phi} > 1$:

$$\frac{dm_{O_2,b}}{dt} = r_{reac} m_{O_2,dispo} \quad \text{Éq. 237}$$

$$\frac{dm_{f,b}}{dt} = \frac{W_f}{11 \times W_{O_2}} \cdot \frac{dm_{O_2,b}}{dt} \quad \text{Éq. 238}$$

Où la terme $\frac{dm_{f,b}}{dt}$ représente le taux de combustion de carburant, r_{reac} est le coefficient de réaction. W_f et W_{O_2} sont la masse molaire de carburant et la masse molaire d'oxygène.

Dans ce modèle simple de combustion, la définition de la valeur du coefficient r_{reac} est semblable à celle de R_{evap} dans le modèle d'évaporation. Ce modèle consiste à considérer qu'une fois le carburant mélangé avec l'air (« macro-mélange ») dans une zone, seule la cinétique chimique est limitante.

2.4.6.5 Modèle sans chimie avec « micro mélange » (SC_MM)

Une dernière approche consiste à considérer qu'au processus de « macro-mélange » entre le spray et les gaz ambiants il convient d'ajouter un « micro-mélange » au sein du spray, pour tenir compte notamment du caractère turbulent des écoulements au sein de la chambre de combustion. On utilise ici une approche qui consiste à calculer la fréquence de mélange f_{mix} entre le carburant et l'air comme dans le modèle de Barba [88][89]. La fréquence de mélange est en une fonction proportionnelle du carburant disponible. On écrit ensuite :

Si le mélange est pauvre en carburant :

$$\frac{dm_{f,b}}{dt} = f_{mix} m_{f,dispo} \quad \text{Éq. 239}$$

Si le mélange est riche en carburant :

$$\frac{dm_{f,b}}{dt} = \frac{W_f}{11 \times W_{O_2}} \cdot f_{mix} m_{O_2,dispo} \quad \text{Éq. 240}$$

Avec la formulation suivante de f_{mix} :

$$f_{mix} = \frac{k_{diff} \sqrt{c_G \cdot c_m^2 + c_k \cdot kin}}{\sqrt[3]{\frac{V_{tot}}{N_{noz}}}} \quad \text{Éq. 241}$$

Où k_{diff} , c_G , c_k sont des coefficients empiriques, V_{tot} est le volume total de chambre de combustion, N_{noz} est le nombre de trous d'injecteur, c_m la vitesse moyenne de piston. La densité de l'énergie cinétique de la turbulence kin est estimée de la même façon que dans le modèle « Chmela 1 » [85] avec :

$$\frac{dkin}{dt} = \frac{C_{spray}}{m_{tot}} \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{N_{noz} \rho_f A_{noz}} \right)^2 \cdot \overbrace{\left(dm_{inj} \right)^3}^{dE_{cin,spray}} - \frac{C_{diss}}{d_0} kin^{\frac{3}{2}} \quad \text{Éq. 242}$$

$dE_{cin,spray}$ est une terme décrit la production de turbulence par le spray lors de l'injection de carburant.

Basé sur le modèle de jet 1D inerte développé par Musculus, un modèle de combustion 1D original a été présenté dans ce chapitre. Plusieurs compléments ont été apportés, avec un calcul explicite des flux aux frontières des zones et des bilans d'énergie et d'espèces. Un sous-modèle simplifié d'évaporation a également été introduit, ainsi qu'un sous-modèle pour le calcul de l'angle de spray. La dilatation du jet par modification de la section du spray est basée sur l'approche de Desantes et al. [135].

Concernant le calcul du taux de combustion à proprement parler, trois niveaux de modélisation de la cinétique chimique sont présentés : une approche avec chimie détaillée (utilisation de l'outil CHEMKIN), avec chimie simplifiée à 1 réaction et sans chimie. Par ailleurs, s'inspirant des travaux de Pirini et al. [127], la prise en compte des limites de richesse supérieure et inférieure est rajoutée dans le modèle à chimie simplifiée. Finalement, une échelle de micro-mélange entre l'air et le carburant, basée sur un calcul 0D inspiré des modèles de Chmela [85] et Barba [88], est introduite dans le modèle sans chimie.

Le modèle présenté permet donc de calculer les informations globales tels que le dégagement de chaleur, la pénétration du spray, la variation de pression, ainsi que des informations locales : richesse, température et composition locale dans le spray, etc.

Les résultats du modèle seront tout d'abord confrontés à des relevés expérimentaux obtenus dans le cas d'un réacteur à volume constant (chapitre 3) puis dans le cas d'un moteur (chapitre 4).

Chapitre 3 : Test du modèle de combustion dans le cas d'un réacteur à volume constant

Le modèle présenté au chapitre précédent est tout d'abord confronté à des résultats expérimentaux obtenus dans une enceinte à volume constant (« bombe »). La base de données ECN, utilisée dans la première partie de ce chapitre, est présentée.

Après avoir décrit le « calage » de certains coefficients empiriques liés aux modèles de taux d'introduction de carburant, de l'angle du spray, et de pertes thermiques, on détaillera un cas de référence avec les différentes approches de calcul du taux de combustion.

On réalisera ensuite une étude de sensibilité aux paramètres des modèles.

Finalement, on comparera les résultats des modèles avec différents relevés expérimentaux obtenus pour des conditions différentes de température et de fraction d'O₂ initiales.

3.1 Présentation de la base de données ECN

La base de données ECN (Engine Combustion Network) permet d'accéder à des résultats expérimentaux pour des sprays de type Diesel. Elle est accessible à l'adresse <http://www.sandia.gov/ecn/dieselSprayCombustion.php>

Experimental Type	Ambient O ₂ [%]	Ambient T [K]	Amb Dens [kg/m ³]	Inj Press diff [MPa]	Noz Diam [mm]	Fuel Type	TFuel [K]	Inj Dur [ms]	Institution ¹	Baseline Searches
ALL	ALL	ALL	ALL	ALL	ALL	ALL	ALL	ALL	ALL	RESET SEARCH
Soot	0	300	3.6	40	Spray A	BM88	300	-	sandia	Spray A
Lift-Off Length	8	440	7.3	50	0.050-a	CET	363	1	ifpen	"Spray H" n-heptane
Ignition Delay	10	450	7.6	60	0.071-a	CN80	373	1.2	cmt	1000K,42bar
Jet Penetration	12	600	14.8	70	0.090ks-a	D2	436	1.5	cat	Soot vs Inj Press
F/A Mixture	15	700	15.2	80	0.090ks-s	GE80	450	2	argonn	Soot vs Ambient O ₂
Liquid Length	17	750	18.8	90	0.100-a	HMN		2.5	TU/e	Soot vs Orifice
High Speed Movi	19	800	22.8	100	0.180-a	NHPT		3		Diameter
	21	850	24.3	110	0.185-s	SRx23		3.5		All Soot
										Measurements

¹: Multiple institutions can be selected by holding the control or command key while selecting them.

Figure 110 : Interface générale de l'utilitaire de données ECN

Comme montré sur la Figure 110, l'utilitaire de données fournit plusieurs options dans une large gamme de conditions. Dans notre étude, on assimile le gasoil à du n-heptane. C'est pourquoi, on utilise essentiellement les résultats d'essais de la base ECN qui concernent le n-heptane (cf. Figure 111 montrant les différentes options possibles pour ce type de carburant).

Experimental Type	Ambient O ₂ [%]	Ambient T [K]	Amb Dens [kg/m ³]	Inj Press diff [MPa]	Noz Diam [mm]	Fuel Type	TFuel [K]	Inj Dur [ms]	Institution ¹	Baseline Searches
ALL	ALL	ALL	ALL	ALL	ALL	ALL	ALL	ALL	ALL	RESET SEARCH
Soot	0	750	14.8	140	Spray A	NHPT	373	>4	sandia	Spray A
Lift-Off Length	8	800	30	150	0.100-a				ifpen	"Spray H" n-heptane
Ignition Delay	10	850							cmt	1000K,42bar
Jet Penetration	12	900							cat	Soot vs Inj Press
F/A Mixture	15	950							argonn	Soot vs Ambient O ₂
Liquid Length	21	1000							TU/e	Soot vs Orifice
High Speed Movi		1050								Diameter
		1100								All Soot
										Measurements

¹: Multiple institutions can be selected by holding the control or command key while selecting them.

Figure 111 : Interface pour le n-heptane sur la base ECN

Ici, les paramètres qui varient sont : la fraction d'O₂ dans les gaz ambiants, la température ainsi que et la densité des gaz ambiants.

3.2 Conditions expérimentales

Le Tableau 8 montre les conditions expérimentales retenues pour la validation du modèle :

Cas	1	2	3	4	5	6
Amb. T [K]	1000	1000	1000	1000	1300	900
Amb. O ₂ [%]	0	21	15	10	21	21
Amb. CO ₂ [%]	6.52	6.11	6.23	6.32	6.11	6.11
Amb Dens [kg/m ³]	14.8	14.8	14.8	14.8	14.8	14.8
Amb P [MPa]	4.33	4.21	4.25	4.28	5.48	3.79
Inj P [MPa]	154.33	150.21	153.25	153.28	154.48	152.79

Tableau 8 : Conditions retenues pour la validation du modèle

Le pourcentage non nul de CO₂, (y compris lorsque la concentration en O₂ est de 21%, représentative de l'air non dilué) provient des produits de la pré-combustion utilisée pour faire monter la pression et la température dans la bombe jusqu'aux valeurs désirées, avant l'essai proprement dit. Le Tableau 9 donne les fractions volumiques et massiques des espèces contenues dans la bombe avant injection de carburant pour les quatre teneurs en oxygène :

O ₂ [%]	X _k	0	21	15	10
	Y _k	0	22.8	16.42	11.01
N ₂ [%]	X _k	89.71	69.33	75.15	80.01
	Y _k	87.58	65.87	71.56	77.09
CO ₂ [%]	X _k	6.52	6.11	6.23	6.32
	Y _k	10.00	9.21	9.36	9.57
H ₂ O [%]	X _k	3.77	3.56	3.62	3.67
	Y _k	2.37	2.17	2.23	2.27

Tableau 9 : Fraction volumiques et massiques des espèces dans la zone ambiante

3.3 Confrontation du modèle avec les expériences

3.3.1 Détermination des coefficients des sous-modèles

3.3.1.1 Modèle de taux de l'introduction de carburant

La validation du sous-modèle de taux d'introduction est effectuée pour la condition no.2. Les paramètres d'introduction de carburant sont résumés dans le Tableau 10 :

Diamètre de trou	0.1 mm
Durée de l'injection	> 4 ms
Densité de carburant	613 kg / m ³
Pression ambiante	154.33 MPa
Pression de l'injection	4.33 MPa
Cd	0.80
Ca	0.86

Tableau 10 : Paramètres d'introduction

La figure ci-après donné le taux d'introduction calculé par comparaison avec le taux d'introduction expérimental.

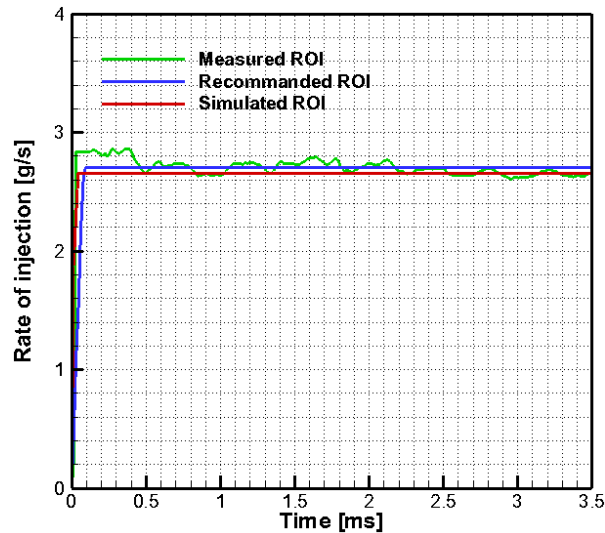


Figure 112 : Validation du modèle de taux d'introduction

La Figure 112 montre la validation du sous-modèle de taux d'introduction avec un écart maximal de 5%.

3.3.1.2 Modèle d'angle du spray

Le modèle d'angle du spray est calé en comparant les pénétrations calculée et mesurée, un angle de spray plus grand conduisant à une pénétration plus lente et réciproquement. Dans la base de données ECN, la pénétration du spray n'est mesurée que dans le cas inerte (cas 1 dans le Tableau 8).

La Figure 113 montre la comparaison entre les différents résultats de la simulation et l'expérience.

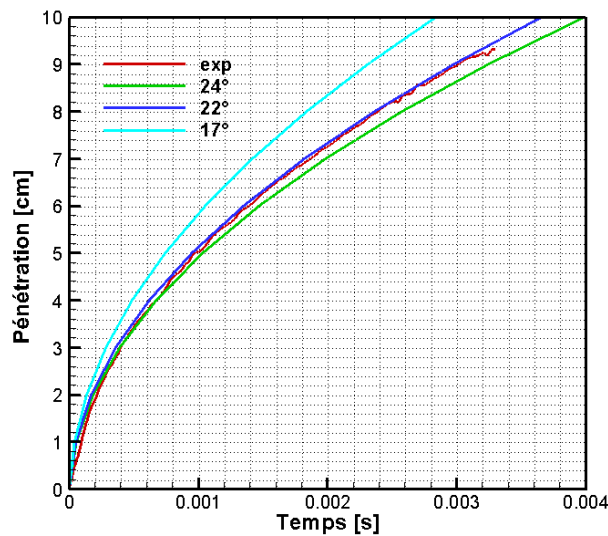


Figure 113 : Comparaison de la pénétration pour le cas inerte

Sur la Figure 113, on voit qu'il y a quasi parfaite correspondance entre la pénétration calculée et la pénétration mesurée lorsque l'angle du spray vaut $\theta=22^\circ$. En reprenant le modèle empirique pour l'angle de spray,

$$\tan\left(\frac{22^\circ}{2}\right) = c \cdot \left[\left(\frac{\rho_a}{\rho_f}\right)^{0.19} - 0.0043\sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_a}}\right] \quad \text{Éq. 243}$$

cela donne $c = 0.4178$.

Comme il est montré sur la Figure 114, les visualisations confirment que l'angle de 22° semble être une valeur raisonnable :

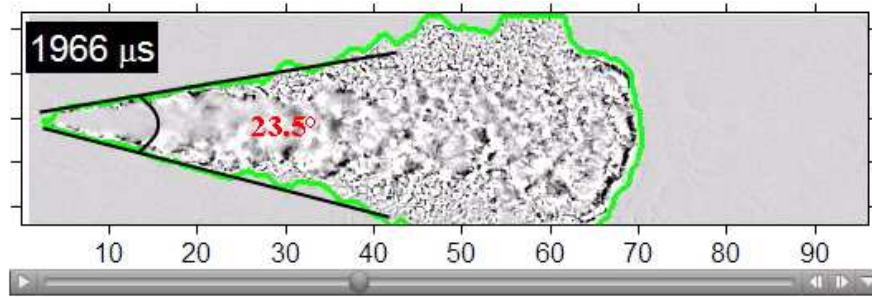


Figure 114 : Mesure directe de l'angle de spray sur la base des visualisations par ombroscopie

Par la suite, le modèle d'angle de jet recalé est utilisé pour calculer l'angle du spray pour différentes conditions ambiantes.

3.3.1.3 Modèle de pertes thermiques

Il existe de nombreux modèles empiriques pour la détermination du coefficient de convection h dans le modèle de pertes thermiques aux parois. Pour les calculs en bombe, on prend un coefficient h et une température de paroi constants. Les valeurs sont choisies de sorte de retrouver au mieux la décroissance de la pression observée expérimentalement dans la bombe avant introduction du carburant :

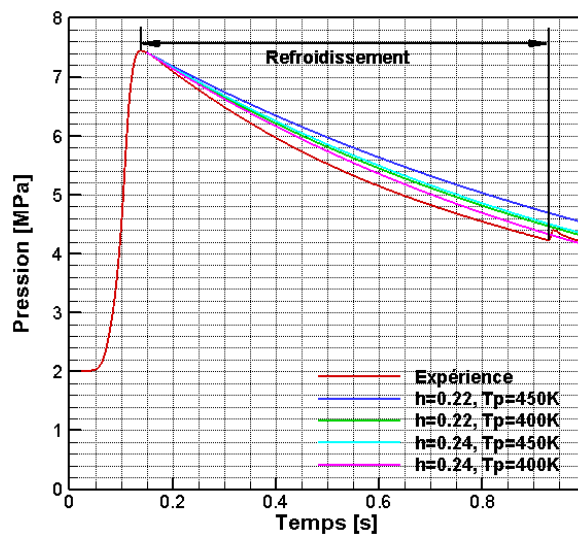


Figure 115 : Comparaison des pressions pour déterminer le coefficient h

On retient ainsi une valeur de h de $0.24 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$ et une valeur de température de paroi $T_p = 400 \text{ K}$. L'erreur commise sur l'estimation de la pression est alors inférieure à 3 %.

3.3.1.4 Modèle d'évaporation

La validation de sous-modèle d'évaporation est réalisée en conditions inertes également (cas 1).

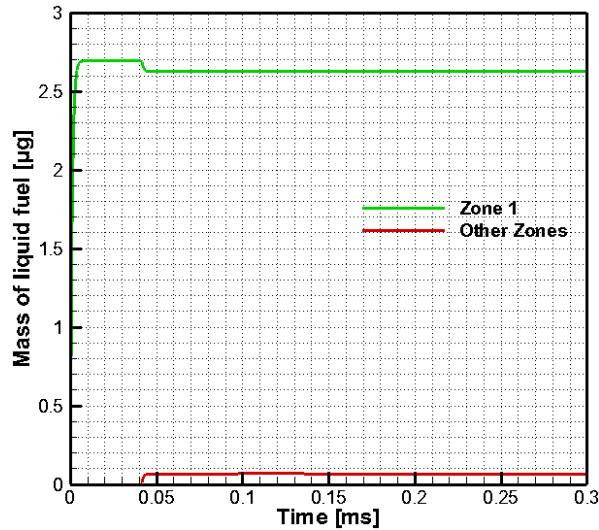


Figure 116 : Masse de carburant liquide dans les zones du spray avec $r_{evap}=10^6$

Comme le montre la Figure 116, pour $r_{evap} = 10^6$, plus de 97% du combustible liquide est contenue dans la 1ère zone (0 ~ 1 cm), tandis que la longueur liquide maximale expérimentale est de 9,2 mm. Cette valeur est donc retenue pour la suite.

3.3.2 Analyse qualitative des résultats du modèle à chimie détaillée pour le cas 2

On se propose dans ce paragraphe d'analyser de manière qualitative les résultats du modèle à chimie détaillée pour le cas 2 du Tableau 8. Le mécanisme ERC est retenu ici. Les résultats sont donnés ci-après :

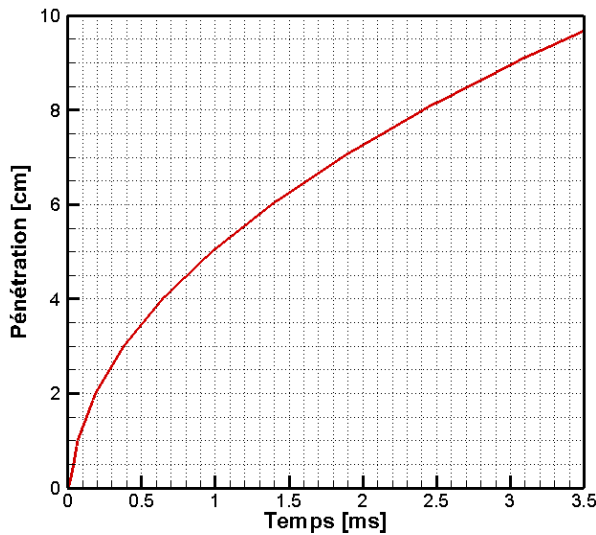


Figure 117: Pénétration du spray (Modèle CD, ERC)

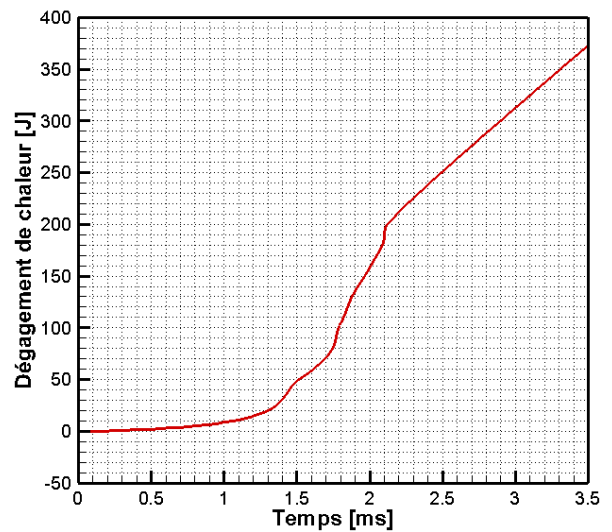


Figure 118: Dégagement de chaleur total (Modèle CD, ERC)

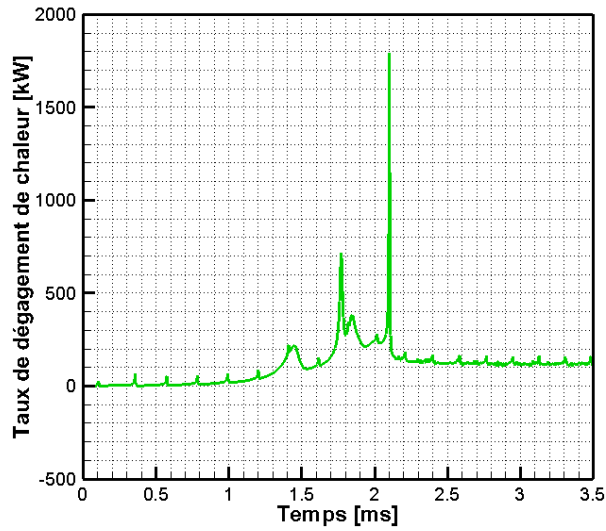


Figure 119: Taux de dégagement de chaleur total (Modèle CD, ERC)

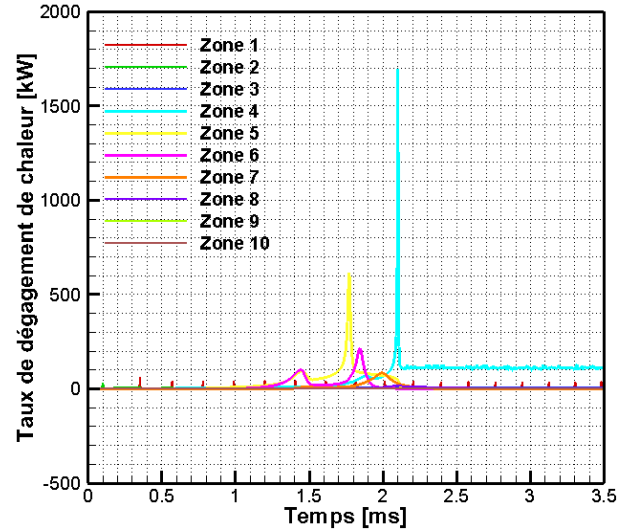


Figure 120: Taux de dégagement de chaleur dans les zones (Modèle CD, ERC)

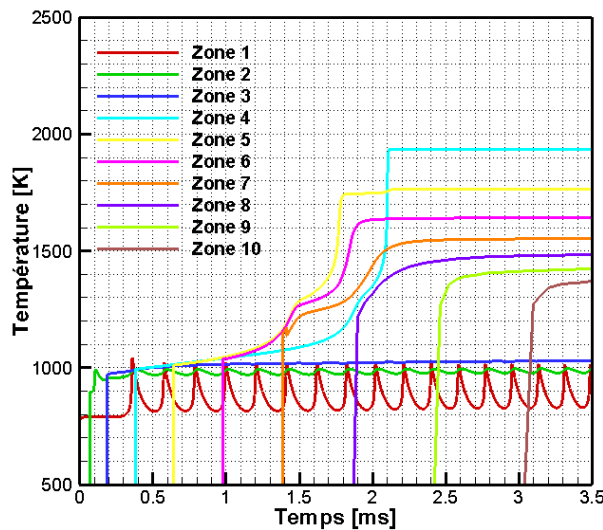


Figure 121 : Température dans les zones

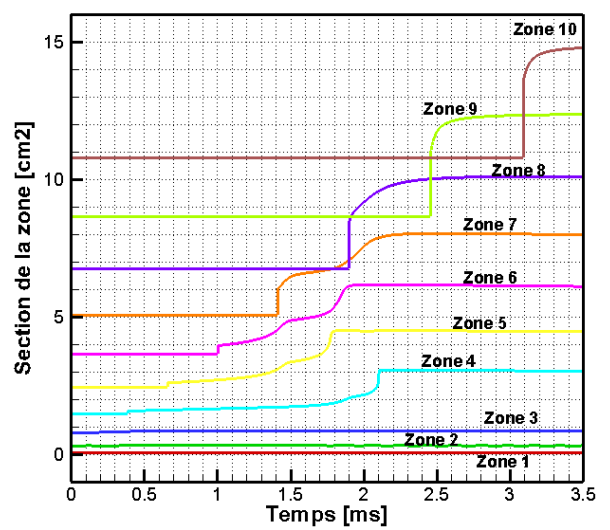


Figure 122 : Section des zones (Modèle CD, ERC)

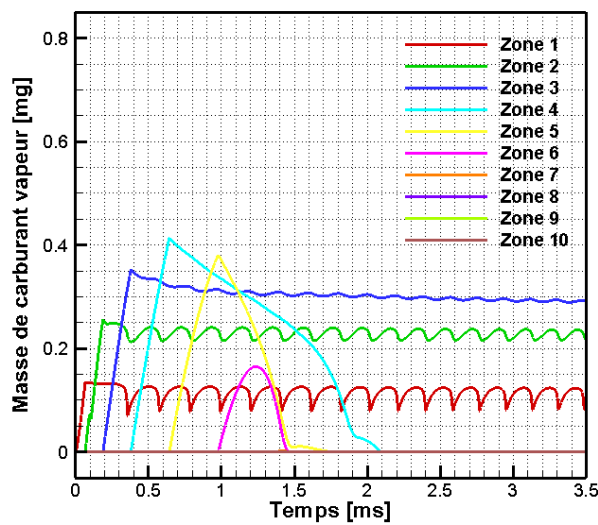


Figure 123: Masses de carburant vapeur dans les zones (Modèle CD, ERC)

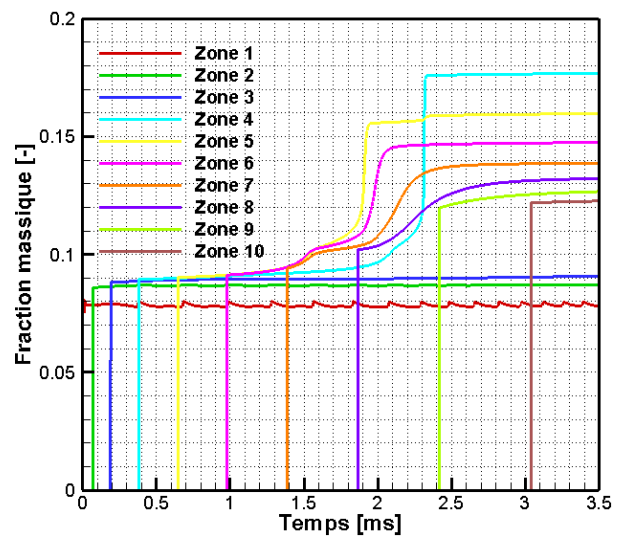


Figure 124: Fractions massiques de CO₂ (Modèle CD, ERC)

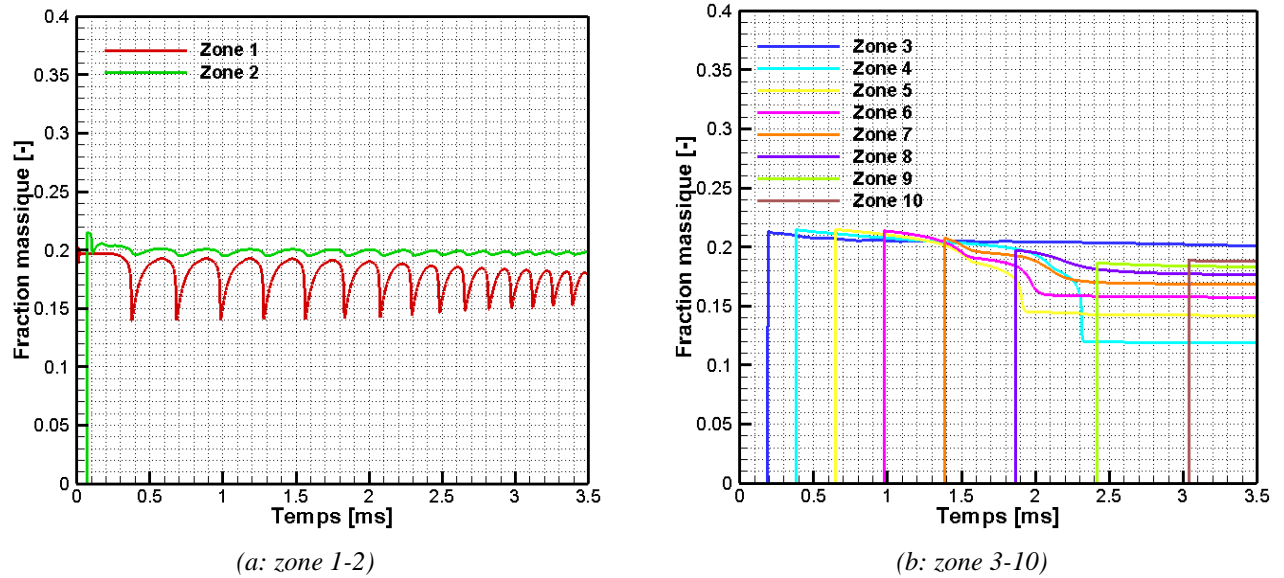


Figure 125 : Fractions massiques d'O₂ (Modèle CD, ERC)

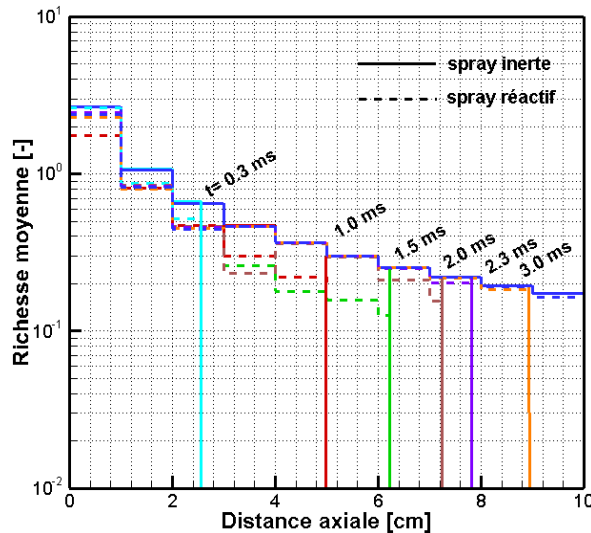


Figure 126 : Comparaison de richesse moyenne (Modèle CD, ERC)

A la lumière de ces figures, on constate que le modèle retranscrit bien qualitativement les différentes séquences qui caractérisent un spray Diesel réactif :

Le développement initial du spray (0 ~ 0,3 ms). Après le début de l'injection, le carburant liquide commence à pénétrer dans la zone 1 et s'évapore en brassant des gaz chauds. Peu après la création de la zone 2, on constate que la quasi-totalité du carburant liquide est contenue dans la zone 1, définissant ainsi une pénétration liquide maximale aux alentours de 1cm. Le carburant vapeur continue de pénétrer et se mélange avec l'air entraîné par le spray.

Des réactions réversibles dans les zones près de l'injecteur (0,3 ~ 1 ms). Selon le mécanisme de cinétique chimique simplifié ERC (décrivant 30 espèces et 54 réactions), les zones où le mélange est riche et où les températures sont inférieures à 1000K voient démarrer une succession de réactions réversibles, se traduisant par des oscillations de dégagement de chaleur et de température pendant toute l'injection. Ces oscillations ne sont pas observées avec les mécanismes de chimie plus détaillés. Il semble donc qu'il y ait ici une « oscillation numérique » qui ne traduit pas la physique réelle.

Délai d'inflammation (1 ~ 1,5 ms). Comme le montre la Figure 117, à ce stade, la pénétration du spray est entre 5 et 6 cm. A la tête du spray (zone 5 et 6), presque tout de carburant vapeur a été consommé et commence à brûler dans ces deux zones. Les températures et les sections de ces zones augmentent parallèlement. Cependant, seule une petite quantité de chaleur est libérée, les fractions de CO₂ ne changent que légèrement, et la richesse chute légèrement (par comparaison au spray inerte) indiquant que des premières réactions d'oxydation ont lieu et conduisent à des espèces chimiques intermédiaires.

Combustion pré-mélangée (1,5 ~ 2,3 ms). Les premières réactions d'oxydation exothermiques réchauffent le mélange, puis d'autres réactions exothermiques plus rapides démarrent, se traduisant par un fort dégagement de chaleur, une production rapide de CO₂, tandis que l'O₂ et le carburant vapeur sont consommés. Ceci est particulièrement visible dans les zones 4, 5, et 6. Cette phase de combustion rapide du carburant mélangé à l'air pendant le délai d'inflammation est typique d'une combustion de type pré-mélange. Les zones où la température monte rapidement voient naturellement leurs sections augmenter par dilatation.

Développement de la combustion diffusive (1,5 ~ 2,3 ms). A ce stade, la pénétration atteint les zones 7 et 8. Contrairement aux zones précédentes, la combustion démarre dès que ces zones sont créées par transport de produits de combustion incomplète depuis les zones situées en amont et par mélange avec les gaz environnants. La combustion est donc ici diffusive et est contrôlée par le mélange entre le carburant (ou les produits de combustion incomplètement oxydés) et l'oxygène.

Combustion diffusive quasi-stable (2,3 ms ~ fin de la simulation). Le spray continue de se développer et atteint une structure quasi-permanente : les deux premières zones sont trop riches et trop froides pour brûler. Une combustion de diffusion s'établit dans les zones en aval, essentiellement dans la zone 4, avec un taux de combustion constant

Cette succession des étapes de la combustion du spray de carburant se rapproche beaucoup de la description de Dec et al. Il est toutefois nécessaire de noter que le découpage du spray suivant une seule direction empêche de retrouver l'existence de la flamme de diffusion qui entoure le jet.

3.4 Etude de sensibilité aux paramètres des modèles

3.4.1 Modèle à chimie détaillée

3.4.1.1 Angle du spray

Le modèle d'angle de spray a été recalé comme décrit précédemment. L'incertitude quant à la détermination de l'angle à partir des résultats expérimentaux est de l'ordre de $\pm 2^\circ$. On souhaite tester dans ce paragraphe l'impact d'une petite erreur sur la détermination de l'angle du spray sur la combustion. La Figure 127 donne les résultats pour le cas n°2 pour trois valeurs proches d'angle de jet.

On constate que si le calcul du délai est peu impacté, la fin de combustion de pré-mélange est légèrement moins rapide lorsque l'angle est plus petit. Ces résultats soulignent l'importance de bien connaître l'angle du spray et de disposer d'un modèle réactif aux modifications des conditions ambiantes.

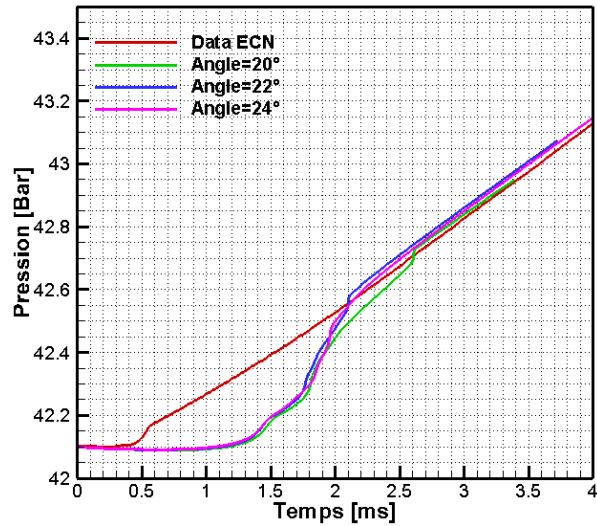


Figure 127 : Comparaison de pression pour différents angles du spray

3.4.1.2 Nombre de zones

On compare les résultats de simulation avec un nombre de zones de 5 et 10 (pénétration maximale de 10 cm). Les comparaisons sont présentées dans les figures suivantes.

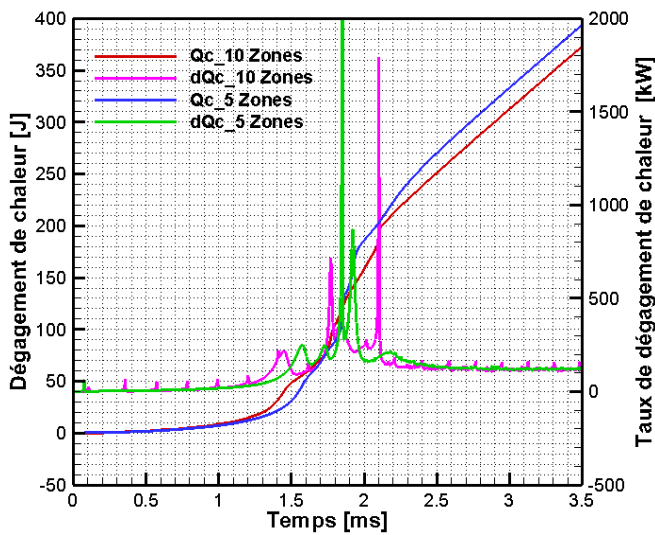


Figure 128 : Comparaison des taux de dégagement de chaleur

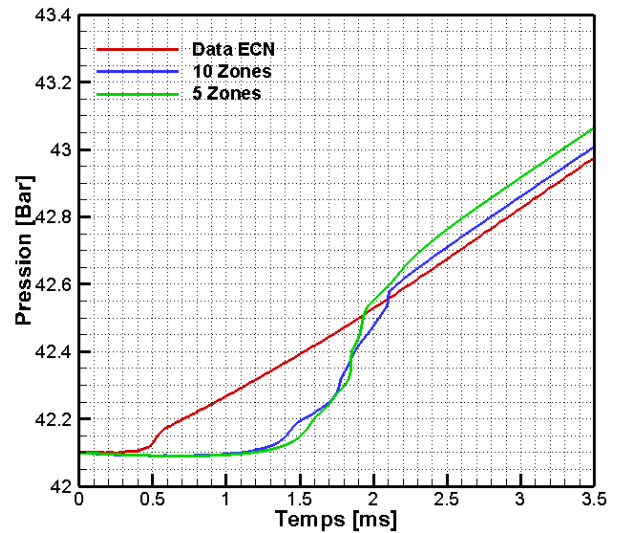


Figure 129 : Comparaison des pressions

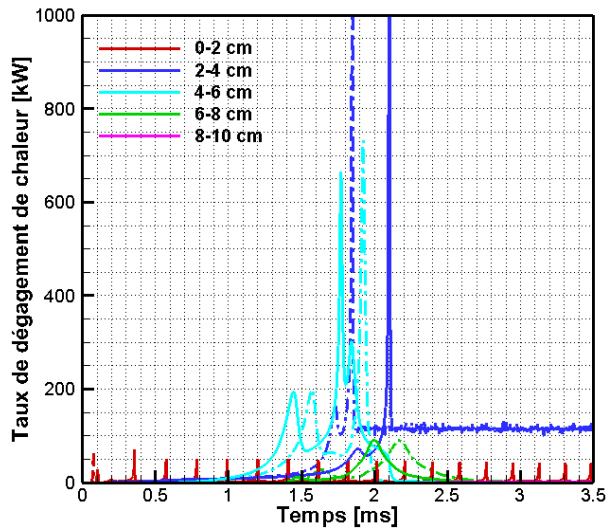


Figure 130 : Comparaison des taux de dégagement de chaleur dans les zones du spray

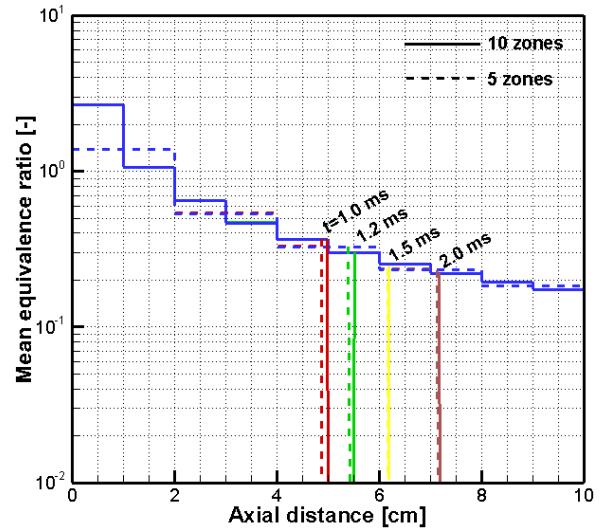


Figure 131 : Comparaison des richesses moyennes (calcul inerte)

On constate que les résultats avec 5 et 10 zones sont relativement proches pour le cas no. 2.

La Figure 128 et la Figure 130 montrent que le délai d'inflammation et le taux de combustion en pré-mélange sont légèrement impactés par le découpage. Ceci semble provenir des différences de richesse à l'endroit de l'inflammation (Figure 131). En revanche, pour ce qui est de la combustion diffuse (partie linéaire sur les courbes), les deux découpages conduisent au même taux de combustion.

3.4.1.3 Découpage des zones

Après avoir découpé le spray en un nombre plus ou moins importants de zones de longueurs identiques, on étudie ici d'autres découpages avec des longueurs de zones variables : un autre découpage consiste à avoir un volume fixe pour chaque zone plutôt qu'une longueur fixe. Le Tableau 11 donne les positions et volumes des différentes zones pour les deux découpages testés :

Zone	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
Zzones_fix	Position [cm]	1.00	2.00	3.00	4.00	5.00	6.00	7.00	8.00	9.00	10.00
	Volume [cm ³]	0.043	0.286	0.767	1.485	2.441	3.634	5.065	6.733	8.638	10.781
Vzones_fix	Position [cm]	4.68	5.88	6.72	7.39	7.96	8.45	8.89	9.29	9.66	10
	Volume [cm ³]	3.99	3.99	3.99	3.99	3.99	3.99	3.99	3.99	3.99	3.99

Tableau 11 : Deux découpages du spray

Les résultats de simulation correspondants sont donnés ci-après :

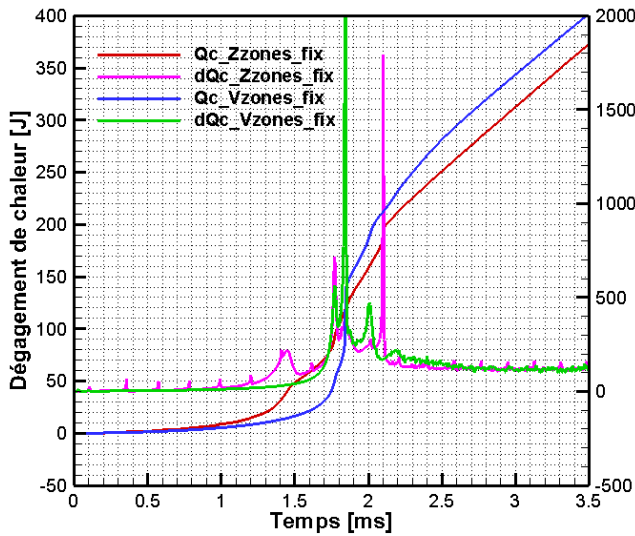


Figure 132 : Comparaison des taux de dégagement de chaleur

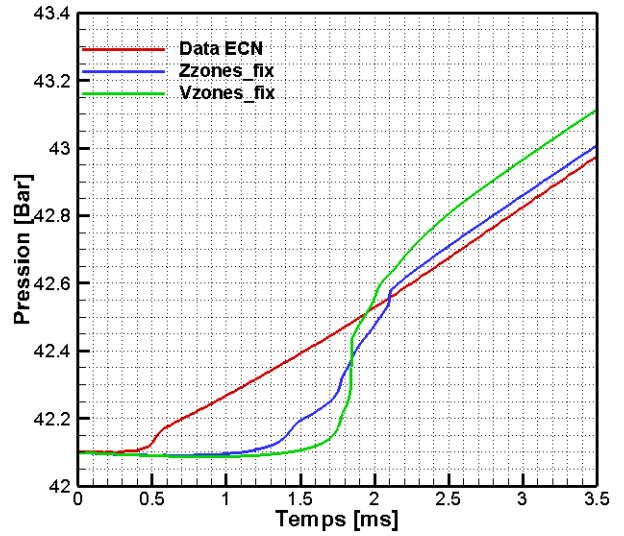


Figure 133 : Comparaison des pressions

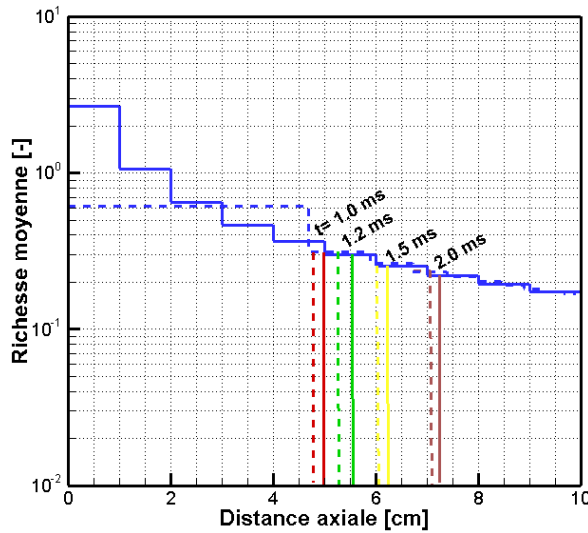


Figure 134 : Comparaison des richesses moyennes (calcul inerte)

L'objectif premier d'un découpage en zones de volumes fixes est de limiter la création de très petites zones près du nez de l'injecteur, ce qui peut potentiellement créer des problèmes numériques et un rallongement du temps de calcul. Néanmoins, à la lecture des résultats, il semble que le découpage en zones de volume fixe conduit à de moins bons résultats du fait d'un découpage trop grossier près du nez de l'injecteur, là où les gradients sont les plus élevés (notamment le gradient de richesse). Le découpage en zones de longueur fixe est donc retenu par la suite.

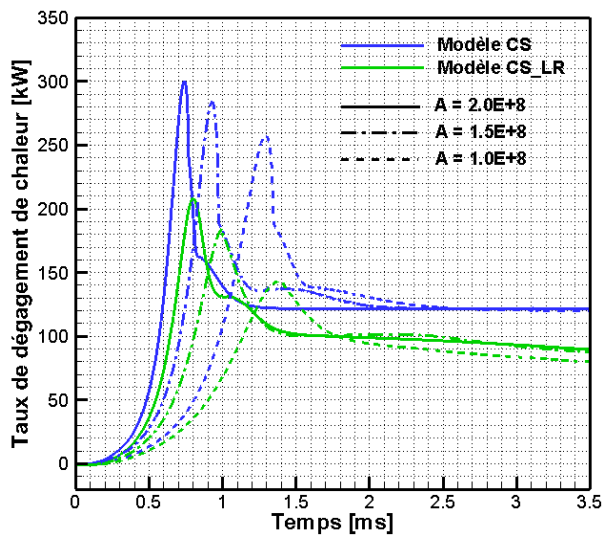
3.4.2 Modèles à chimie simplifiée CS et CS_LR

On réalise une étude de sensibilité aux paramètres du modèle de combustion à chimie simplifiée (CS) et à chimie simplifiée et limite de richesse (CS_LR). Les différentes valeurs des coefficients testées sont données dans le Tableau 12

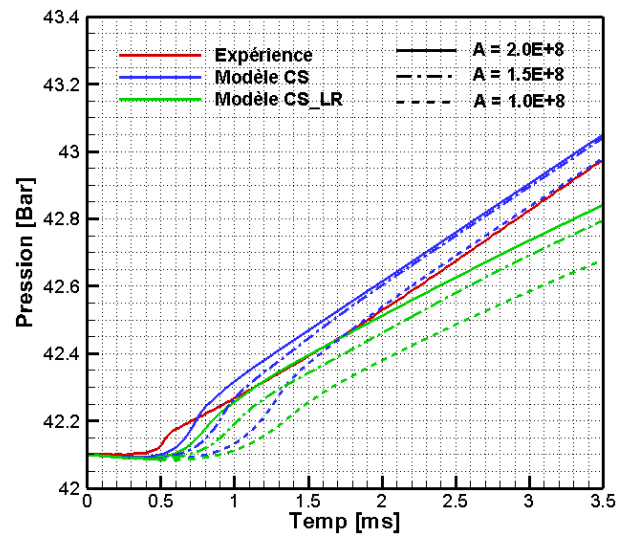
	Valeur de référence	Valeurs comparées
A_a (facteur pré-exponentiel)	2.0 E+08	1.0 E+8, 1.5 E+8
E_a (énergie d'activation) [kJ/mol]	15780	15500, 16000
Limite de richesse supérieure (Modèle CS_LR)	2	1.5, 3
Limite de richesse inférieure (Modèle CS_LR)	0.2	0.05, 0.5

Tableau 12 : Valeurs des paramètres des modèles CS et CS_LR

Les résultats correspondant sont donnés ci-après :

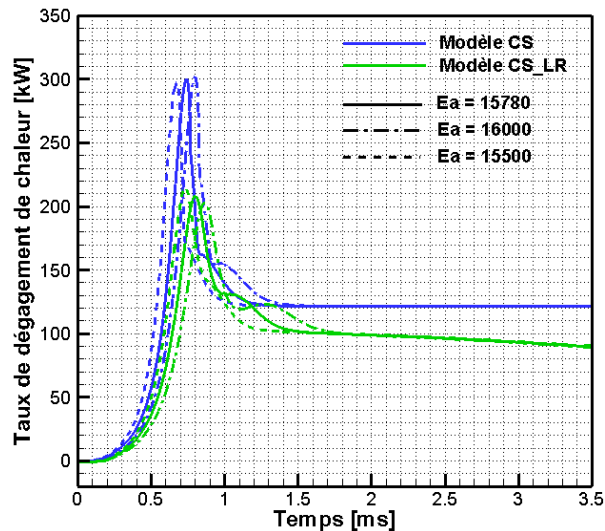


a : Comparaison des taux de dégagement de chaleur

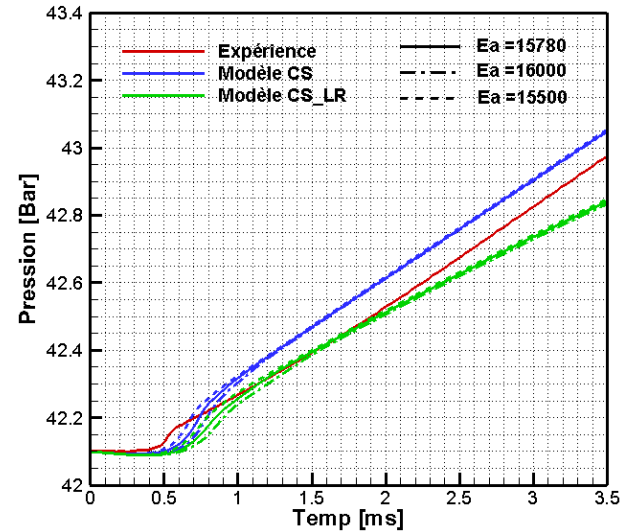


b : Comparaison des pressions

Figure 135 : Analyse de sensibilité de facteur pré-exponentiel A (Modèle CS et CS-LR)



a : Comparaison des taux de dégagement de chaleur



b : Comparaison des pressions

Figure 136 : Analyse de sensibilité d'Énergie d'activation E_a (Modèle CS et CS-LR)

Le délai d'inflammation et le taux de combustion relatif à la phase de pré-mélange sont naturellement fortement impactés par les valeurs du facteur pré-exponentiel et de l'énergie d'activation. En revanche, le taux de combustion

de diffusion (pentes des parties quasi-linéaires sur les courbes) est peu impacté puisque la chimie ne constitue plus le facteur limitant.

On étudie ensuite l'impact des valeurs limites de richesse (limites supérieure et inférieure) pour le modèle CS-LR. Trois valeurs sont testées pour les deux limites.

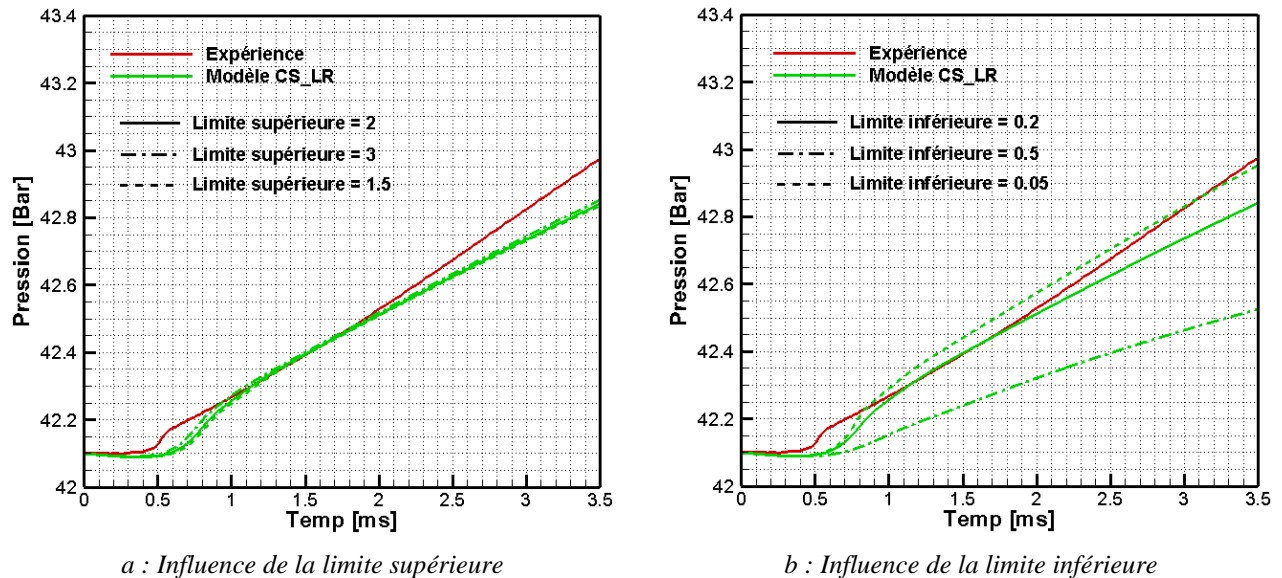


Figure 137 : Analyse de sensibilité des limites de richesse (Modèle CS-LR)

On constate une sensibilité différente aux limites inférieure et supérieure :

- La valeur de la limite supérieure (sur la plage allant de 1.5 et 3) a un impact modéré sur la combustion de pré mélange, et un impact quasi inexistant sur le combustion de diffusion. Ceci vient du fait que lorsque la zone est riche, l'élément limitant est le brassage de l'air.
- La valeur de la limite inférieure a au contraire un impact fort, à la fois en combustion de pré-mélange et en combustion de diffusion. Une réduction de la valeur de la limite inférieure conduit à une plus grande quantité de carburant disponible à chaque instant, ce qui augmente le taux de combustion (pré-mélange et diffusion).

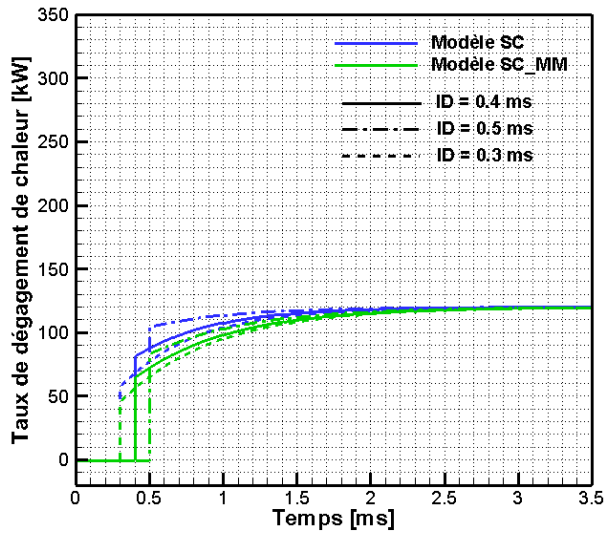
3.4.3 Modèles sans chimie CS et CS_MM

On étudie dans cette partie la sensibilité aux paramètres empiriques pour les modèles sans chimie simple (SC) et sans chimie avec micro-mélange (SC_MM).

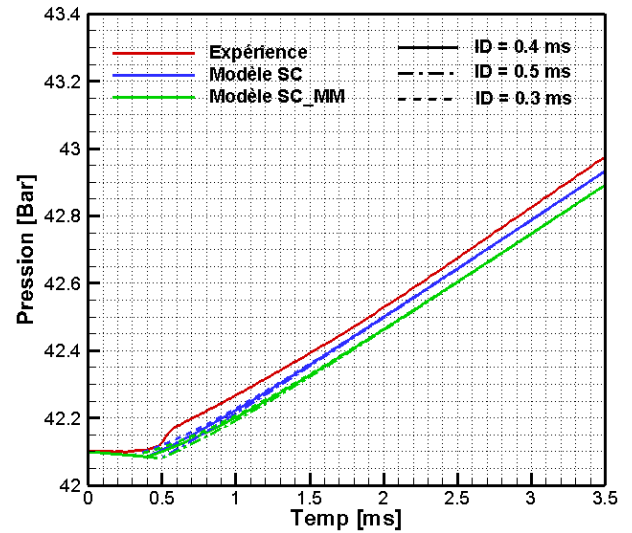
Les valeurs testées sont regroupées dans le Tableau 13. Les résultats sont présentés sur les figures ci-après.

	Valeur de référence	Valeurs comparées
ID (délai d'inflammation fixé) [ms]	0.4	0.3, 0.5
r_{reac} (Modèle SC)	2000	1000, 3000
C_{spray} (Modèle SC_MM)	100	75, 125
C_{diss} (Modèle SC_MM)	0.3	0.15, 0.45
k_{diff} (Modèle SC_MM)	10	7.5, 12.5

Tableau 13 : Valeurs des paramètres des modèles SC et SC_MM

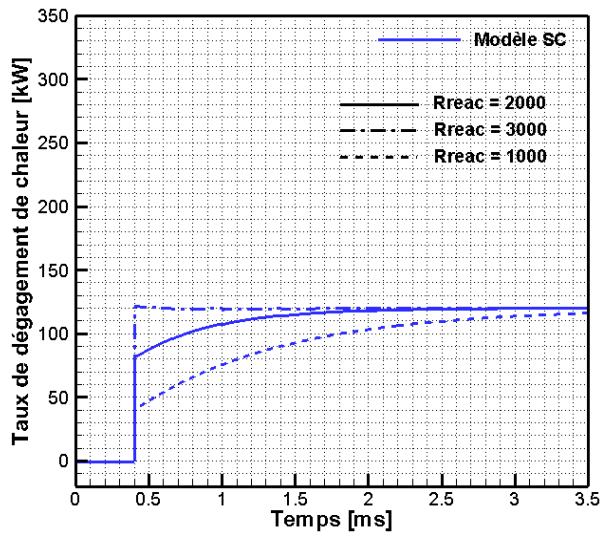


a : Comparaison des taux de dégagement de chaleur

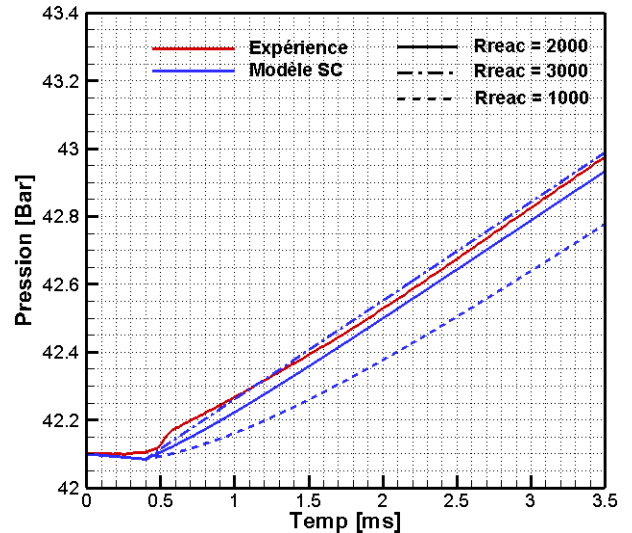


b : Comparaison des pressions

Figure 138 : Analyse de sensibilité au délai d'inflammation fixé (Modèle SC et SC_MM)



a : Comparaison des taux de dégagement de chaleur

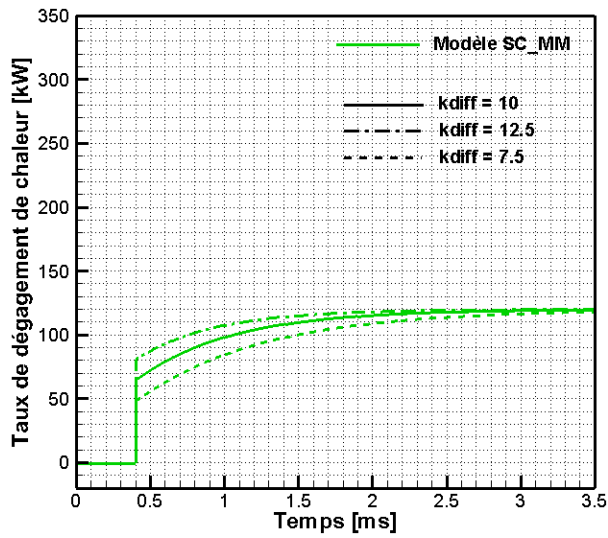


b : Comparaison des pressions

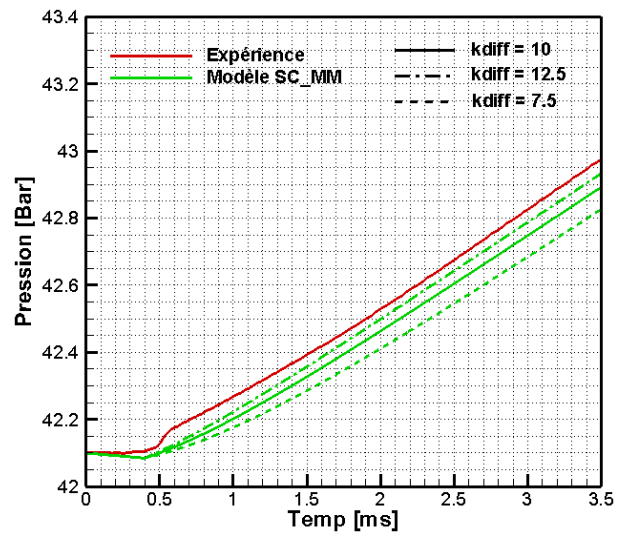
Figure 139 : Analyse de sensibilité au coefficient de réaction (Modèle SC)

Dans l'approche sans calcul de chimie et délai fixé (modèles SC et SC_MM), le délai d'inflammation impacte bien évidemment la quantité de carburant brûlant en pré mélange et le taux de combustion correspondant. La combustion de diffusion n'est en revanche pas affectée par le délai d'inflammation dans le cas d'une chambre à volume constant. Il en est de même pour le taux de réaction : celui-ci affecte le taux de combustion en régime transitoire après la fin du délai, mais ne modifie pas le taux de combustion de diffusion.

On s'intéresse ensuite aux valeurs des coefficients k_{diff} , c_{spray} , et c_{diss} , intervenant dans le modèle avec micro-mélange.

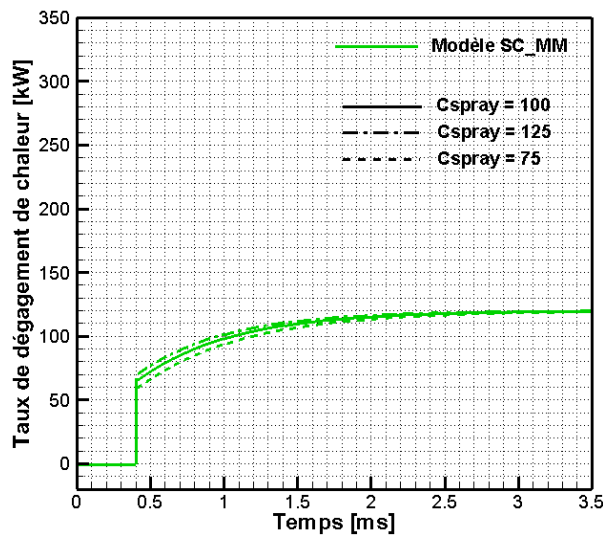


a : Comparaison des taux de dégagement de chaleur

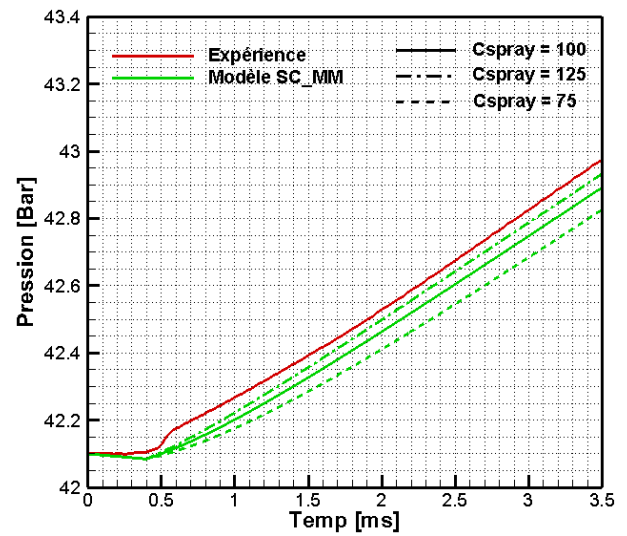


b : Comparaison des pressions

Figure 140 : Analyse de sensibilité au coefficient k_{diff} (Modèle SC_MM)

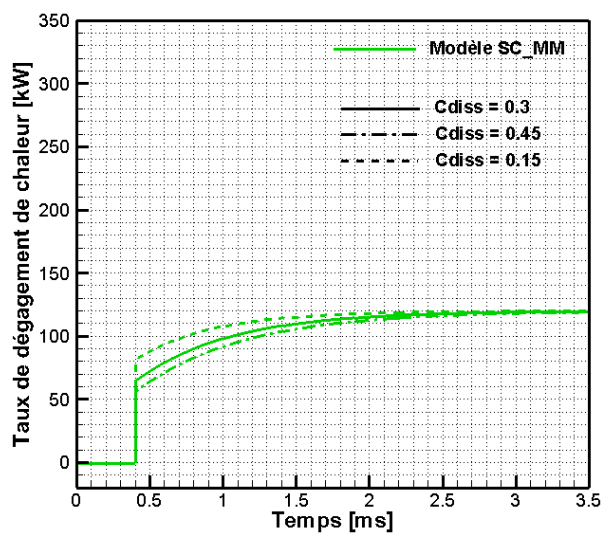


a : Comparaison des taux de dégagement de chaleur

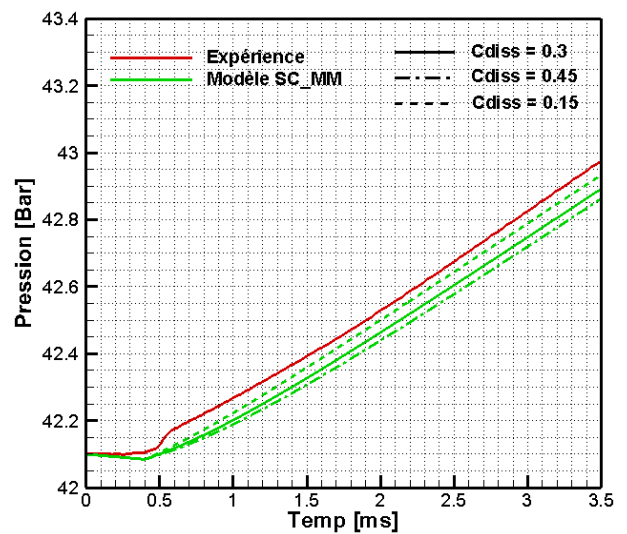


b : Comparaison des pressions

Figure 141 : Analyse de sensibilité au coefficient C_{spray} (Modèle SC_MM)



a : Comparaison des taux de dégagement de chaleur



b : Comparaison des pressions

Figure 142 : Analyse de sensibilité au coefficient C_{diss} (Modèle SC_MM)

Contrairement au cas moteur où le volume de la chambre de combustion varie, dans le cas de la bombe les coefficients du modèle de turbulence 0D n'impactent pas le taux de combustion de diffusion (représenté par la pente des parties linéaires sur les figures), mais leurs modifications respectives se traduisent uniquement par un retard plus ou moins important entre le moment où le carburant est injecté et le moment où il est brûlé (décalage vers la droite des pentes sur les figures).

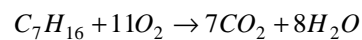
Il sera plus intéressant de réaliser à nouveau cette étude de sensibilité au chapitre suivant, dans un cas moteur. Un retardement de la combustion se traduit alors par une modification du taux de combustion car les conditions dans la chambre de combustion varient au cours du temps.

3.5 Etude de sensibilité aux paramètres physiques

3.5.1 Modèle à chimie détaillée

3.5.1.1 Température ambiante initiale

On étudie dans cette partie l'influence de la température des gaz ambiants dans l'enceinte de combustion avec le modèle à chimie détaillée (mécanisme par défaut : ERC), pour une même fraction massique d'O₂ (cas 2, 5, 6). Sur les figures qui suivent, on trace, en plus des résultats du modèle et expérimentaux, la pression théorique limite si l'oxydation du carburant suivante était infiniment rapide :



Réaction 11

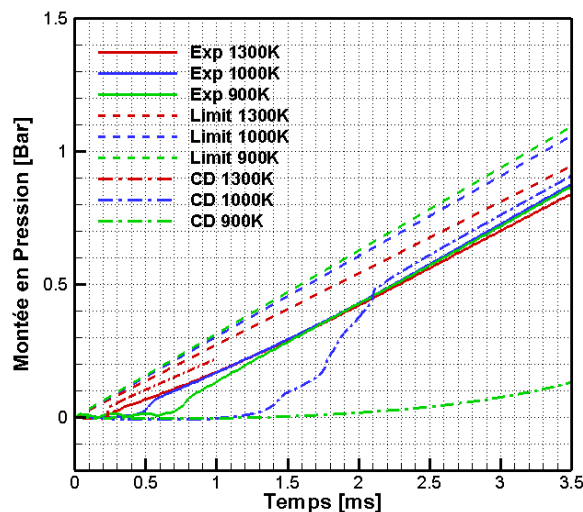


Figure 143 : Comparaison de pression pour différents température ambiante initiales

Si le modèle réagit bien du point de vue qualitatif avec une réduction du délai lors de l'augmentation de la température des gaz ambiants, il surestime très nettement le délai d'inflammation dans tous les cas. Ceci vient à minima en partie du mécanisme de cinétique chimique ERC, comme on l'a vu au paragraphe 2.4.6.1. Par ailleurs, il est possible que la non prise en compte de la diffusion radiale des espèces au sein du jet conduise à une estimation trop « grossière » des richesses locales, ce qui peut là-également expliquer les différences entre le délai estimé et le délai expérimental. En effet, dans le spray réel, dès le début de l'injection des zones pauvres et chaudes se forment à la périphérie, même lorsque la richesse moyenne reste élevée. Ces zones favorables à l'inflammation ne sont pas représentées par le modèle ce qui explique la surestimation systématique du délai. Naturellement, une mauvaise estimation du délai d'inflammation s'accompagne d'une mauvaise estimation du taux de combustion en pré-mélange.

3.5.1.2 Fraction massique d'O₂ ambiante

On étudie maintenant l'influence de la fraction massique d'O₂ dans les gaz ambiants pour une température fixée à 1000 K (cas 2, 3, 4).

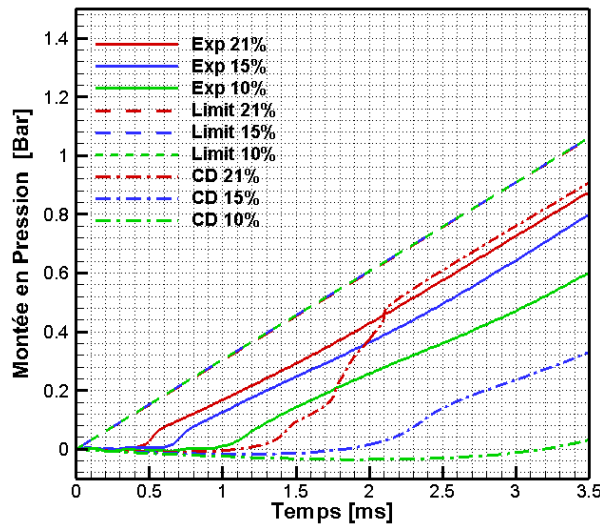


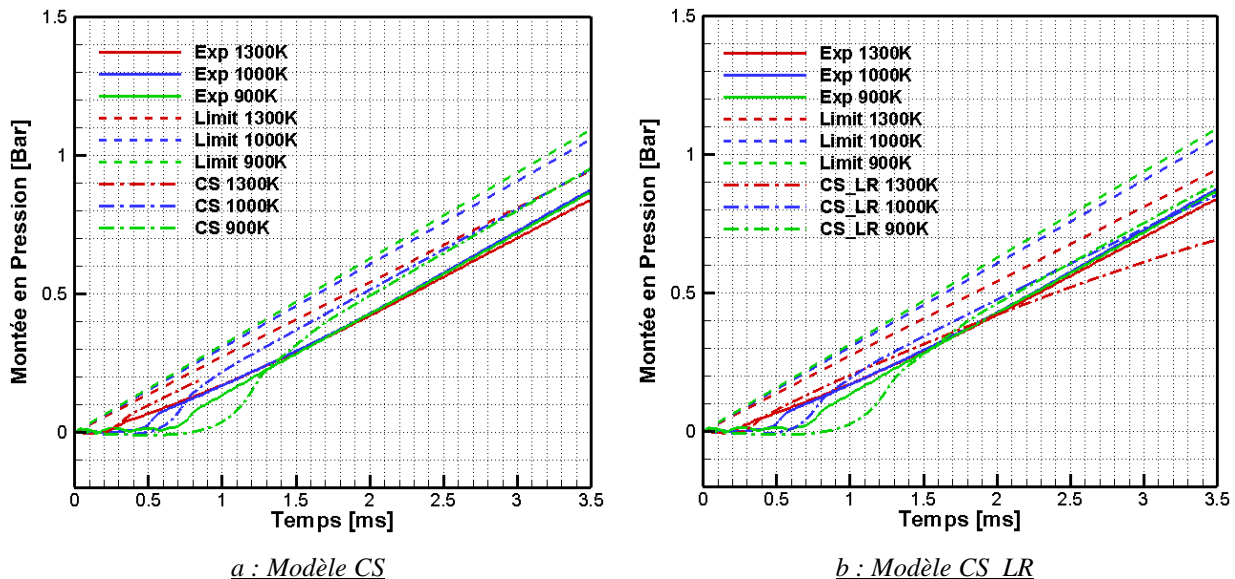
Figure 144 : Comparaison de pression pour différents fractions massiques d'O₂ ambiantes

Tout comme pour la température ambiante, le modèle retrouve bien l'évolution du délai d'inflammation et le retardement de la combustion lorsque l'on réduit la concentration en oxygène (dilution) du point de vue qualitatif. Du point de vue quantitatif, le modèle surestime largement le délai d'inflammation, avec un écart relatif avec le délai expérimental qui augmente lorsque le taux d'oxygène est réduit.

3.5.2 Modèle à chimie simplifiée (CS et CS_LR)

3.5.2.1 Température ambiante initiale

On étudie à nouveau les cas 2, 5, et 6 avec les approches à chimie simplifiée (CS et CS_LR) :



a : Modèle CS

b : Modèle CS_LR

Figure 145 : Analyse de sensibilité de température ambiante initiale (modèle à chimie simplifiée)

Le modèle à chimie simplifiée (CS) conduit à une relativement bonne estimation du délai, et retrouve bien l'évolution en fonction de la température ambiante. Une légère surestimation du délai est néanmoins observée pour la température la plus basse. Le taux de combustion pendant le régime permanent est bien retrouvé (pente des parties linéaires). Par contre, le régime permanent s'établit légèrement trop tôt (décalage vers la gauche des pentes par rapport aux relevés expérimentaux).

Le modèle avec limite de richesse permet de supprimer cet écart (parties linéaires confondues avec les relevés expérimentaux) pour les températures de 900K et 1000K. Pour la température de 1300K, le taux de combustion de diffusion est en revanche sous-estimé.

3.5.2.2 Fraction massique d'O₂ ambiante

On étudie à nouveau les cas 2, 3, et 4 avec les approches à chimie simplifiée (CS et CS_LR) :

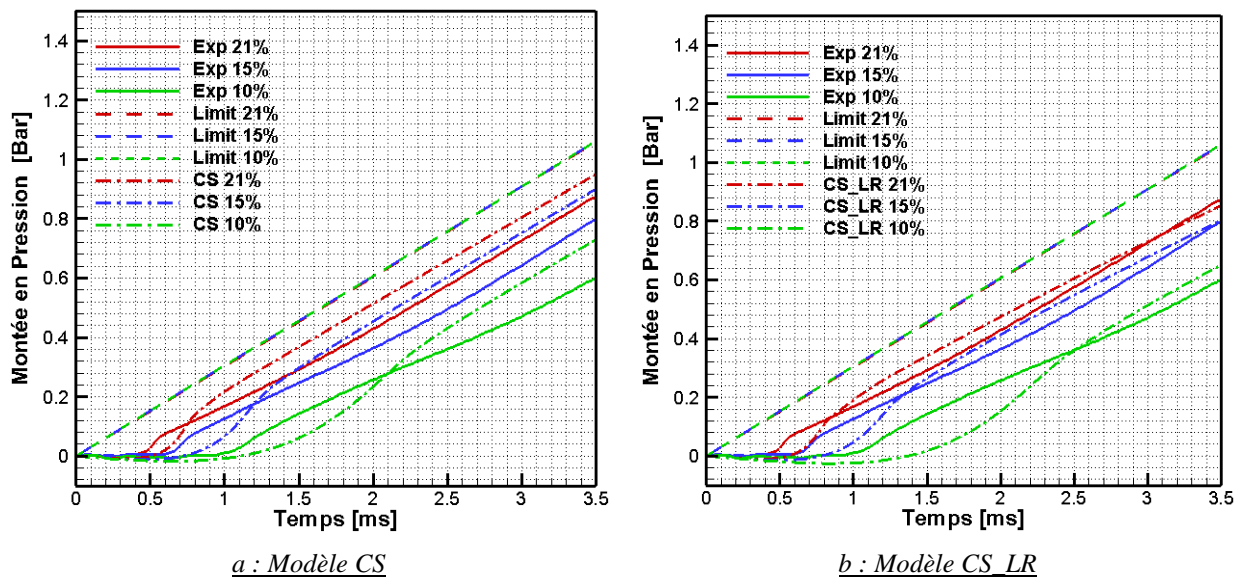


Figure 146 : Analyse de sensibilité de fraction d'O₂ initiale (modèle à chimie simplifiée)

Les mêmes résultats d'un point de vue qualitatif sont observés par comparaison avec l'influence de la température ambiante :

- Les modèles CS et CS_LR retrouvent bien l'évolution du délai d'inflammation, avec une légère surestimation du délai lorsque celui-ci est élevé.
- Le modèle CS_LR permet de s'approcher au mieux des relevés expérimentaux lorsque le régime permanent est atteint.

3.5.3 Modèle sans chimie (SC et SC_MM)

Les délais d'inflammation pour les différents cas sont fixés aux valeurs indiquées dans le Tableau 14 :

Cas de test	Délai d'inflammation [ms]
2	0.4
3	0.55
4	0.9
5	0.2
6	0.6

Tableau 14 : Délais d'inflammations pour les modèles sans chimie

3.5.3.1 Température ambiante initiale

On étudie à nouveau les cas 2, 5, et 6 avec les approches sans chimie (SC et SC_MM) :

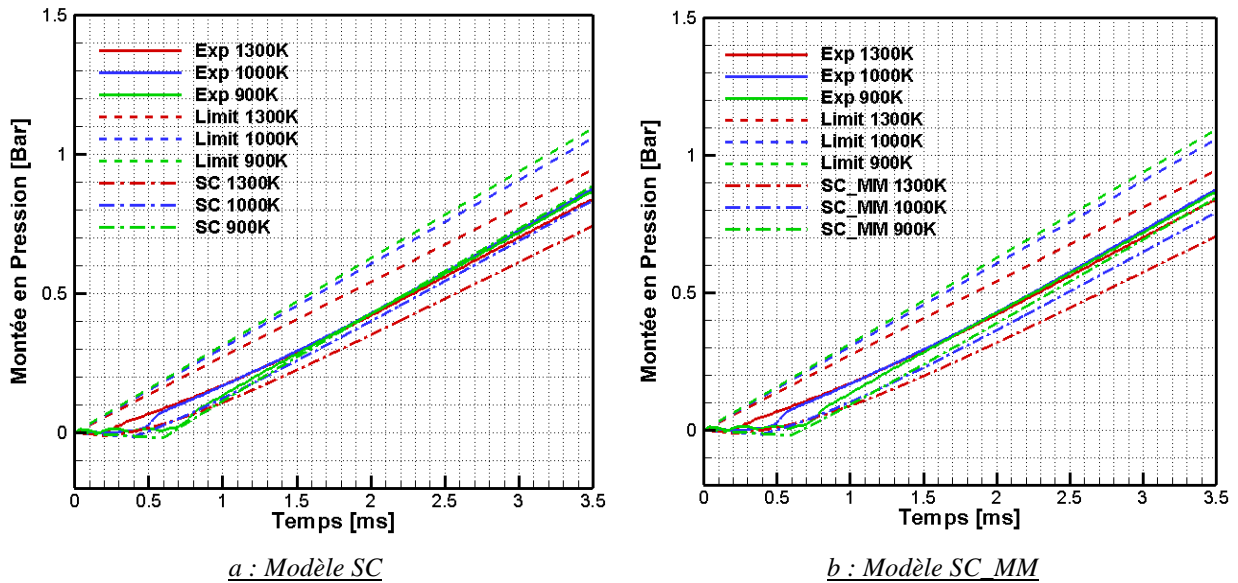


Figure 147 : Analyse de sensibilité de température ambiante initiale (modèle sans chimie)

L'approche consistant à fixer le délai est celle qui permet de se rapprocher au plus près des relevés expérimentaux, comparativement aux approches avec chimie détaillée ou simplifiée. Ceci montre qu'une mauvaise estimation du début de combustion est liée à une mauvaise estimation du délai.

Ici, le modèle sans chimie avec micro-mélange ne semble pas apporter de meilleurs résultats. L'intérêt de ce modèle est surtout de pouvoir tenir compte de la variation de la turbulence dans une chambre de combustion à volume variable et avec une injection non continue. Une analyse de ce modèle sera présentée au chapitre suivant dans le cas moteur.

3.5.3.2 Fraction massique d'O2 ambiante initiale

On étudie à nouveau les cas 2, 3, et 4 avec les approches sans chimie (SC et SC_MM) :

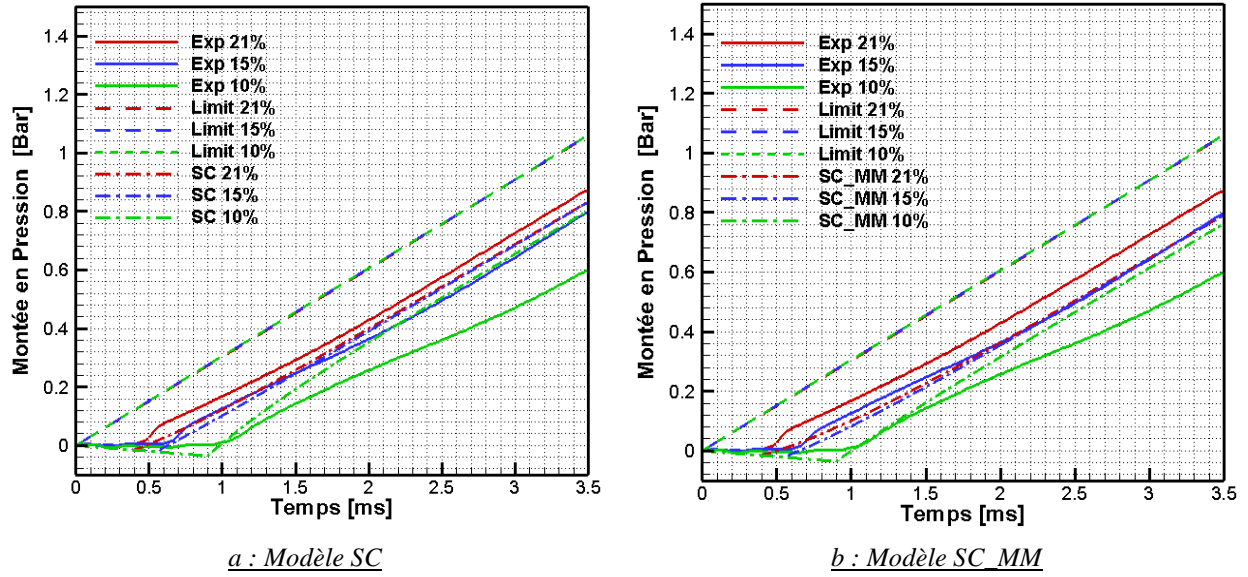


Figure 148 : Analyse de sensibilité à la fraction d' O_2 initiale (modèle sans chimie)

On retrouve sensiblement les mêmes résultats que pour l'influence de la température ambiante.

Par ailleurs, le modèle surestime le taux de combustion pour le cas où la concentration en oxygène est de 10% (représentatif d'une forte dilution par l'EGR). Ceci provient très certainement du fait que la cinétique chimique devient un facteur limitant, alors que le modèle SC, par nature, n'est pas capable de retranscrire les effets de la chimie.

Les résultats des différentes versions du modèle ont été confrontés à des résultats expérimentaux obtenus dans un réacteur à volume constant issus de la base de données ECN.

Les résultats du modèle pour un cas de référence ont d'abord été analysés. Ils montrent la capacité du modèle à décrire l'enchaînement des différentes phases de la combustion Diesel pour des cas plutôt diffusifs (modèle phénoménologique de Dec).

Une étude de sensibilité aux paramètres du modèle a ensuite été réalisée. Les conclusions principales sont résumées ci-après :

- *Les résultats du modèle CD sont très sensibles au mécanisme de cinétique chimique retenu.*
- *L'angle du spray joue un rôle fondamental sur le développement du spray, impactant fortement les taux de combustion en pré-mélange et en diffusion. Un modèle d'angle de jet semi-empirique a été implémenté dans le modèle global afin de tenir compte de la variation de l'angle du jet lors de la modification des conditions ambiantes dans la chambre de combustion.*
- *Le taux d'évaporation du carburant joue un rôle important pour des combustions à délai court. Lorsque le délai d'inflammation est plus élevé, le taux de combustion est moins sensible au taux d'évaporation.*
- *Le nombre de zones et la méthode de découpage en zones ont (malheureusement !) un impact sur l'estimation du taux de combustion avec l'approche à chimie détaillée. Une étude de sensibilité à ces paramètres sera réalisée à nouveau pour les autres approches (SC et CS) dans le cas moteur au chapitre suivant. Un découpage en zones de longueurs identiques semble plus approprié qu'un découpage en zones de volumes identiques.*

Une étude de sensibilité aux paramètres physiques que sont la température et la concentration en oxygène des gaz ambiants a ensuite été réalisée. Le modèle retrouve bien l'évolution qualitative du délai d'inflammation avec les approches CD et CS. L'approche sans chimie (délai fixé) semble indiquer que les écarts calculs-expériences pour le début de combustion proviennent essentiellement d'une mauvaise estimation du délai d'inflammation.

Chapitre 4 : Test du modèle de combustion dans le cas d'un moteur

La validation du modèle de combustion dans le cas d'un moteur est présentée dans ce chapitre.

Par rapport au modèle dans le cas d'un réacteur à volume constant, plusieurs sous modèles sont tout d'abord rajoutés : modèle d'impact aux parois, taux d'introduction, volume du cylindre variable, etc. Les valeurs de certains coefficients empiriques sont également adaptées pour le cas d'un moteur Diesel.

Dans un deuxième temps, une analyse détaillée des résultats est proposée pour un point de fonctionnement de référence avec une injection simple. A cette occasion les différentes modélisations du taux de réaction (CD, CS, CS_LR, SC, SC_MM) sont évaluées.

Des études de sensibilité aux paramètres des modèles sont ensuite effectuées. Pour le modèle à chimie détaillée, elles concernent l'ensemble des paramètres du modèle : mécanismes de cinétique chimiques, nombre de zones et méthode de découpage en zones, impact aux parois, température du carburant, valeur des paramètres des sous modèles d'évaporation, d'échanges thermiques, d'angle de spray. Pour les modèles à chimie simplifiée et sans chimie, seuls les paramètres spécifiques au calcul du taux de réaction et le nombre de zones sont étudiés.

Enfin, une étude de sensibilité aux paramètres physiques est menée. Elle est présentée en deux temps, en traitant tout d'abord les cas à injection simple, puis en abordant des cas comportant une injection pilote précédant l'injection principale. Pour cette dernière, une analyse détaillée du déroulement de la combustion est en outre effectuée dans le cas d'un point représentatif. Les paramètres physiques étudiés sont le taux d'EGR, la pression d'injection, la pression et la température d'admission et pour les injections avec pilote l'intervalle entre les injections.

4.1 Adaptation du modèle pour le cas volume variable

Pour appliquer le modèle développé dans le cas d'un moteur où le volume du cylindre est variable, plusieurs sous-modèles doivent être modifiés et adaptés à ce type de conditions.

4.1.1 Volume du cylindre

Le sous-modèle du volume d'un cylindre correspond à la cinématique classique d'un système bielle-manivelle, comme illustré sur la Figure 149. Les données géométriques suivantes sont introduites dans le modèle :

- D : Alésage
- C : Course
- l : Longueur de la bielle
- ε : Taux de compression volumétrique du moteur
- λ : Rapport entre la longueur de bielle et le rayon du maneton vilebrequin ($\lambda = 2L/C$)

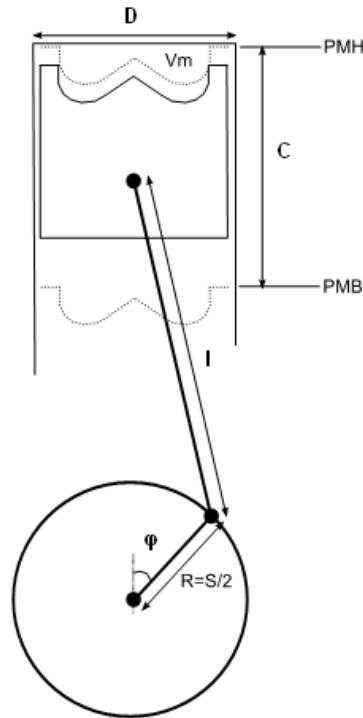


Figure 149 : Cinématique du système bielle-manivelle dans le moteur

Le taux de compression du moteur est défini comme le rapport des volumes dans le cylindre aux positions respectives du PMH (Point Mort Haut) et du PMB (Point Mort Bas) :

$$\varepsilon = \frac{V_{PMB}}{V_{PMH}} = \frac{V_m + V_s}{V_m} \quad \text{Éq. 244}$$

Où le volume de cylindrée unitaire du moteur est défini par :

$$V_s = \frac{\pi D^2}{4} C \quad \text{Éq. 245}$$

Donc le volume mort, qui est aussi le volume du cylindre quand le piston est au PMH, est calculé par :

$$V_m = \frac{V_s}{\varepsilon - 1} \quad \text{Éq. 246}$$

Et le volume du cylindre en fonction de la position angulaire du vilebrequin est :

$$V(\varphi) = V_m + \frac{V_s}{2} \left[(1 + \lambda) - \cos \varphi - \sqrt{\lambda^2 - \sin^2 \varphi} \right] \quad \text{Éq. 247}$$

La dérivée du volume de cylindre à chaque instant du temps est :

$$\frac{dV}{dt} = \omega_{rot} \frac{dV(\varphi)}{d\varphi} = \omega_{rot} \cdot \frac{V_s}{2} \sin \varphi \left(1 + \frac{\cos \varphi}{\sqrt{\lambda^2 - \sin^2 \varphi}} \right) \quad \text{Éq. 248}$$

Ici, ω_{rot} est la vitesse angulaire du moteur.

4.1.2 Modèle de section des zones

Comme il est déjà mentionné dans le chapitre 2.4, quand le volume de chambre de combustion est fixé, la dérivée du volume d'une zone du spray et la dérivée de la section de cette zone sont données en fonction des cas, inerte ou réactif.

Pour le cas inerte :

$$dV_i = A_i dZ \quad \text{Éq. 249}$$

$$dA_i = 0 \quad \text{Éq. 250}$$

Pour le cas réactif :

$$dV_i = A_{reac,i} dZ_i + Z_i dA_{reac,i} \quad \text{Éq. 251}$$

$$dA_{reac,i} = \frac{A_{reac,i}^t - A_{reac,i}^{t-1}}{\Delta t} = dA_{bru,i} \quad \text{Éq. 252}$$

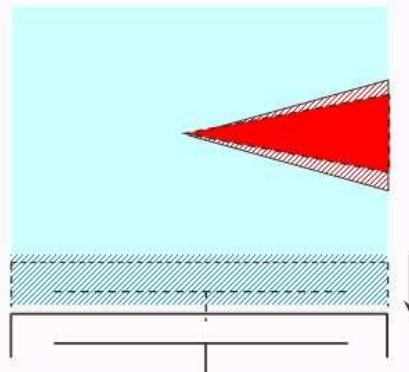


Figure 150 : Représentation schématique de l'évolution de la section et du volume des zones du spray en fonction du mouvement du piston

Lorsque le volume du cylindre est variable, pour le cas inerte, on suppose que la dérivée du volume d'une zone du spray est constituée par deux termes : un premier terme lié à l'évolution axiale du spray (comme dans le cas d'une chambre à volume constant) et un autre terme lié à la contraction ou dilatation radiale du spray engendrée par le mouvement du piston (Figure 150), qui est caractérisée par l'évolution de la section, évaluée comme suit :

$$dA_{pis,i} = \frac{dV_{tot}}{V_{tot}} \cdot A_i \quad \text{Éq. 253}$$

Ainsi, la dérivée du volume de la zone et la dérivée de la section de la zone deviennent :

$$dV_i = A_i dZ_i + Z_i dA_{pis,i} \quad \text{Éq. 254}$$

$$dA_i = dA_{pis,i} \quad \text{Éq. 255}$$

Enfin, pour le cas réactif avec une chambre à volume variable, les équations générales pour calculer la dérivée du volume de la zone et la dérivée de la section de la zone ne changent pas par rapport au cas de la chambre à volume constant. Cependant, la variation de la section de la zone n'est plus alors est seulement causée par les variations de densité liées au dégagement de chaleur de la combustion, mais aussi par la variation de volume de la chambre liée au mouvement du piston :

$$dA_{\text{reac},i} = \frac{A_{\text{reac},i}^t - A_{\text{reac},i}^{t-1}}{\Delta t} = dA_{\text{bru},i} + dA_{\text{pis},i} \quad \text{Éq. 256}$$

4.1.3 Modèle de pertes thermiques

L'utilisation d'une chambre de combustion à volume variable ne change pas l'équation générale d'évaluation des pertes thermiques par convection déjà présentée dans le Chapitre 2.

$$dQ_p = h_{\text{ech}} A (T - T_p) \quad \text{Éq. 257}$$

Pour la détermination du coefficient h , il existe nombre de modèles empiriques en fonction des types de moteurs et des conditions dans le cylindre. Parmi eux, le modèle de Woschini [175][176] est très couramment utilisé, ou :

$$h_{\text{ech}} = C_3 D^{-0.2} P^{0.8} T^{-0.53} \left[C_1 c_m^2 + C_2 \frac{V_s T_r}{P_r V_r} (P - P_0) \right]^{0.8} \quad \text{Éq. 258}$$

- D représente l'alésage du moteur.
- P représente la pression dans le cylindre.
- T représente la température dans le cylindre.
- c_m représente la vitesse moyenne du piston. Celle-ci est calculée à partir de la course C et du régime de rotation N du moteur :

$$c_m = \frac{2NC}{60} \quad \text{Éq. 259}$$

- V_s est le volume de cylindre unitaire du moteur.
- T_r , P_r et V_r représente respectivement la température, la pression et le volume à un état de référence.
- P_0 représente la pression cylindre pour un cycle sans combustion.
- C_1 et C_2 sont des paramètres d'ajustement du modèle. Lorsque les soupapes sont fermées, Woschni propose $C_1 = 2.28$ et $C_2 = 3.24 \cdot 10^{-3}$.

Il existe plusieurs valeurs dans la littérature pour le coefficient C_3 qui doit être considéré comme un paramètre d'ajustement du modèle. Il doit être systématiquement recalé en fonction des unités des paramètres et de la géométrie du moteur.

4.1.4 Modèle d'impact aux parois

Les injecteurs Diesel présentent un « angle de nappe » par rapport à l'horizontale (ou au plan de la culasse), de façon à injecter le carburant dans le bol du piston et éviter ainsi le mouillage des parois du cylindre. Cependant pour éviter une approche « quasi dimensionnelle » qui requiert une description détaillée de la géométrie du bol et une évaluation précise de la localisation du spray, intégrant les effets de l'aérodynamique interne (swirl,...) et qui semble incohérente avec l'hypothèse de jet libre, une approche simplifiée est adoptée : la pénétration maximale avant impact sur une paroi est choisie comme égale au rayon du cylindre. Cette hypothèse semble raisonnable

puisque d'un coté le rayon du bol est inférieur au rayon du cylindre, mais, d'un autre côté, le swirl et l'angle de nappe ont tendance à retarder l'impact sur une paroi.

Sachant que, d'une part, il est courant que la carburant s'enflamme après l'impact du spray sur les parois et que, d'autre part, dans un cas moteur typique un calcul de type jet libre conduit assez rapidement à un entraînement de tout les gaz ambiants présents dans la chambre, il apparaît nécessaire de disposer d'un sous modèle décrivant l'évolution du spray après son impact sur une paroi.

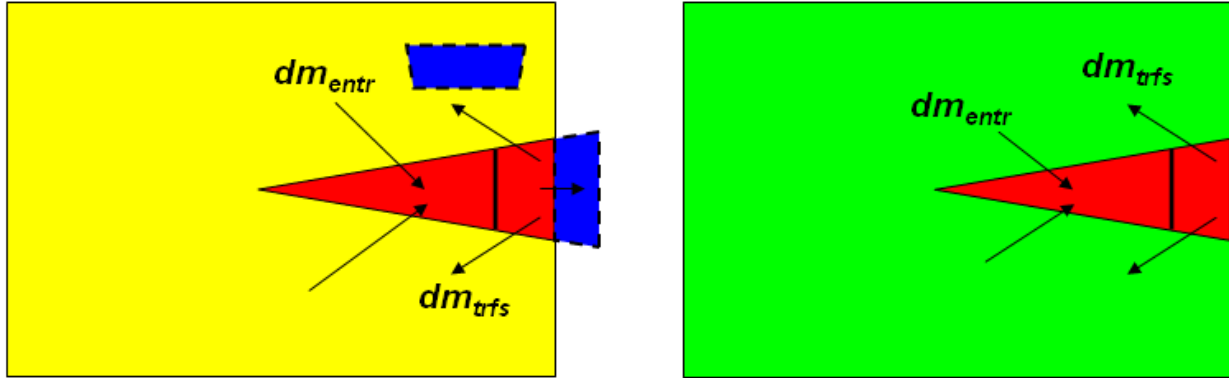


Figure 151 : Représentation schématique du modèle d'impact sur les parois

La Figure 151 montre une représentation schématique du sous modèle retenu. Quand le spray touche une paroi, on suppose que la masse sortant de la dernière zone du spray (en couleur bleu) ré-entre dans la zone ambiante (en couleur jaune), et que les espèces des ces deux partie se mélangent infiniment rapidement. Après quoi, le spray continue d'entraîner de la masse en provenance de la zone ambiante (en couleur verte) qui reçoit aussi en continue la masse sortant à l'extrémité (tête) du spray. L'équation de bilan de masse dans la zone ambiante est donc modifiée :

$$dm_{trsf,in,amb} = Nnoz \cdot dm_{trsf,out,nz} \quad \text{Éq. 260}$$

$$dm_{trsf,amb} = dm_{trsf,in,amb} - dm_{trsf,out,amb} = Nnoz \cdot \left(dm_{trsf,out,nz} - \sum_{i=1}^{nz} dm_{entr,i} \right) \quad \text{Éq. 261}$$

Où $Nnoz$ est le nombre d'injecteurs.

Par ailleurs, pour le calcul de la section des zones du spray, avant que le spray ne touche une paroi, on suppose que la masse d'une zone dans le cas réactif est identique à la masse de la zone dans le cas inerte pour une certaine pénétration (Voir chapitre 2, 2.4.3). Après l'impact, la pénétration atteint sa valeur maximale. Par conséquent, elle ne peut plus servir de référence pour relier le cas réactif au cas inerte. Le temps écoulé après l'impact est donc choisi comme référence après l'impact aux parois.

4.1.5 Modèle de taux d'introduction du carburant

Le sous-modèle de taux d'introduction du carburant avec une injection simple est déjà présenté dans le chapitre 3.6.4.1. Comme le modèle sera également testé avec une multi-injection, des corrélations sont ajoutées pour modéliser une injection pilote, le taux d'introduction étant alors présumé triangulaire. Les calculs des pentes BCp, CDp en fonction de la pression de rampe commune selon Maiboom et al.[89] sont :

$$aBCp = 140.1701 \times P_{rail} - 16033.27 \quad \text{Éq. 262}$$

$$aCDp = 153.7448 \times P_{rail} + 17382.63 \quad \text{Éq. 263}$$

Avec la pression de rampe commune en bar, et des pentes en g/s^2 . Le point Cp est tel que le débit atteint sa valeur maximale, définie comme

$$\dot{Q}C_p = \sqrt{\frac{2 \times m_{inj,p}}{\frac{1}{aBC_p} + \frac{1}{aCD_p}}} \quad \text{Éq. 264}$$

4.1.6 Modèle d'angle du spray

Le modèle d'angle du spray utilisé pour la combustion dans une chambre à volume constant est repris ici. Cependant pour évaluer la valeur du coefficient C_{jet} , il n'est pas possible d'accéder à la valeur expérimentale de l'angle ou de la pénétration dans le cas d'un moteur opaque. Aussi a-t-on recours à des données de pénétration issues d'un moteur à accès optique, voisin du moteur opaque utilisé pour cette partie (une description détaillée est disponible dans [89]).

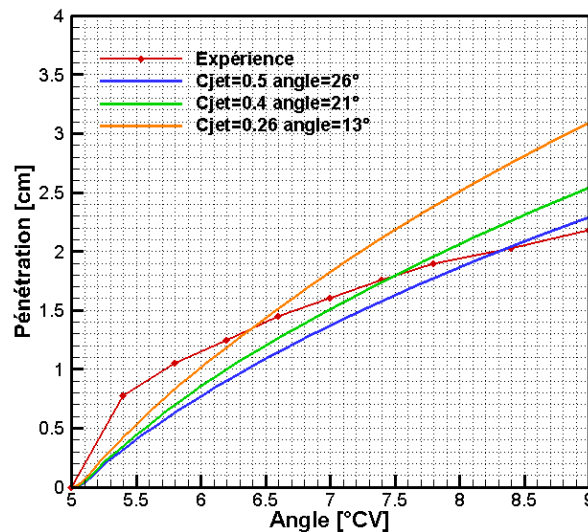


Figure 152 : Comparaison des pénétrations calculées et expérimentale

Sur la Figure 152, 4 degrés après le début de l'injection, les simulations donnent des pénétrations plus grandes que l'expérience. Les visualisations expérimentales indiquent un angle de spray de l'ordre de 13°. De plus, compte tenu du mode d'évaluation, la pénétration expérimentale observée est en réalité inférieure à la pénétration réelle. Quand $C_{jet} = 0.26$, même si la pénétration est surévaluée à 9 degrés, elle est plus proche de l'expérience au début de l'injection. Par conséquent, la valeur de C_{jet} est prise à 0.26 pour les calculs avec chimie simplifiée (CS) et sans chimie (SC). En revanche les calculs avec chimie détaillée (CD) utilisent une valeur supérieure pour C_{jet} ($C_{jet}=0.50$), qui conduit à une pénétration moins rapide et un entraînement de gaz ambiants par le spray plus important.

4.2 Données expérimentales et de simulation

4.2.1 Moteur

Le moteur qui a servi pour l'obtention des résultats expérimentaux exploités dans ce chapitre est un moteur Diesel automobile à injection directe suralimenté, dont les principales caractéristiques sont regroupées dans le Tableau 15. Il est installé sur un des bancs d'essais du Laboratoire. Une description plus exhaustive, incluant notamment les moyens de mesure utilisés est disponible dans [89].

Cylindrée [cm ³]	1998
Niveau de dépollution	EURO 4
Architecture	4 cylindres en ligne
Puissance maximale / régime	100 kW à 4000 tr/min
Couple maximal / régime	320 Nm à 1750 tr/min
Suralimentation	Turbine à géométrie variable refroidisseur d'air de suralimentation
Système EGR	EGR HP/BP refroidi
Système d'injection	Rampe commune, CR2, piezo électrique

Tableau 15 : Principales caractéristiques du moteur utilisé pour la validation

4.2.2 Chambre de combustion

Le Tableau 16 montre les principales caractéristiques géométriques de la chambre de combustion. Le swirl est mentionné pour information, puisque il n'est pas pris en compte dans la modélisation.

Alésage [mm]	85
Course [mm]	88
Diamètre du bol [mm]	
profondeur du bol [mm]	
Rapport volumétrique	18
Nombre de soupapes par cylindre	4
Swirl	2.5

Tableau 16 : Caractéristiques géométriques de la chambre de combustion

La Figure 153 est une photo d'un piston. Le bol est de forme arrondie, mais pour en calculer la surface inférieure il est assimilé à un cylindre. En conséquence, la surface intérieure de la chambre A_{ch} est définie par :

$$A_{ch} = 2 \times A_{pis} + A_{bol} + A_{cyl} = 2 \times \frac{\pi D^2}{4} + \pi H_{bol} D_{bol} + \pi D X_{pis} \quad \text{Éq. 265}$$

Où X_{pis} est la position du haut du piston, définie par :

$$X_{pis} = \frac{C}{2} \cdot \left[1 - \cos \varphi + \lambda \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \varphi}{\lambda^2}} \right] \quad \text{Éq. 266}$$



Figure 153 : photo d'un piston du moteur de validation

4.2.3 Système d'injection

Les caractéristiques des injecteurs sont données dans le Tableau 17. En réalité, même si leurs valeurs changent peu, les coefficients Ca et Cd varient selon les points de fonctionnement (régime, charge, conditions thermodynamiques dans le cylindre). Dans le modèle, ces deux coefficients sont supposés constants.

Pression d'injection maximale (bar)	1600 bar
Nombre de trous de l'injecteur	6
Diamètre des trous [μm]	150
Ca	0.85
Cd	0.679464
Délai d'injection [μs]	270

Tableau 17 : Caractéristiques du système d'injection et de l'injecteur

4.2.4 Composition initiale des gaz enfermés dans le cylindre

Pour calculer la composition initiale des gaz enfermés dans la chambre de combustion, il faut connaître la masse totale des gaz enfermés. Cette dernière comprend trois composantes distinctes : la masse d'air, la masse d'EGR et la masse des gaz résiduels :

$$m_{total} = m_{air} + m_{EGR} + m_{res} \quad \text{Éq. 267}$$

En l'absence de croisement des soupapes significatif, la masse d'air peut être obtenue facilement par un débitmètre situé en entrée du moteur. Pour évaluer la masse d'EGR et la masse des gaz résiduels, il est tout d'abord nécessaire d'écrire l'équation bilan de la combustion complète de carburant :

$$\begin{aligned} & C_{\zeta} H_{\eta} + \left(\zeta + \frac{\eta}{4} \right) \cdot \frac{\lambda_{AF}}{0.21} (0.79 \cdot N_2 + 0.21 \cdot O_2) \\ & + x \left[\zeta \cdot CO_2 + \frac{\eta}{2} \cdot H_2O + \frac{0.79}{0.21} \lambda_{AF} \cdot \left(\zeta + \frac{\eta}{4} \right) \cdot N_2 + (\lambda_{AF} - 1) \cdot \left(\zeta + \frac{\eta}{4} \right) \cdot O_2 \right] \quad \text{Éq. 268} \\ \Rightarrow & (1+x) \left[\zeta \cdot CO_2 + \frac{\eta}{2} \cdot H_2O + \frac{0.79}{0.21} \lambda_{AF} \cdot \left(\zeta + \frac{\eta}{4} \right) \cdot N_2 + (\lambda_{AF} - 1) \cdot \left(\zeta + \frac{\eta}{4} \right) \cdot O_2 \right] \end{aligned}$$

Le taux d'EGR est défini comme le rapport entre les concentrations en CO_2 en entrée et à l'échappement du moteur. Il est lié au paramètre x par :

$$X_{EGR} = 100 \cdot \frac{X_{CO_2-a}}{X_{CO_2-e}} = 100 \cdot \frac{x \left[\zeta + \frac{0.79}{0.21} \lambda_{AF} \cdot \left(\zeta + \frac{\eta}{4} \right) + (\lambda_{AF} - 1) \cdot \left(\zeta + \frac{\eta}{4} \right) \right]}{x \cdot \zeta + (x+1) \frac{0.79}{0.21} \lambda_{AF} \cdot \left(\zeta + \frac{\eta}{4} \right) + [x(\lambda_{AF} - 1) + \lambda_{AF}] \cdot \left(\zeta + \frac{\eta}{4} \right)} \quad \text{Éq. 269}$$

où les concentrations en CO_2 sont des concentrations sèches, mesurées. Le paramètre x peut être calculé à partir de l'équation ci-dessus. Pour calculer la masse d'EGR, on utilise ensuite l'approche de Keenan et Kaye [177], qui considère que le mélange des gaz récirculés est la somme d'une masse équivalente d'air $m_{air_EGR_kk}$ (au sens de Keenan et Kaye) et d'une masse équivalente de carburant $m_{f_egr_kk}$. Celles-ci sont calculées par :

$$m_{air_EGR_kk} = x \cdot m_{air} \quad \text{Éq. 270}$$

$$m_{f_EGR_kk} = x \cdot m_{f,bru} \quad \text{Éq. 271}$$

$$m_{EGR} = m_{air_EGR_kk} + m_{f_EGR_kk} = x(m_{air} + m_{f,bru}) \quad \text{Éq. 272}$$

Où $m_{f,bru}$ est la consommation de carburant du moteur.

Pour calculer la masse des gaz résiduels, la méthode simplifiée proposée par Maiboom est utilisée [89]. Il s'agit d'une évaluation en 2 étapes. Un premier calcul grossier permet d'obtenir la masse des gaz résiduels en appliquant la loi des gaz parfaits au PMH, où la pression P_3 et la température T_3 à la sortie moteur sont mesurés expérimentalement.

$$m_{res_1} = \frac{P_3 \cdot V_s \cdot \bar{W}}{R \cdot T_3} \quad \text{Éq. 273}$$

Pour la 2^{ème} étape, l'équation des gaz parfaits est appliqué à la fin de l'admission, et une nouvelle température moyenne T_{res} est calculée en supposant que la pression dans le cylindre est égale à la pression moyenne à l'admission P_2'' . La masse des gaz résiduels est alors recalculée en réappliquant la loi des gaz parfaits :

$$T_{res} = \frac{P_2'' \cdot \varepsilon \cdot V_s \cdot \bar{W}}{R \cdot (m_{air} + m_{EGR} + m_{res_1})} \quad \text{Éq. 274}$$

$$m_{res_2} = m_{res} = \frac{P_2'' \cdot V_s \cdot \bar{W}}{R \cdot T_{res}} \quad \text{Éq. 275}$$

Les gaz enfermés dans le cylindre sont supposés être initialement constitués de quatre espèces: N_2 , O_2 , CO_2 , H_2O . Les compositions des gaz résiduels et de l'EGR sont supposées identiques. Comme les analyseurs utilisés ici mesurent des concentrations volumiques sèches à l'échappement, il est nécessaire de convertir en concentration massique humide. Tout d'abord, selon le rapport volumique de CO_2 et H_2O dans les gaz de combustion, la concentration volumique d' H_2O est :

$$X_{H_2O,e} = \left(\frac{\eta}{2 \cdot \zeta} \right) \cdot [CO_2] \quad \text{Éq. 276}$$

Les concentrations volumiques humides pour les autres espèces:

$$X_{CO_2,e} = \frac{1}{\frac{\eta}{2 \cdot \zeta} + \frac{1}{[CO_2]}} \quad \text{Éq. 277}$$

$$X_{O_2,e} = X_{CO_2,e} \cdot \frac{[O_2]}{[CO_2]} \quad \text{Éq. 278}$$

$$X_{N_2,e} = 1 - X_{O_2,e} - X_{CO_2,e} - X_{H_2O,e} \quad \text{Éq. 279}$$

Où $[CO_2]$ et $[O_2]$ sont les fractions volumiques sèches de CO_2 et d' O_2

Les concentrations massiques humides peuvent alors être calculées par :

$$Y_{k,e} = \frac{X_{k,e} W_{k,e}}{\sum_{j=1}^K X_{j,e} W_{j,e}} = \frac{X_{k,e} W_{k,e}}{\bar{W}_e} \quad \text{Éq. 280}$$

La composition d'air en concentrations massiques humides $Y_{k,a}$ est donnée dans le Tableau 18.

O_2 [%]	76.69
N_2 [%]	22.72
CO_2 [%]	0.40
H_2O [%]	0.19

Tableau 18 : Fractions massiques des espèces dans l'air

Finalement, la composition moyenne des gaz enfermés dans la chambre de combustion est définie par :

$$Y_k = \frac{Y_{k,e} \cdot (m_{EGR} + m_{res}) + Y_{k,a} \cdot m_{air}}{m_{total}}$$

Éq. 281

4.2.5 Carburant

Les essais sur moteurs utilisés dans la suite de ce chapitre ont été effectués avec du gazole standard. Comme il s'agit d'un mélange des chaînes de carbone qui contiennent généralement entre 8 et 21 atomes de carbone par molécule, il n'y a pas un composant unique. Le n-heptane est une molécule qui est souvent utilisée comme un substitut du gazole. En effet, elle possède un indice de cétane comparable à celui du gazole européen (et japonais). Les propriétés respectives du gazole(Diesel) et du n-heptane sont rappelées dans le Tableau 19.

Variables	Unité	Gazole	N-heptane
Indice de Cétane	[-]	56	56
Point d'ébullition	[K]	483-634	372
Pouvoir Calorifique Inférieur	[MJ/kg]	41.54	44.6
A/F stœchiométrique	[-]	14.7	15.4
Teneur en C	[molaire %]	86.2	30.4
Teneur en H	[molaire %]	13.3	69.6
Teneur en O	[molaire %]	0.5	0
Rapport H/C ratio	[molaire %]	1.85	2.286
Masse Molaire	[kg/kmol]	170	100
Energie de vaporisation	[kJ/kg]	250	270-320

Tableau 19 : Propriétés du gazole et du n-heptane

De plus, comme déjà évoqué dans la partie bibliographique, les mécanismes de cinétiques chimiques pour l'oxydation du n-heptane sont disponibles sur une large gamme de température. Aussi, le n-heptane est choisi comme substitut au gazole pour les calculs de cinétique chimique (propriétés thermodynamiques, taux de réaction, etc). En même temps, pour représenter l'espèce de « carburant liquide », la composition de carburant utilisée par A. Maiboom est prise. Les propriétés utilisées dans le modèle de « carburant liquide» sont montrées dans le Tableau 20.

Variables	Unité	Carburant liquide
Densité	[kg/m ³]	835
C ratio	[molaire %]	35.7
H ratio	[molaire %]	64.3
O ratio	[molaire %]	0
C/H ratio	[molaire %]	1.80
Masse Molaire	[kg/kmol]	170

Tableau 20 : Composition de « carburant liquide »

Il convient de remarquer ici que même si le n-heptane et le gazole ont des indices de cétane comparables, le comportement vis à vis de l'inflammation de ces deux carburants n'est pas totalement identique pour une large gamme de conditions typiques des moteurs Diesel. Cela est particulièrement vrai lorsque l'inflammation est conduite et contrôlée par le processus de mélange, puisque la volatilité significativement plus élevée de n-heptane conduira à des différences de la longueur de liquide et de la vaporisation et, par conséquent, de la richesse locale [178]. De

plus, même dans des conditions où les distributions du carburant et de l'air sont comparables, les comportements vis-à-vis de l'inflammation du n-heptane et du gazole peuvent être différents. En effet, la première étape du dégagement de chaleur pour la combustion à faible température a probablement une dépendance différente à la température et à la pression [178]. Cette différence reflète le fait que les cinétiques d'oxydation et de pyrolyse du n-heptane ne sont pas représentatives de celles du gazole. Plus précisément, les effets potentiellement importants sur l'inflammation des aromatiques, des paraffines cycliques, et des iso-paraffines ne sont pas bien décrits par la cinétique du n-heptane. Cette complexité chimique influe également sur la capacité du n-heptane à reproduire les processus de formation des polluants du gazole. En outre, le rapport C/H du n-heptane s'écarte sensiblement de celui du gazole, et donc les phénomènes de mélange ne peuvent pas être représentés précisément.

4.2.6 Conditions de fonctionnement étudiées

Pour faire une validation assez large du modèle, plusieurs séries des conditions de fonctionnement, récapitulées dans le Tableau 21 sont utilisées. Elles incluent différentes études de sensibilité à un paramètre, les autres paramètres grisés dans le tableau demeurant constants. Une description détaillée de ces points de fonctionnement est disponible dans l'annexe 1.

Point	Injection (type)	Avance [deg AM]	Pression rail [bar]	Temp. adm. [deg C]	Pres. adm. [mbar]	Taux d'EGR
1	simple		897	36	1201	2.9
2	simple		897	36	1203	40.2
3	simple		1495	36	1205	40.9
4	simple		1098	41	1359	1.3
5	simple		1094	40	1357	30.8
6	simple		1099	41	1175	2.2
7	pilote		866	40.6	1176	0
8	simple		866	40	1176	0
9	pilote		866	28.1	1176	16.23
10	simple		866	28.2	1176	16.45
11	pilote		866	20	1186	0
12	simple		866	20	1186	0
13	pilote		866	38	1186	0
14	simple		866	38	1187	0
15	simple		1097	39	1357	0
16	pilote		1096	39	1363	0
17	pilote		1098	39	1361	0

Tableau 21 : Récapitulatif des points de fonctionnement utilisés et des études de sensibilité associées

Le point 2 est choisi comme point de référence car typique d'une combustion partiellement pré mélangée. Compte tenu du cout CPU élevé le modèle à chimie détaillée (CD) a été seulement appliqué aux points 1 à 3. En revanche, tous les autres points ont été simulés avec les modèles à chimie simplifiée (CS) et sans chimie (SC).

4.3 Etudes de sensibilité aux paramètres des modèles

4.3.1 Etude du modèle en cas inerte (Point de référence)

Afin de décider des valeurs du coefficient C_3 et de la température de paroi T_w , deux niveaux de chaque paramètre sont étudiés pour le point de référence (point 2) dans la phase de compression et jusqu'à l'injection du carburant. La Figure 154 montre la comparaison des pressions simulées et expérimentales.

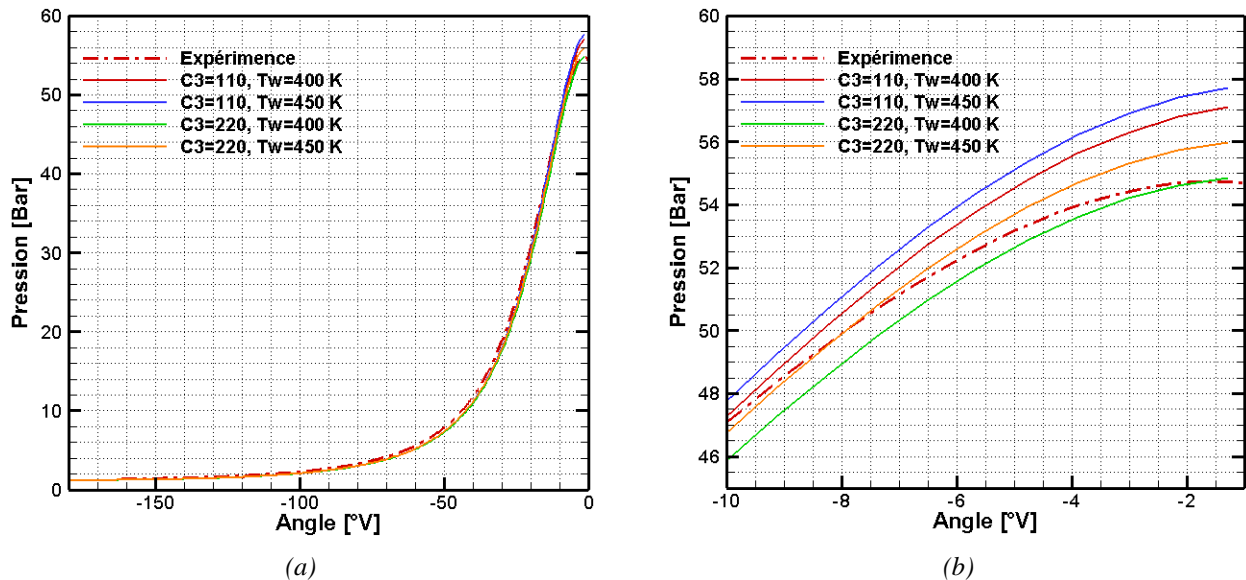


Figure 154 : Comparaison des pressions simulées et expérimentales en fonction des valeurs des paramètres du modèle de pertes aux parois, pour le point de référence

Globalement, pendant toute la durée de compression, les résultats simulés sont en bon accord avec l'expérience. Comme attendu, la pression simulée est plus élevée quand le coefficient C_3 est plus petit et la température de paroi est plus élevée (moins de pertes de chaleur par les parois). La courbe verte donne une pression comparable avec la pression expérimentale à la fin de la compression, mais les valeurs de pression au cours de la compression sont légèrement inférieures aux valeurs expérimentales.

C_3 [-]	T_w [K]	Erreur Relative [%]
110	400	4.33
110	450	5.45
220	400	0.24
220	450	2.30

Tableau 22 : Erreurs relatives entre les pressions simulées et l'expérience au moment de l'injection

Le Tableau 22 illustre les erreurs relatives de pression au moment de l'injection pour chaque combinaison de paramètres. Dans tous les cas, les écarts sont inférieurs à 6 %. La combinaison de $C_3 = 220$ et $T_w = 400$ K est choisie pour les modèles à chimie simple (CS) et sans chimie (SC) afin de minimiser l'erreur par rapport à l'expérience. En revanche, comme cela a déjà été mentionné dans la partie 4.2 le n-heptane a des délais d'inflammation plus longs que le gazole. Pour essayer de compenser cette différence et obtenir des délais d'inflammation proches de l'expérience, la combinaison $C_3 = 110$ et $T_w = 400$ K est retenue pour le modèle à chimie détaillée (CD), afin d'avoir au moment de l'injection une température et une pression plus élevées et plus

favorables à l'inflammation. Une analyse plus détaillée de la sensibilité des résultats à ces paramètres sera présentée ultérieurement.

Pour les autres paramètres du modèle, les valeurs par défaut sont indiquées dans le Tableau 23 Tableau 23.

Paramètres	Valeur de référence
Angle du spray Cjet	0.5 (CD) /0.26 (CS, SC)
Pertes aux parois C3	110 (CD) /220 (CS, SC)
Température des parois Tw	400
Nombre de zones du spray	5
Découpage des zones	Longueur unique
Coefficient d'évaporation	1^{E+6}
Température du carburant	373 K

Tableau 23 : Valeur des paramètres du modèle (Injection simple)

4.3.1.1 Modèle à chimie détaillée (CD)

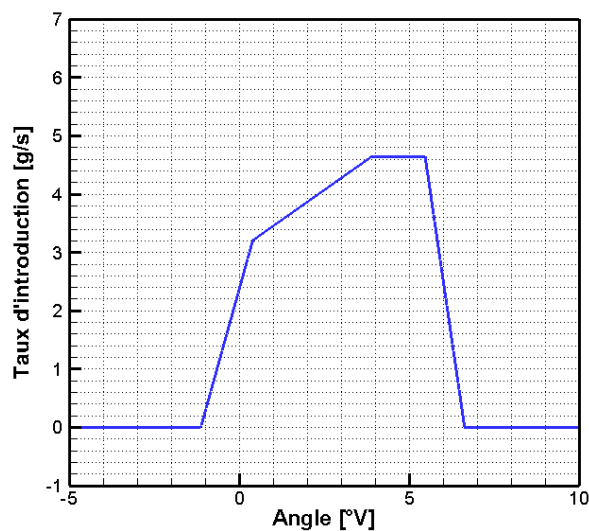


Figure 155 : Taux d'introduction

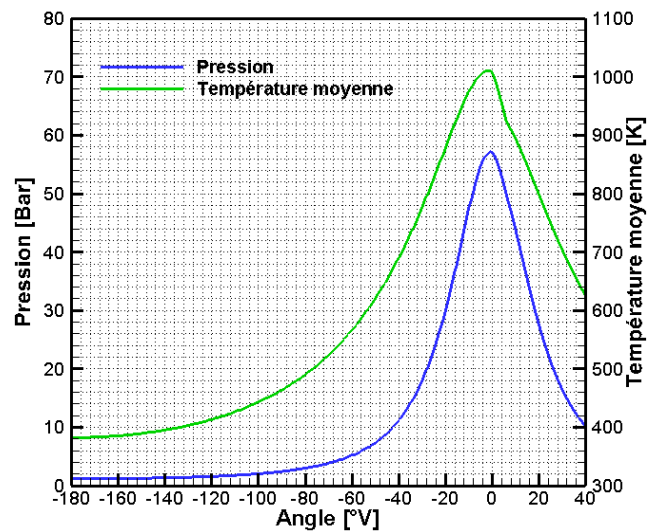


Figure 156 : Pression et température moyenne

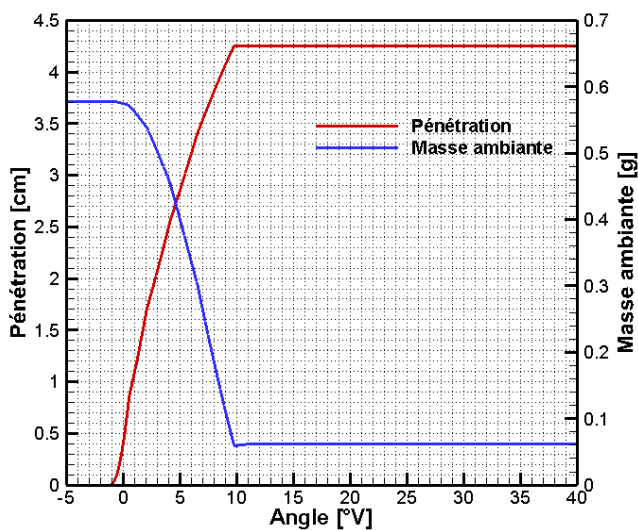


Figure 157 : Pénétration du spray et Masse ambiante

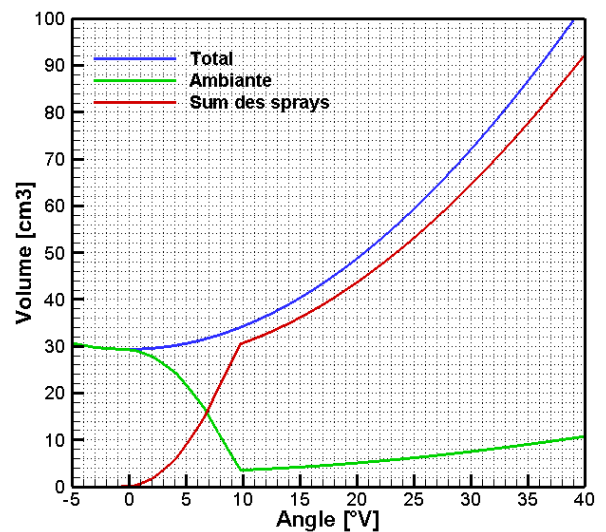


Figure 158 : Volume ambiant et volume du spray

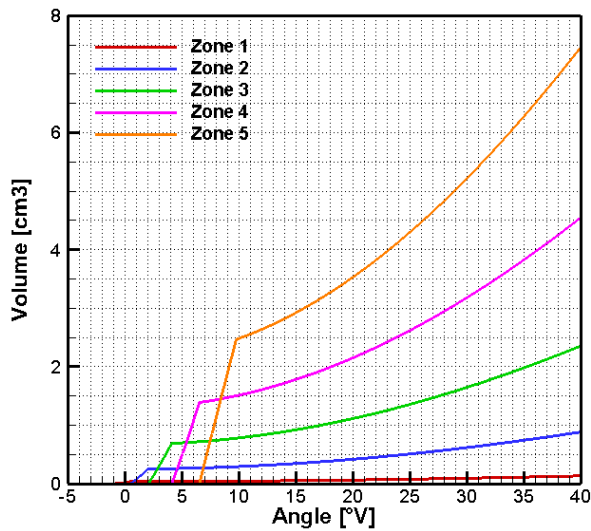


Figure 159 : Volumes des zones du spray

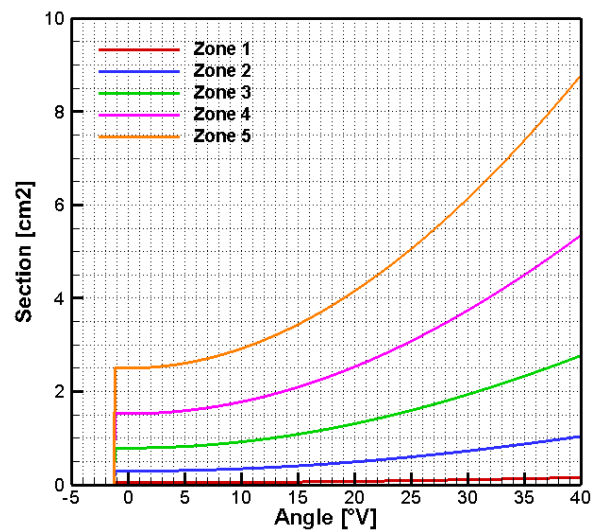


Figure 160 : Sections des zones du spray

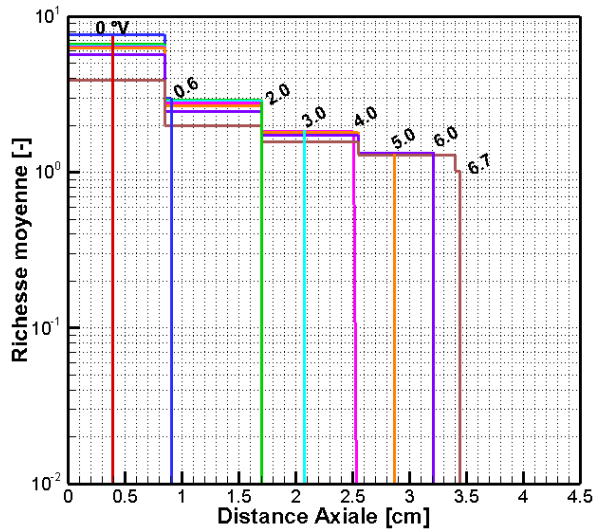


Figure 161a : Richesse moyenne avant la fin de l'injection

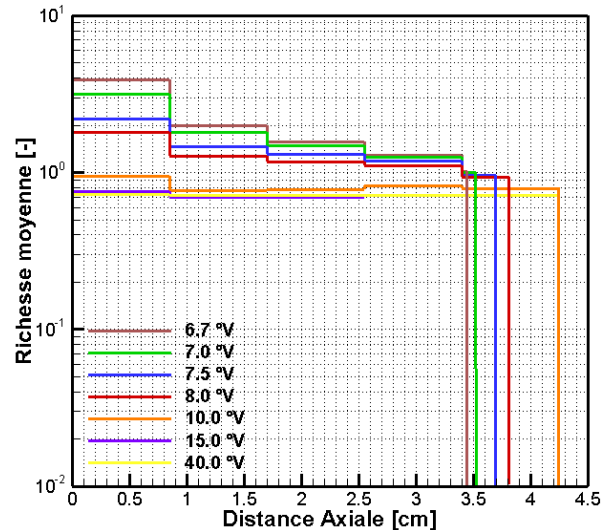


Figure 161b : Richesse moyenne après la fin de l'injection

La Figure 155 montre le taux d'introduction simulé. Un délai de 0.27 ms est à noter entre les valeurs d'avance indiquées dans les descriptifs des points de fonctionnement (signal électrique) et l'ouverture effective de l'injecteur (levée d'aiguille et début de l'introduction du carburant). La quantité injectée étant relativement faible, le taux d'introduction est essentiellement transitoire et reste très peu de temps en régime « pseudo permanent ». L'injection se termine vers 6.7 °V, avant que le spray ne touche les parois.

La Figure 156 montre l'évolution de la pression et de la température moyenne qui, grâce au taux de compression élevé atteint environ 1000 K au PMH. L'effet de refroidissement lié à l'introduction du carburant (à une température inférieure) est légèrement perceptible sur la courbe de température moyenne.

La Figure 157 et la Figure 158 illustrent l'effet de l'impact du spray sur les parois. Au début de la pénétration du spray dans la chambre, la masse dans la zone ambiante chute rapidement à cause de l'entraînement par le spray. Lorsque ce dernier touche la paroi, il ne reste que très peu de masse dans la zone ambiante, l'essentiel de la chambre étant occupé par les sprays. Après l'impact (vers 10°V), l'entraînement de masse ambiante par le spray est compensé par l'apport de masse en provenance de la tête du spray, de telle sorte que la masse de la zone ambiante reste constante.

La Figure 159 et la Figure 160 illustrent les variations des sections et des volumes des zones du spray qui suivent les variations du volume total de la chambre liées au mouvement du piston. La Figure 161 montre l'évolution du profil de richesse axial dans le spray. Avant la fin de l'injection, excepté la zone de tête, presque tout le spray est riche. Les variations temporelles de richesse près de l'injecteur sont liées aux évolutions du taux d'introduction. Après la fin de l'injection, la richesse près de l'injecteur décroît rapidement. A environ 10°V, tout le spray est en condition pauvre. Progressivement, le spray devient de plus en plus homogène, pour atteindre une richesse uniforme d'environ 0.7 à la fin de simulation.

4.3.1.2 Modèles à chimie simplifiée (CS) et sans chimie (SC)

Pour les modèles CS et SC, des valeurs différentes sont utilisées pour les coefficients C_{jet} et C_3 (Tableau 23) par rapport au modèle CD présenté précédemment. Par conséquent, les résultats obtenus sont différents, quoique qualitativement similaires.

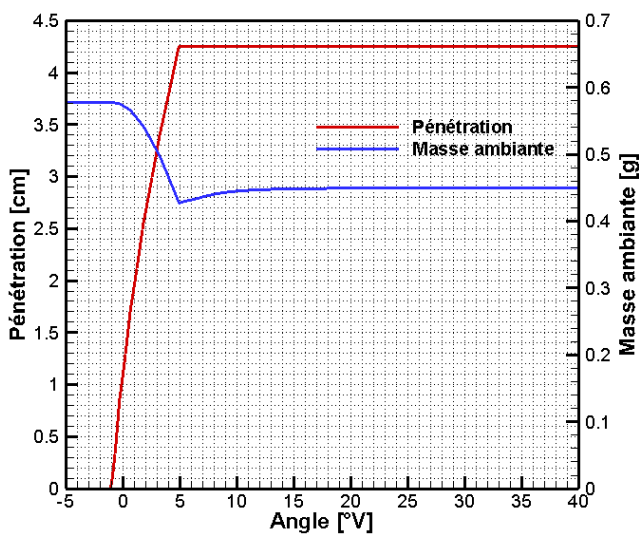


Figure 162 : Pénétration du spray et Masse ambiante

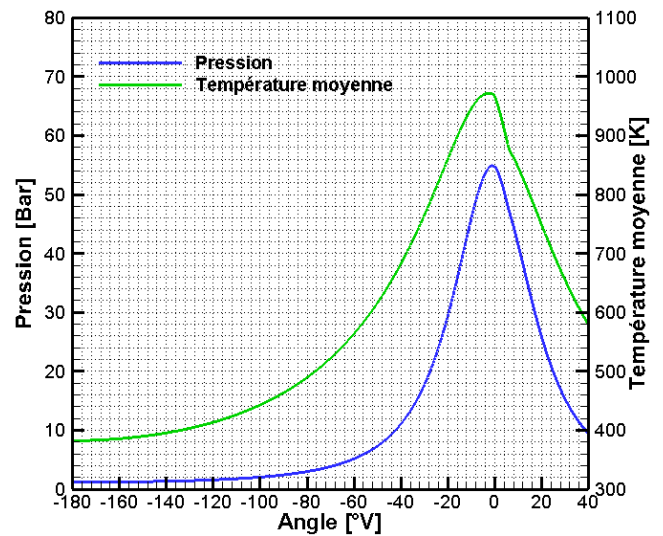


Figure 163 : Pression et température moyenne

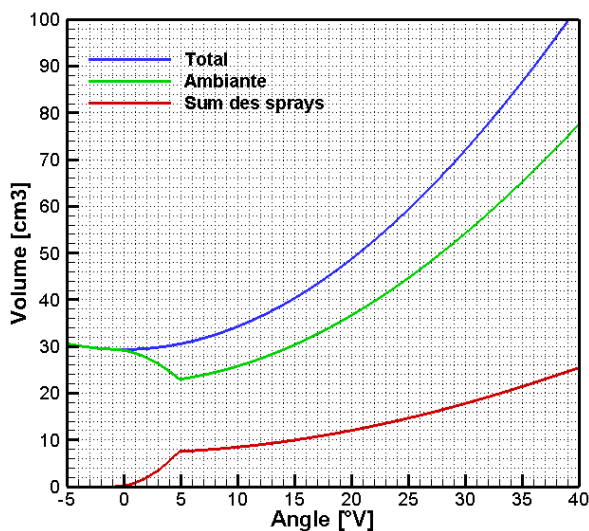


Figure 164 : volume ambiant et volume du spray

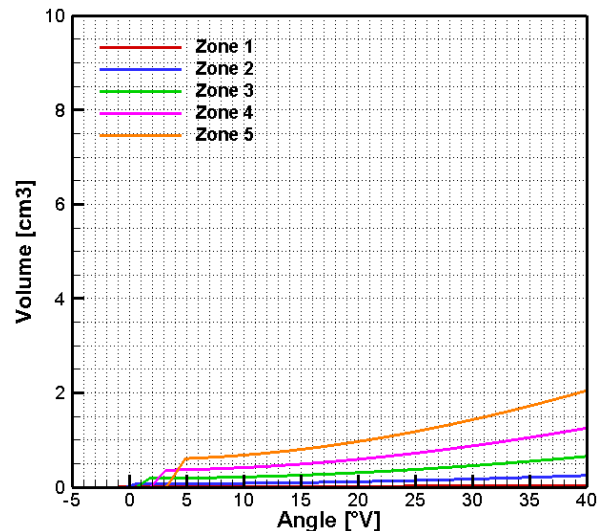


Figure 165 : Volumes des zones du spray

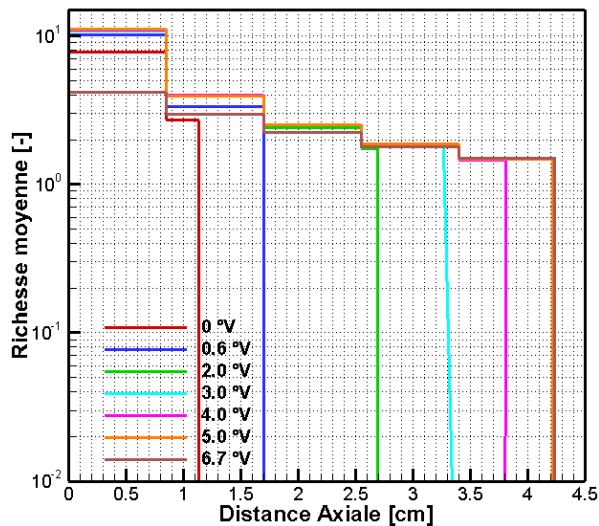


Figure 166a : Richesse avant la fin de l'injection

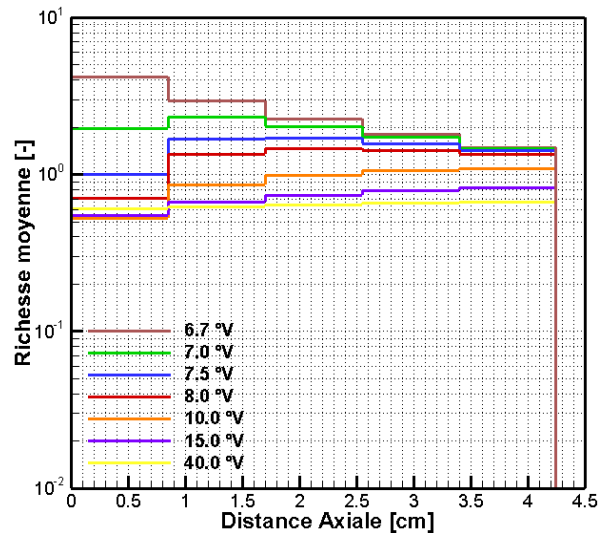


Figure 166b : Richesse après la fin de l'injection

Comme attendu, le spray pénètre beaucoup plus vite (Figure 162) en raison de l'angle réduit (13 degrés au lieu de 26). A 5.0 °V, le spray touche la paroi. Le volume des sprays étant plus faible (Figure 164 et Figure 165) il reste une masse plus importante dans la zone ambiante. De plus, les pertes aux parois majorées (coefficient C3) justifient une température de fin de compression légèrement inférieure (Figure 163).

Concernant la richesse (Figure 166), avant la fin de l'injection, le spray est plus riche qu'avec le modèle CD en raison de l'angle réduit. La richesse en tête de spray est de 1.5. L'impact sur la paroi a lieu avant la fin de l'injection. Après l'impact, la richesse moyenne dans la zone 1 commence à diminuer car le taux d'introduction commence également à diminuer. Après la fin de l'injection, le spray devient plus en plus homogène et pauvre, l'onde de surentraînement de l'air décrite par Musculus [22], apparaît clairement. Après 10 °V, le spray devient pauvre, et à la fin de simulation, la richesse homogène est d'environ 0.6.

4.3.2 Analyse des résultats dans le cas réactif (Point de référence)

4.3.2.1 Modèle à chimie détaillée (CD)

Les résultats pour le point de référence obtenus avec le modèle CD sont présentés sur les figures suivantes.

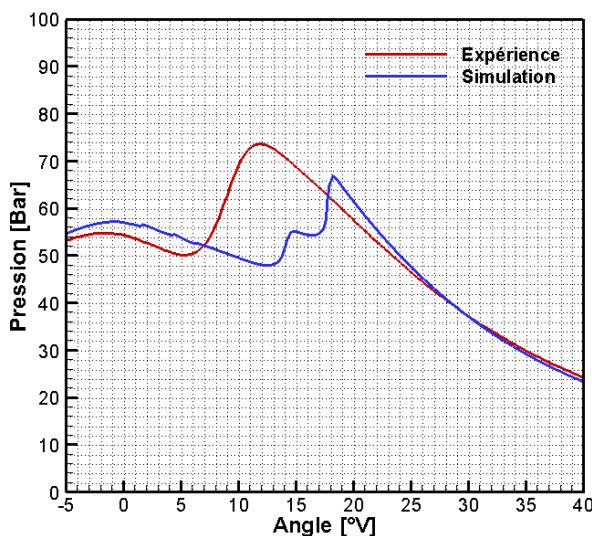


Figure 167: Comparaison des pressions simulée et

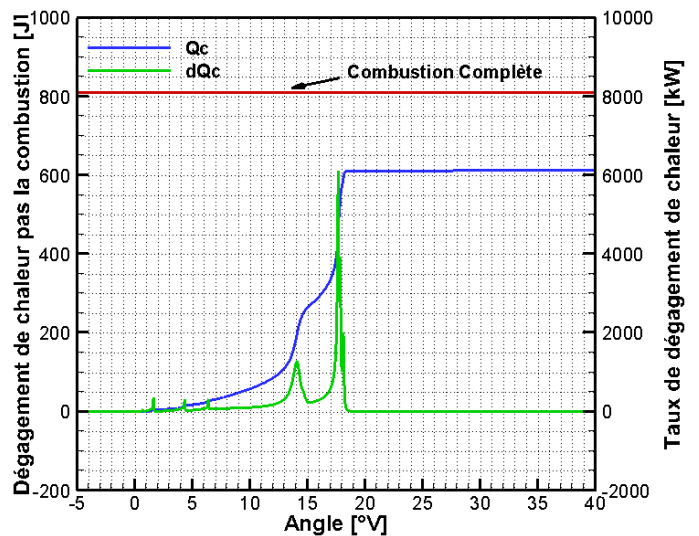


Figure 168: Dégagement de chaleur total

expérimentale

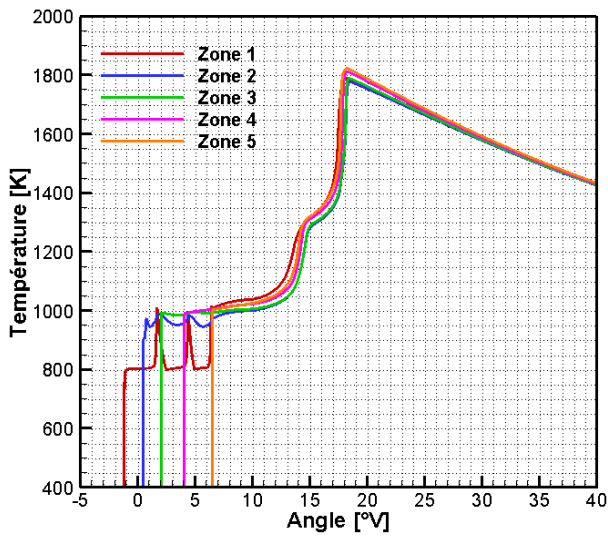


Figure 169 : Température des zones du spray

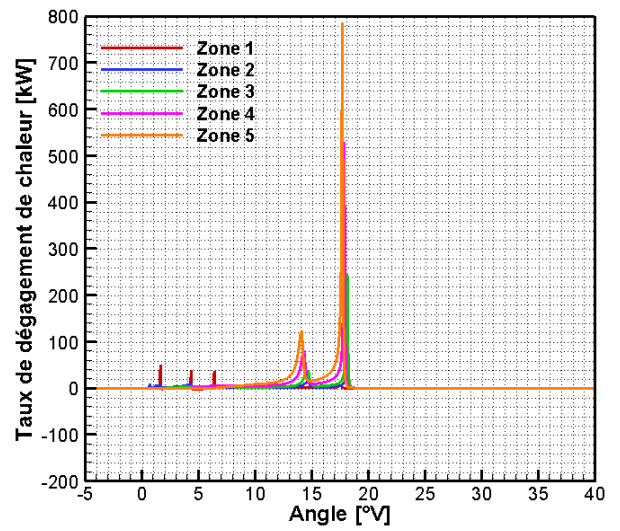


Figure 170 : Taux de dégagement de chaleur dans les zones

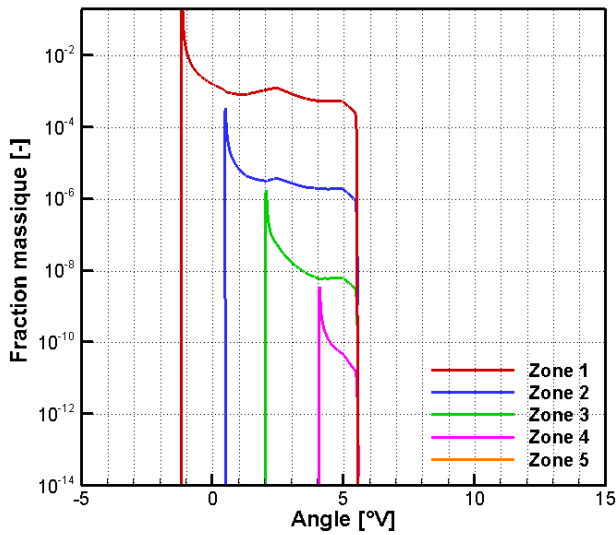


Figure 171 : Fraction massique de carburant liquide

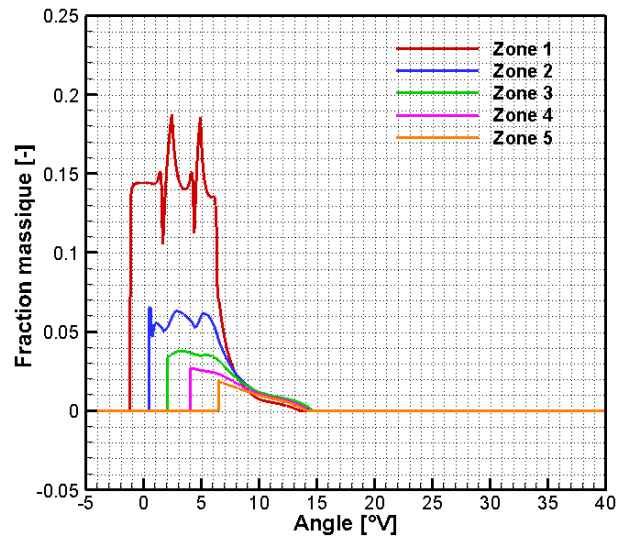


Figure 172 : Fraction massique de C_7H_{16} (vapeur)

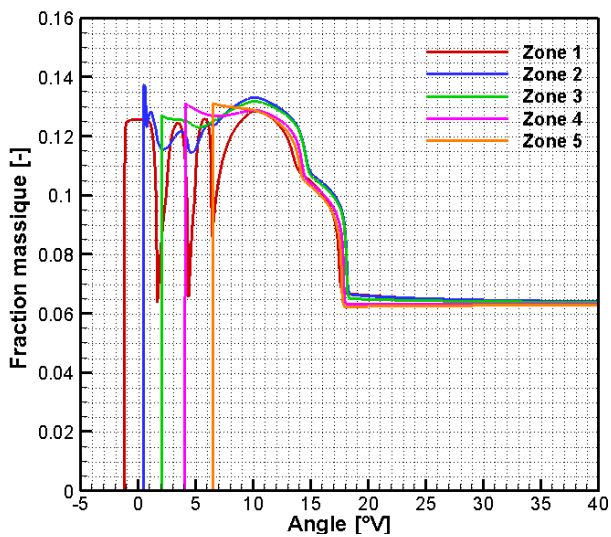


Figure 173 : Fraction massique d' O_2

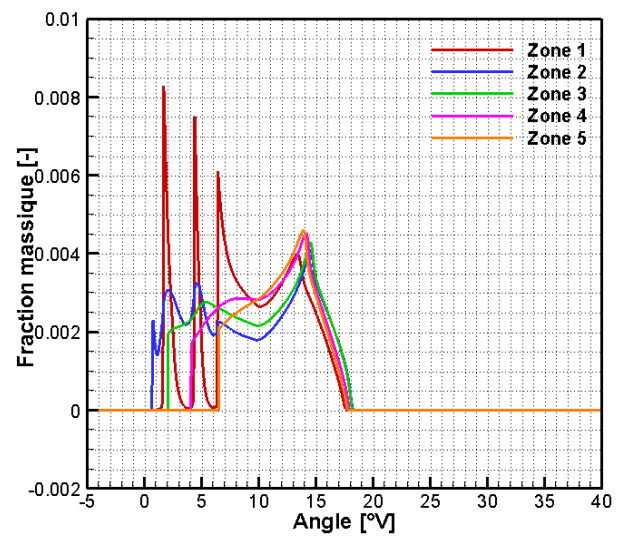


Figure 174 : Fraction massique d' C_3H_6

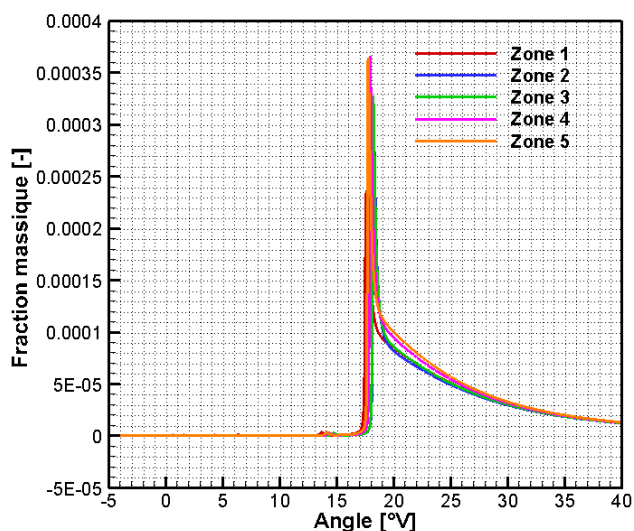


Figure 175 : Fraction massique de OH

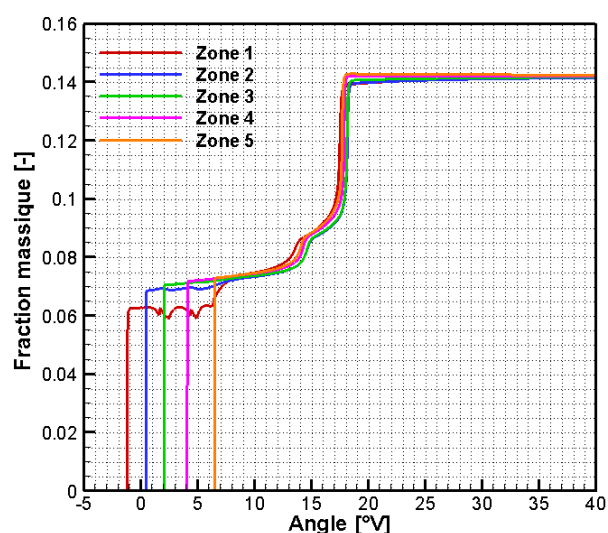


Figure 176: Fraction massique de CO₂

Sur la Figure 167, le résultat simulé fait apparaître un délai d'inflammation surestimé d'environ 7°V par rapport à l'expérience. A cause du refroidissement lié à la course descendante du piston, il y a deux délais d'inflammation dans le cas simulé (Figure 168), qui correspondent respectivement à une flamme froide et à la flamme principale. Cette représentation ne correspond pas au cas expérimental simulé ici. En effet, le délai expérimental étant plus court, l'inflammation réelle a lieu dans des conditions de pression et de température plus élevées. En revanche, elle est cohérente avec le modèle conceptuel de Musculus et al. pour les combustions froides [75][76], mode dans lequel la combustion simulée a sans doute basculé du fait de l'allongement du délai.

La Figure 168 montre que la chaleur totale dégagée correspond à environ 75% de l'énergie chimique disponible dans le carburant. L'essentiel de la chaleur est dégagée après 10 °V, c'est-à-dire après l'impact du spray sur la paroi. Comme dans le cas d'une combustion dans une chambre à volume fixe, une analyse plus détaillée est possible en étudiant les évolutions au sein des différentes zones (Figure 169 à Figure 176 Figure 170). Différentes phases du processus de combustion peuvent alors être distinguées :

Le développement initial de spray (SOI ~ 0,5 °V). Après le début de l'injection, le carburant liquide commence à pénétrer dans la zone 1 et à s'évaporer. Peu après la création de la zone 2, presque tout le carburant liquide reste dans la zone 1, tandis que le carburant vapeur continue à pénétrer et à se mélanger avec les gaz entraînés par le spray. Le mélange ainsi créé est riche et relativement froid dans les zones près de l'injecteur (Zone 1 à 800 K, Zone 2 entre 900 et 1000 K).

Des réactions réversibles dans les zones près de l'injecteur (0,5 ~ 6,5 °V). Comme déjà expliqué dans le chapitre 3, le mécanisme ERC donne lieu dans les zones riches et où les températures sont inférieures à 1000K à des réactions réversibles qui génèrent des oscillations sur les compositions et paramètres thermodynamiques de ces zones.

Délai d'inflammation de la flamme froide (5 ~ 15 °V). Le spray s'appauvrit progressivement grâce à l'entraînement des gaz ambiants. A 12,5 °V, la tête du spray (zone 5) commence à brûler la première, puis la combustion s'étend vers et remonte vers l'injecteur (Zones 4, 3, 2 puis 1). Contrairement à la phase précédente, cette phase de combustion dégage une quantité importante de chaleur, les températures des zones augmentent de plus de 200 K (Figure 169). Cependant, le niveau de température reste typique d'une flamme froide.

Délai d'inflammation de la flamme principale (15 ~ 18 °V). Comme la combustion froide chauffe le spray, malgré le refroidissement lié à la détente, une combustion très rapide et forte, de type pré-mélangée, s'établit ensuite. Les températures dans les zones atteignent alors 1800 K.

Refroidissement (18 ~ fin de simulation). Au-delà de 18°V il n'y a plus de dégagement de chaleur significatif, la température commence à diminuer à cause de la détente. Il n'existe pas de combustion diffusive dans ce cas de référence.

L'analyse des évolutions des espèces conduit aux remarques suivantes:

Sur la Figure 171 il apparaît que plus de 99% du carburant liquide reste dans la zone 1, ce qui correspond à une longueur liquide inférieure ou égale à 0,85 cm compte tenu de la taille des zones. Le carburant est entièrement vaporisé juste après la fin de l'injection.

Sur la Figure 172, les oscillations régulières de la concentration en carburant vapeur (n-heptane) dans les zones 1 et 2 correspondent aux réactions réversibles mentionnées ci dessus. De plus, il n'existe plus de n-heptane après 12,5 °V, ce qui indique que la combustion froide décompose le n-heptane en espèces intermédiaires. A la fin de cette phase, seule une faible partie du carburant est convertie en dioxyde CO₂, le produit final des réactions, et la majeure partie du carbone du n-heptane se trouve sous forme d'espèces intermédiaires, par exemple C₃H₆ (Figure 174). Après 15 °V, lors de la combustion principale, les espèces intermédiaires disparaissent avec une production importante de CO₂ (Figure 176). Dans le même temps, l'espèce d'OH apparait (Figure 175) : il s'agit d'une espèce caractéristique de la deuxième étape de l'inflammation [75][76].

Sur la Figure 173, la consommation d'oxygène est proportionnelle à l'intensité des réactions. A la fin de la combustion pré-mélangée, la teneur en oxygène reste faible, car le spray ré-entraîne des gaz brûlés.

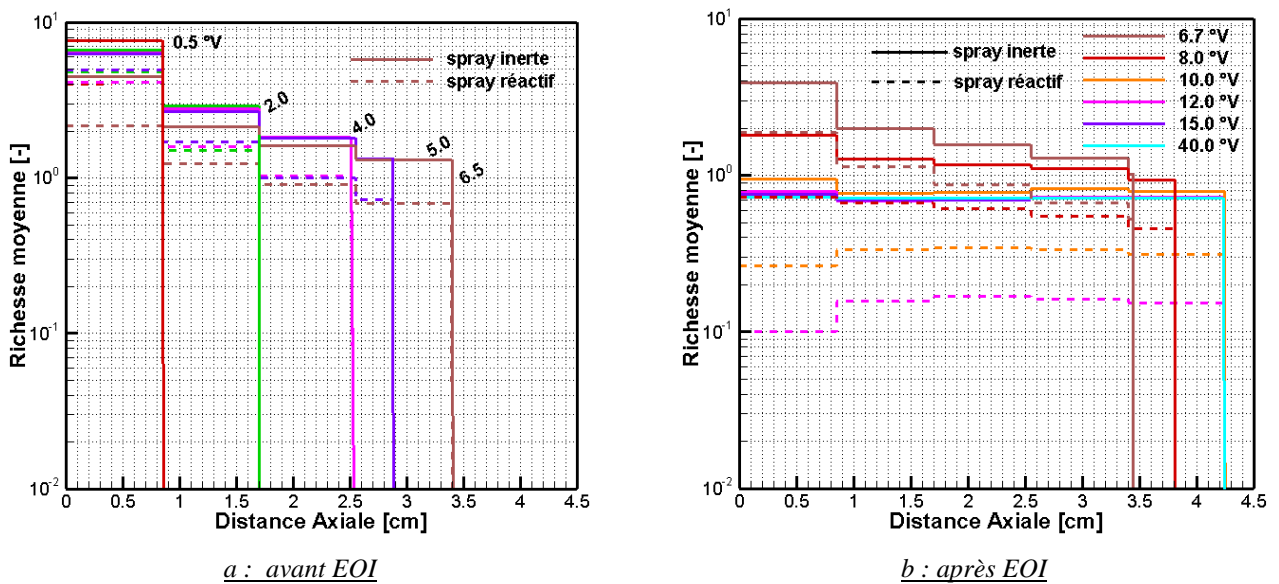


Figure 177 : Comparaison des richesses entre les conditions inertes et réactives (Modèle CD, ERC)

Sur la Figure 177a, avant la fin de l'injection à 6.7 °V, la richesse moyenne au tout long du spray réactif est plus petite que celle du spray inerte. En effet, le processus d'oxydation du carburant n'est pas encore complet. Après la fin de l'injection, contrairement au cas d'un réacteur à volume constant où la combustion a lieu pendant l'injection, la richesse continue de baisser jusqu'à atteindre zéro lorsqu'il n'existe plus de carburant (entre 12 et 15 °V sur la Figure 177b).

4.3.2.2 Modèle à chimie simplifiée à 1 réaction (CS)

Le modèle de combustion à chimie simplifiée à 1 réaction est maintenant analysé, toujours pour le point de fonctionnement n°2 (point de référence). Les valeurs des paramètres spécifiques du modèle CS sont regroupées dans le Tableau 24. Il est rappelé que certains paramètres généraux des modèles prennent une valeur différente suivant le sous-modèle de chimie utilisé (CD, CS ou SC, voir Tableau 23)

	Valeur de référence
A (facteur pré-exponentiel)	2.0 E+08
E_a (énergie d'activation)	15780 kJ/mol
Limite de richesse supérieure (Modèle CS_LR)	2
Limite de richesse inférieure (Modèle CS_LR)	0.2

Tableau 24 : Valeurs des paramètres des modèles CS et CS_LR

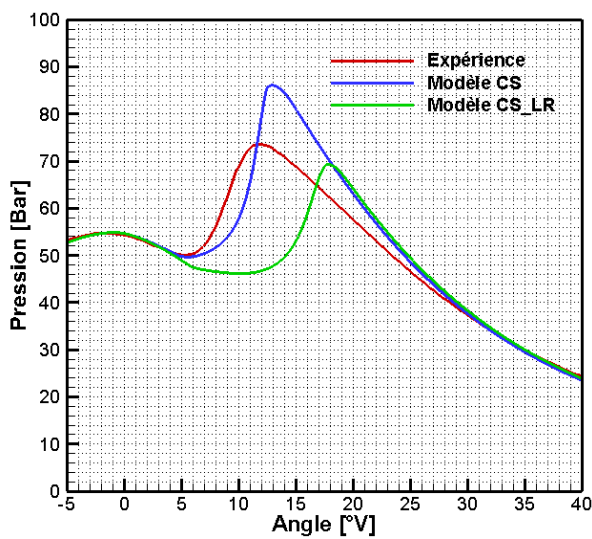


Figure 178: Comparaison des pressions simulées et expérimentale

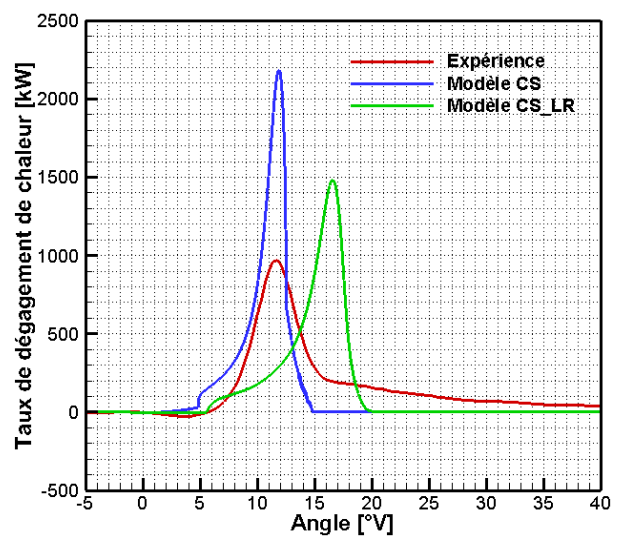


Figure 179: Taux de dégagement de chaleur total

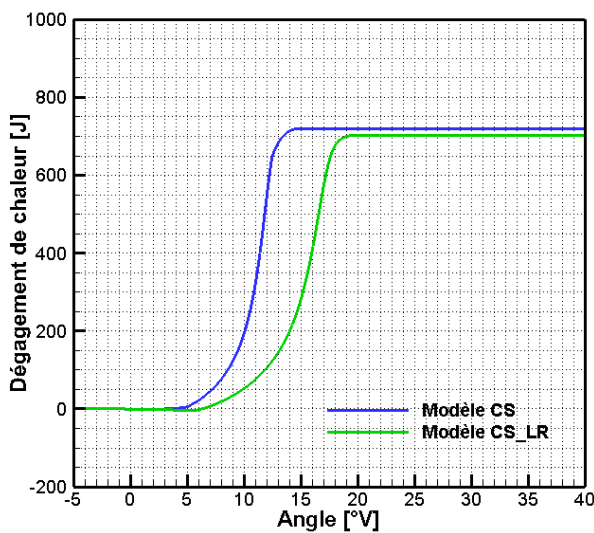


Figure 180 : Dégagement de chaleur total

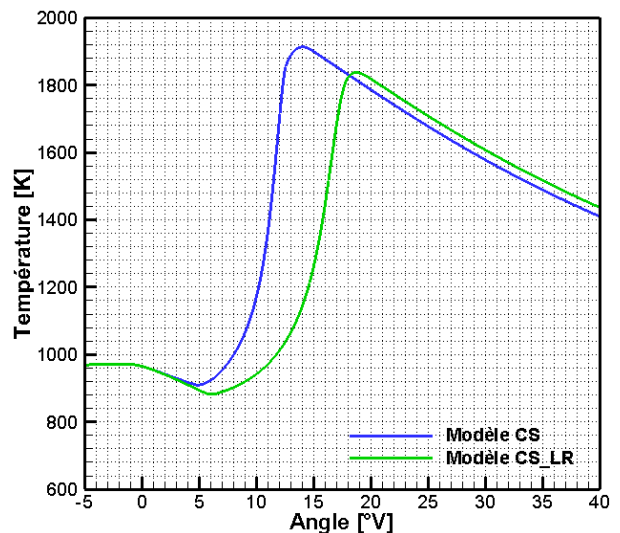


Figure 181: Température moyenne du cylindre

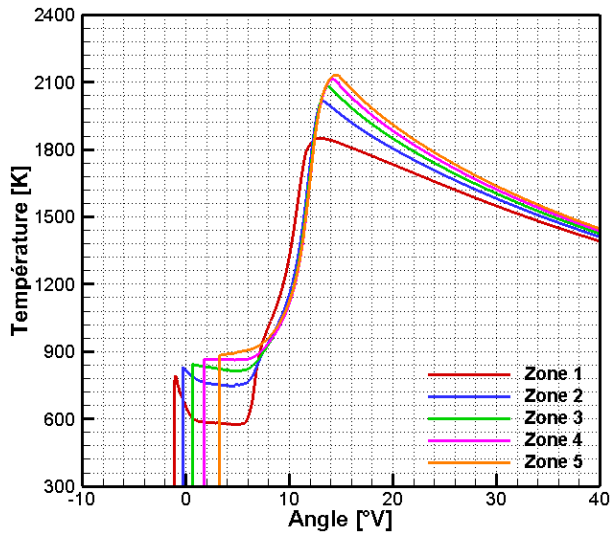


Figure 182 : Températures des zones du spray (Modèle CS)

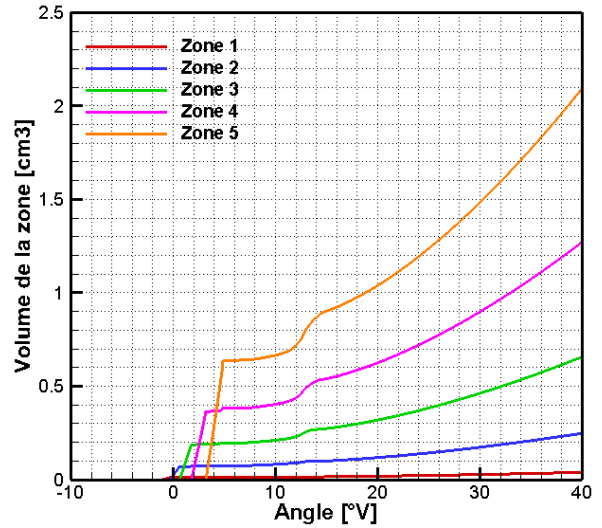


Figure 183: Volume des zones du spray (Modèle CS)

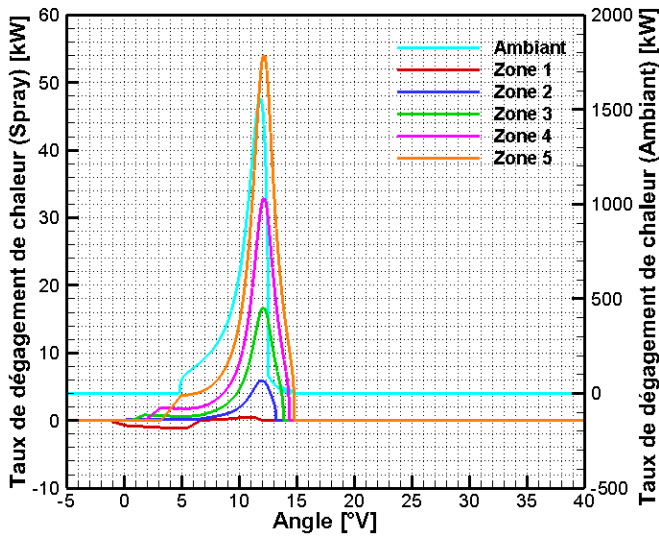


Figure 184: Taux de dégagement de chaleur dans les zones du spray (Modèle CS)

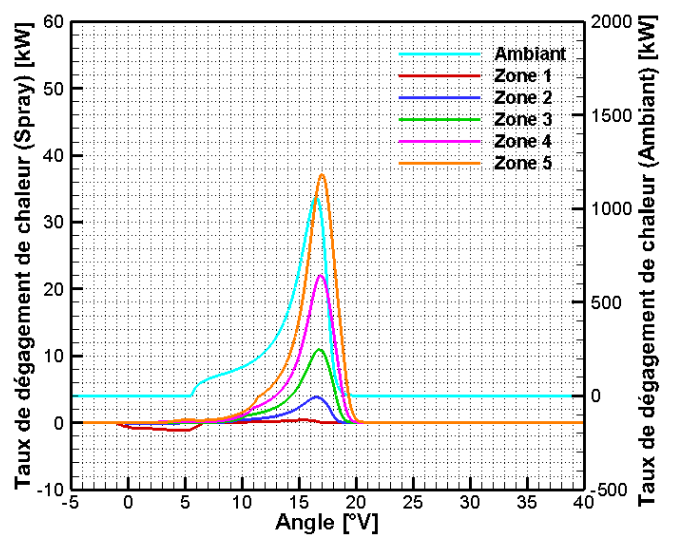


Figure 185: Taux de dégagement de chaleur dans les zones du spray (Modèle CS LR)

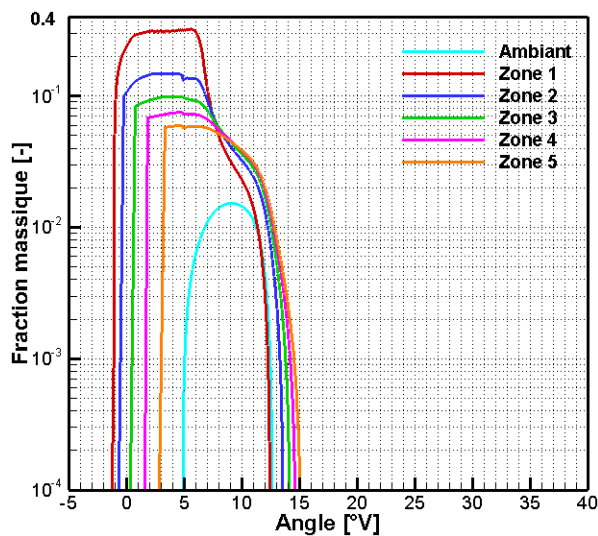


Figure 186 : Fractions massiques de carburant vapeur dans les zones du spray (Modèle CS)

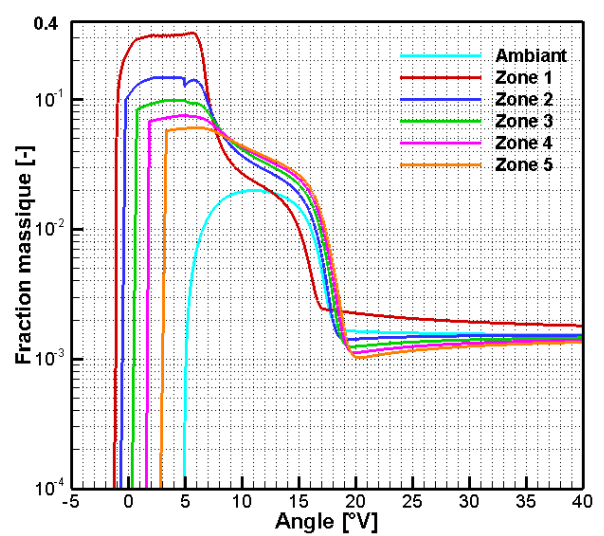


Figure 187 : Fractions massiques de carburant vapeur dans les zones du spray (Modèle CS LR)

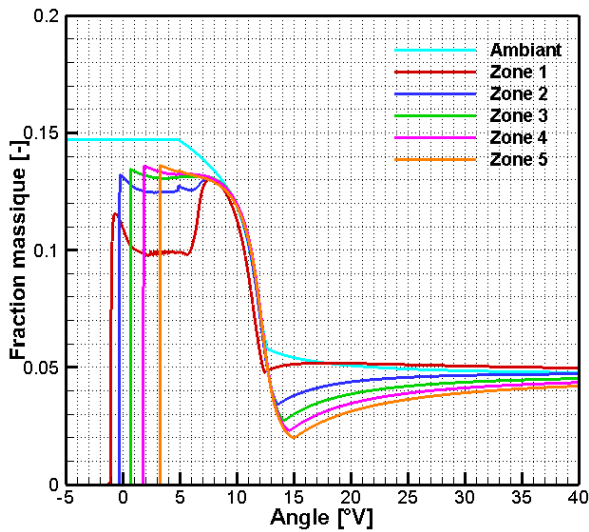


Figure 188 : Fractions massiques d'O₂ dans les zones du spray (Modèle CS)

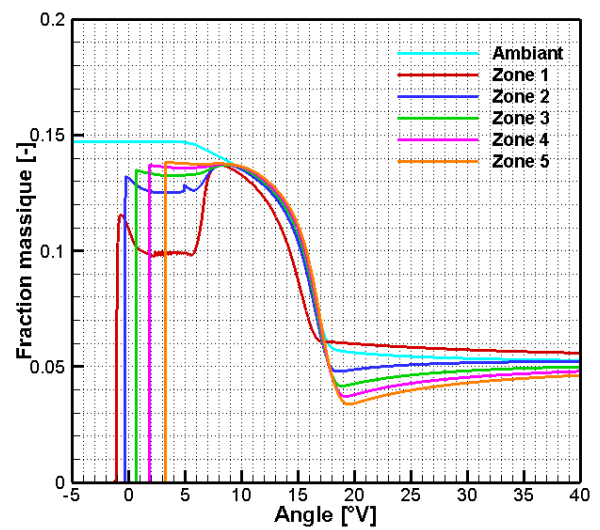


Figure 189 : Fractions massiques d'O₂ dans les zones du spray (Modèle CS_LR)

La pression cylindre et le taux de dégagement de chaleur simulés sont comparés aux valeurs expérimentales sur la Figure 178 et la Figure 179. Le modèle de combustion CS donne un délai d'inflammation comparable à l'expérience. La combustion commence vers 5 °V, c'est à dire en même temps que l'impact du spray sur la paroi à 4.9 °V. Le pic de taux de dégagement de chaleur simulé est ensuite surestimé. Le modèle CS_LR diminue la fraction de mélange « prêt à brûler » par le biais de la limite de richesse, ce qui tend à augmenter le délai d'inflammation. Les conditions de pression et température dans la chambre de combustion étant alors moins favorables la combustion est moins forte, et moins brutale et dure plus longtemps, ce qui diminue significativement le pic de pression. Sur la Figure 181, la combustion plus tardive avec le modèle CS_LR réduit la température moyenne et par voie de conséquence les pertes de chaleur à travers les parois. Ainsi, à la fin de simulation, la température avec le modèle CS_LR est eu peu plus haute.

La Figure 182 et la Figure 183 donnent des informations locales pour la combustion la plus rapide (modèle CS). Les variations de température dans les zones proches de l'injecteur au cours de l'injection sont liées aux variations du taux d'introduction ainsi qu'à l'évaporation. La température maximale dans le spray est atteint 2130 K, à la tête du spray (zone 5), vers 15°V, c'est-à-dire à la fin de la combustion. Par rapport au modèle CD étudié précédemment, l'angle initial du spray est réduit (13 degrés au lieu de 26), le spray pénètre donc plus vite et touche la paroi avant la fin de l'injection (EOI = 6.7 °V), comme déjà vu dans l'étude des cas inertes. Par conséquent, à l'issue du délai d'inflammation, l'essentiel du carburant « prêt à brûler » se retrouve dans la zone « ambiante », tandis que le spray reste riche. Aussi, la majeure partie de la chaleur dégagée par la combustion l'est dans la zone ambiante (Figure 184, attention il ya deux échelles distinctes à cause des ordres de grandeur différents). Avant l'impact de paroi, les dégagements de chaleur dans les zones du spray sont très faibles, ils correspondent à des combustions riches. Ensuite, les gaz chauds qui contiennent encore de l'O₂ (Figure 188) sont ré-entraînés dans les zones de spray. La tête de spray (zone 5) qui est la plus pauvre parmi les zones de spray commence alors à brûler, puis la combustion s'étend progressivement vers le nez de l'injecteur (Zones 4, 3, 2 puis 1). Logiquement, les variations de volume des zones de spray restent faibles (Figure 183). Pour le modèle CS_LR (Figure 185), la combustion se déroule globalement de manière semblable. Toutefois, les limites de richesse éliminent tout dégagement de chaleur dans le

spray avant l'impact sur la paroi et ralentissent également l'inflammation du spray par réentraînement. En outre, il subsiste du carburant dans les zones à la fin de la combustion avec le modèles CS_LR (Figure 186Figure 188Figure 189) alors que ce n'est pas le cas avec le modèle CS (Figure 187). Ces imbrûlés proviennent d'un blocage de la combustion, probablement par excès d'appauvrissement et expliquent le dégagement de chaleur total légèrement inférieur (Figure 180). Pour les deux modèles à chimie simplifiée, la chambre devient homogène à la fin de simulation, avec des fractions massiques qui tendent à devenir constantes et identiques dans toutes les zones, par effet de réentraînement. Pour le modèle CS_LR, à la fin de simulation la richesse « homogène » est

approximativement égale à $\phi = \frac{\left(\frac{y_f}{y_{O_2}}\right)}{\left(\frac{y_f}{y_{O_2}}\right)_{st}} \approx \frac{0.0015}{0.05} \cdot \left(\frac{O_2}{F}\right)_{st} = 0.1053$, ce qui effectivement inférieur à la

limite basse d'inflammabilité utilisée dans le modèle (0.2).

4.3.2.3 Modèle sans chimie (SC)

Comme précédemment une analyse détaillée du modèle de combustion sans chimie est réalisée sur le point de référence (Point no.2). Les valeurs des paramètres spécifiques des sous modèle de chimie sont regroupées dans le Tableau 25. La valeur du délai d'inflammation qui est une donnée d'entrée de ces modèles est évaluée comme étant le moment où la chaleur dégagée par le carburant vapeur est égale à la perte de chaleur liée à l'évaporation du carburant liquide. Par ailleurs, afin d'avoir une bonne correspondance avec les résultats expérimentaux, les valeurs des coefficients pour le modèle SC_MM sont modifiées et différentes de celles utilisées par Maiboom [89].

	Valeur de référence
Coefficients du modèle SC :	
ID (délai d'inflammation fixé)	7.3 °V ASOI
r _{reac} (coefficient de taux de réaction)	2000
Coefficients du modèle SC_MM :	
ID (délai d'inflammation fixé)	7.3 °V ASOI
C _{diss}	3
c _G	1
c _k	1
C _{spray}	5
k _{diff}	6

Tableau 25 : Valeurs des paramètres spécifiques des modèles SC et SC_MM

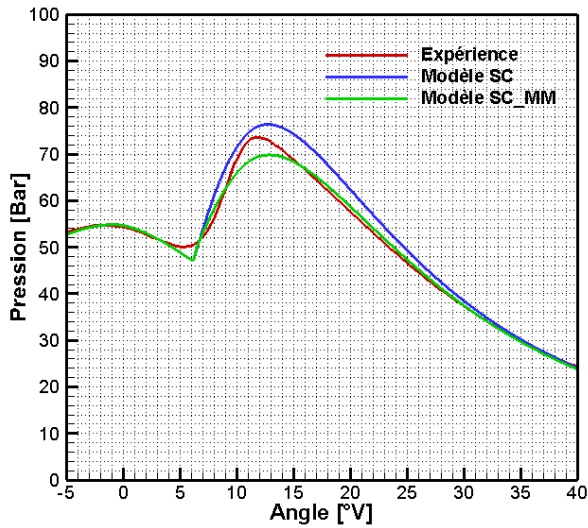


Figure 190: Pression cylindre

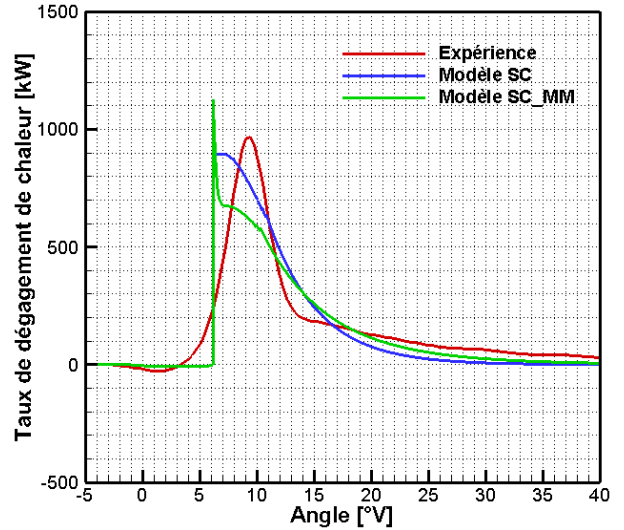


Figure 191: Taux de dégagement de chaleur total

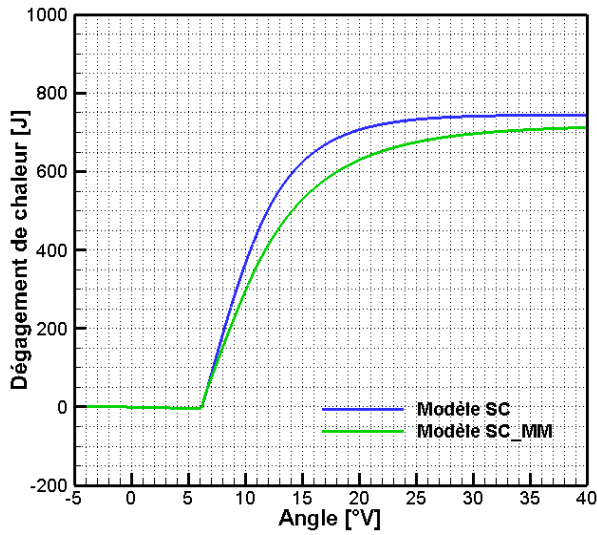


Figure 192 : Dégagement de chaleur total

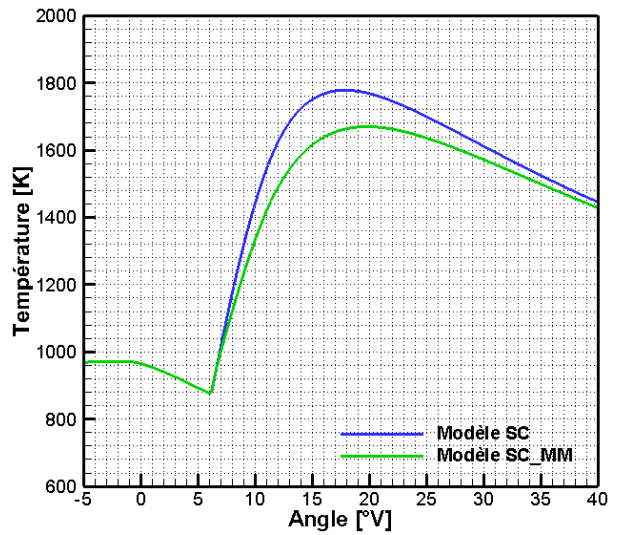


Figure 193: Température moyenne dans le cylindre

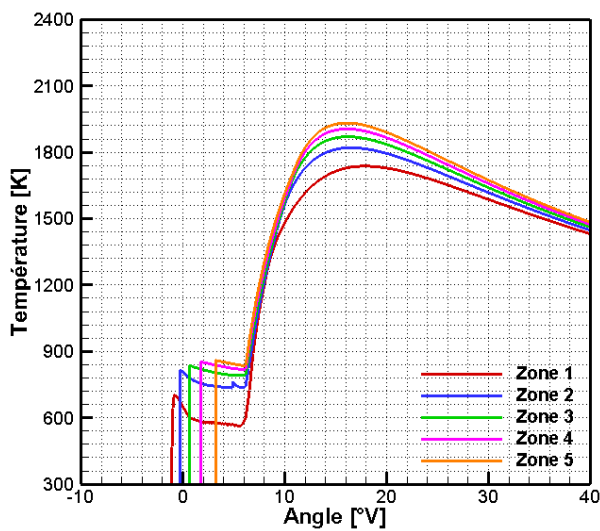


Figure 194 : Températures des zones du spray (Modèle SC)

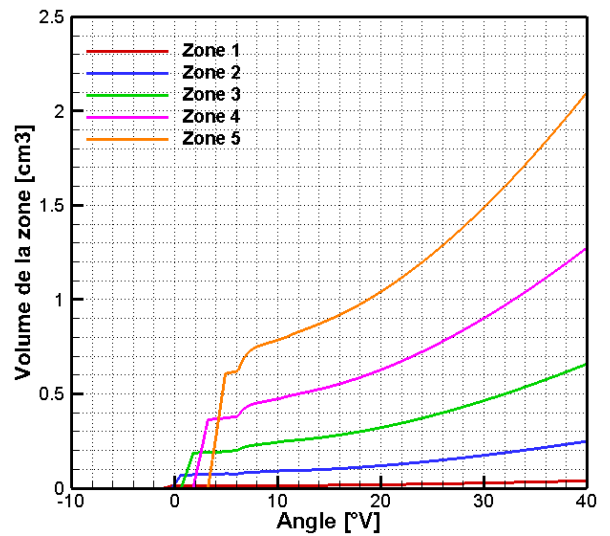


Figure 195: Volumes des zones du spray (Modèle SC)

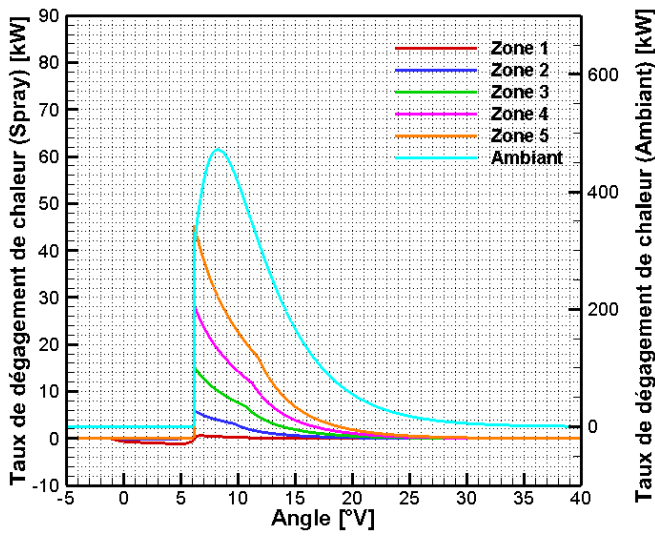


Figure 196: Taux de dégagement de chaleur dans les zones
(Modèle SC)

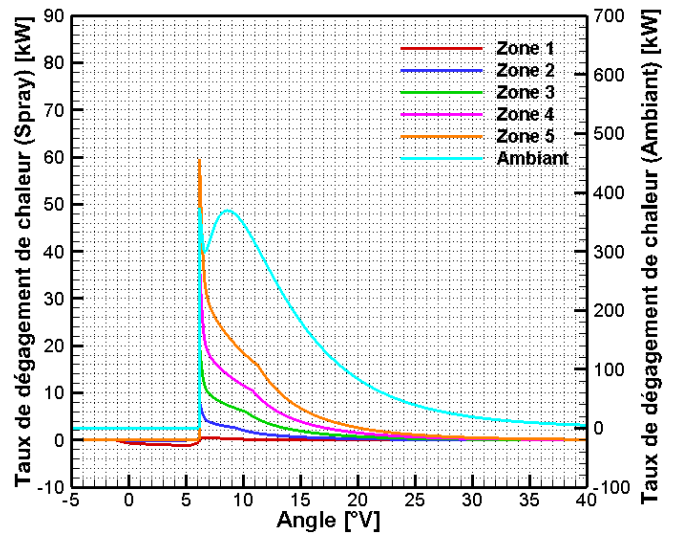


Figure 197: Taux de dégagement de chaleur dans les zones
(Modèle SC_MM)

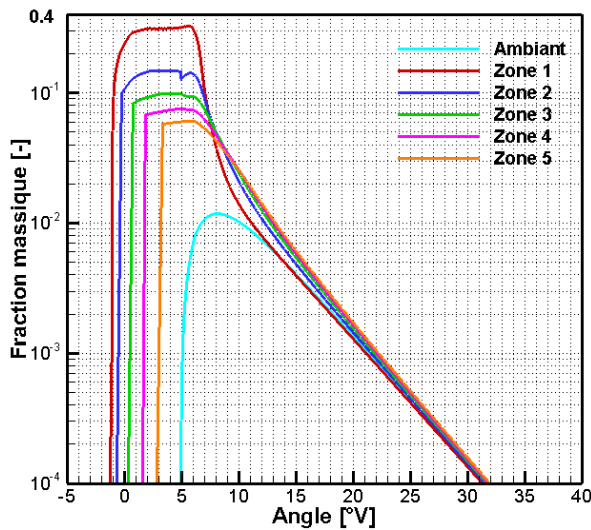


Figure 198 : Fractions massiques de carburant vapeur
(Modèle SC)

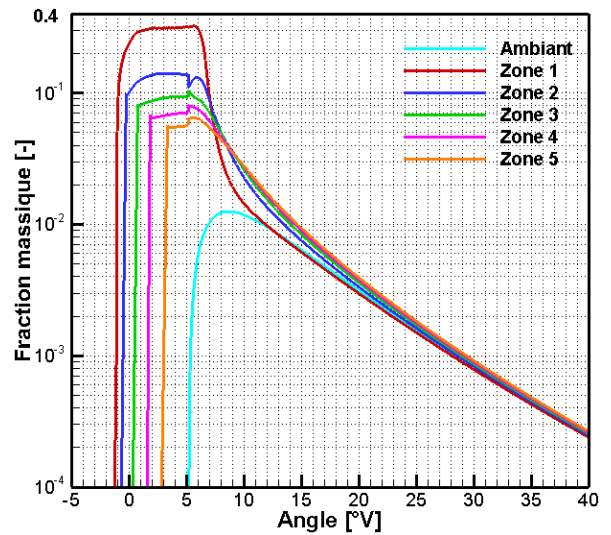


Figure 199 : Fractions massiques de carburant vapeur
(Modèle SC_MM)

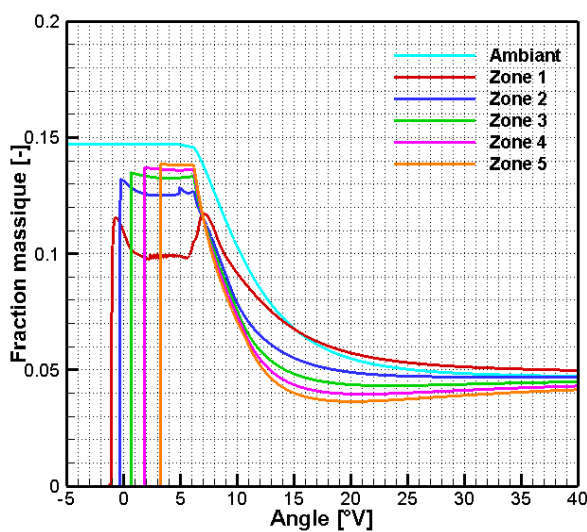


Figure 200 : Fractions massiques d'O₂ (Modèle SC)

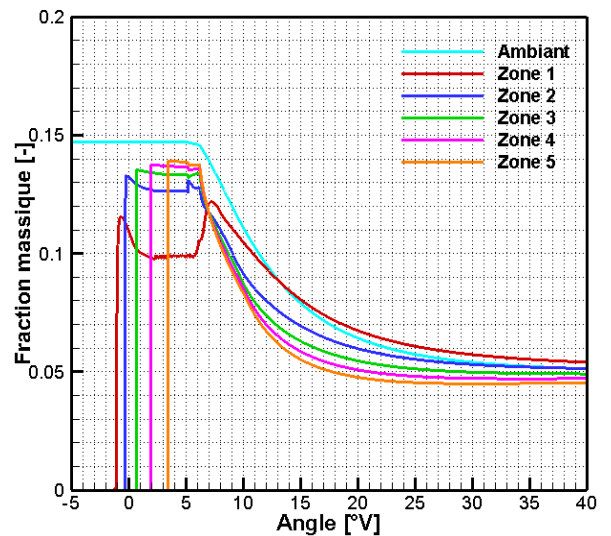


Figure 201 : Fractions massiques d'O₂ (Modèle SC_MM)

La pression cylindre et le taux de dégagement de chaleur simulés sont comparés aux valeurs expérimentales sur la Figure 190 et la Figure 191. L'accord est bon pour les pressions, avec une légère surestimation pour le modèle SC et tandis que le modèle SC_MM sous-estime un peu le pic de pression. Concernant le taux de dégagement de chaleur total l'ordre de grandeur est correct, mais l'évolution initiale est plus brutale, ce qui est inhérent au modèle. En effet, comme le montrent la Figure 196 et la Figure 197, la combustion démarre simultanément dans toutes les zones. L'essentiel de la chaleur est encore une fois dégagée dans la zone ambiante (pauvre) car le spray est globalement riche. Le taux de dégagement de chaleur est alors contrôlé par le mélange des réactifs à l'échelle microscopique (micro mélange). Ainsi, par rapport au modèle SC, le modèle SC_MM conduit à un dégagement de chaleur initial plus élevé. Cela est lié aux fréquences de mélange, évaluée par le modèle de micro mélange dans le modèle SC_MM et constante (égale à R_{reac}) dans le modèle SC. La Figure 202 compare les deux fréquences et confirme que la fréquence du modèle SC_MM est d'abord supérieure puis inférieure à celle du modèle SC. Cette combustion initiale rapide (de type pré mélangée) conduit logiquement à une hausse rapide de la température et à une dilation radiale importante des zones du spray (Figure 194 et Figure 195). Une fois les réactifs accumulés pendant le délai consommés, le taux de dégagement de chaleur est contrôlé par le mélange macroscopique (transferts de masse entre la zone ambiante et le spray) et par le mélange microscopique à l'intérieur des zones. Ce dernier est alors plus lent pour le modèle SC_MM que pour le modèle SC (Figure 202). Le modèle SC_MM conduit à une température moyenne maximale inférieure d'une centaine de K par rapport au modèle SC (Figure 193) et dégage au total légèrement moins de chaleur (Figure 192). Cela est cohérent avec les fractions massiques de carburant qui diminuent plus vite à la fin de la combustion (Figure 198 et Figure 199). L'évolution des fractions massiques d' O_2 (Figure 200 et Figure 201) montre une homogénéisation progressive de la chambre, comme avec les modèles précédemment analysés.

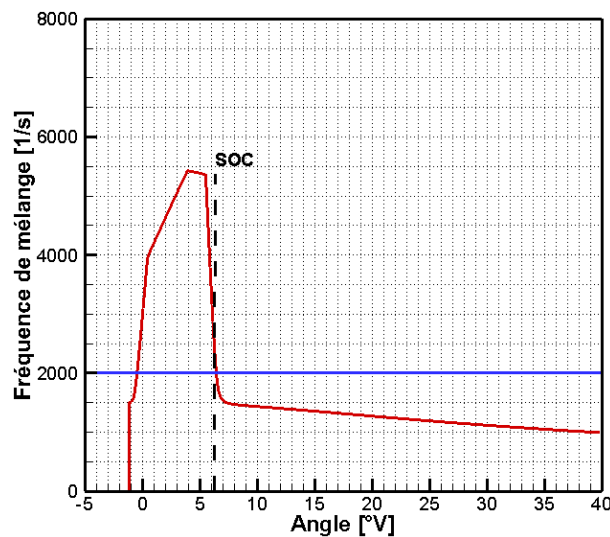


Figure 202 : Fréquence de mélange pour les Modèles SC (bleu) et SC_MM (rouge)

4.3.3 Etude de sensibilité aux paramètres du modèle CD

L'influence des principaux paramètres des modèles sur les résultats est maintenant étudiée. Le Tableau 26 regroupe les paramètres étudiés et les valeurs testées.

Paramètres	Valeur de référence	Valeur comparée
Mécanisme cinétique chimique	ERC	Stanford
Nombre des zones du spray	5	7 & 9
Découpage des zones	Longueur unique	Volume unique
Coefficient d'évaporation	1^E+6	1^E+5
Température du carburant	373 K	323 K
Température de la paroi	400 K	450 K
C ₃ (modèle de Woschni)	110	80
Cjet (Modèle d'angle du spray)	0.50	0.52

Tableau 26 : Test d'influence des paramètres du modèle CD (Injection simple)

4.3.3.1 Mécanisme cinétique chimique

Les Figures suivantes montrent les résultats obtenus avec le mécanisme de cinétique chimique de Stanford, pour le point de référence et les compare avec le mécanisme par défaut ERC.

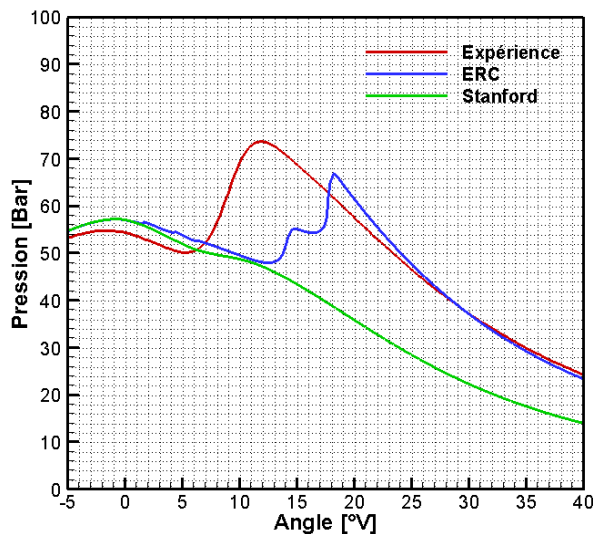


Figure 203 : Comparaison des pressions cylindre

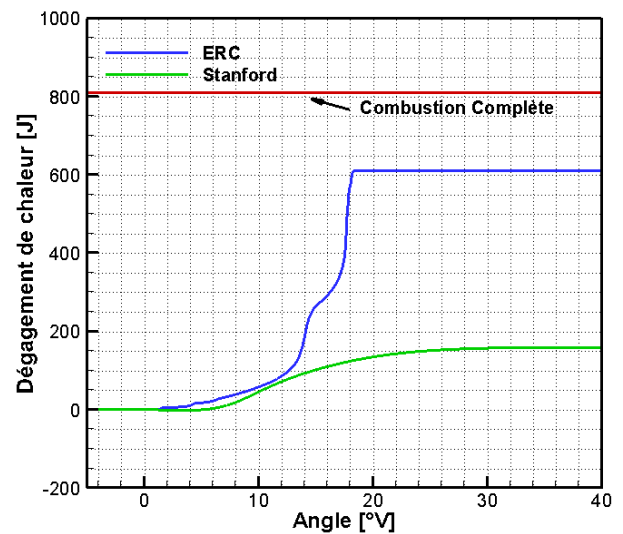


Figure 204 : Comparaison des dégagements de chaleur

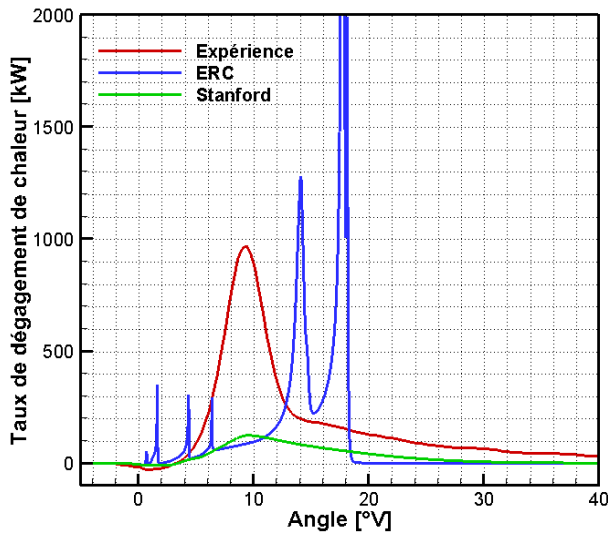


Figure 205 : Comparaison des taux de dégagement de chaleur total

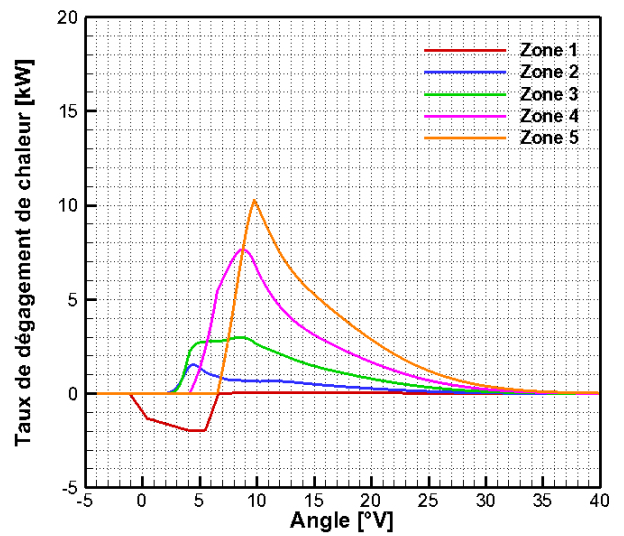


Figure 206 : Taux de dégagement de chaleur dans les zones du spray (Stanford)

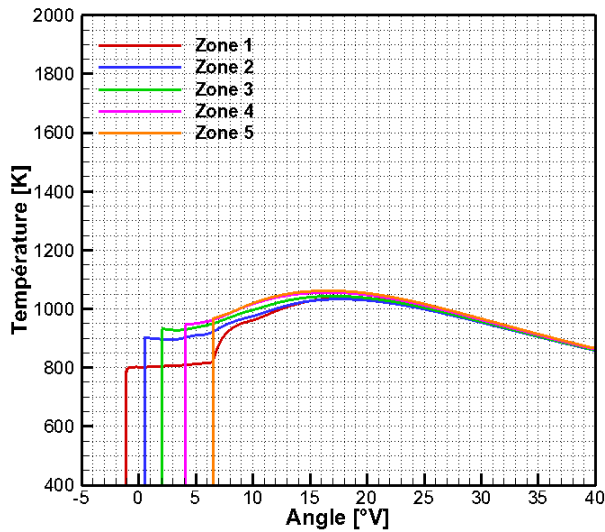


Figure 207 : Température dans les zones (Stanford)

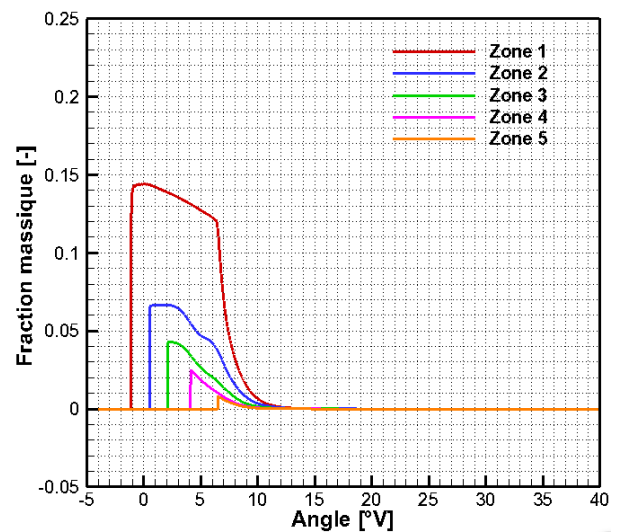


Figure 208 : Fractions massiques de C_7H_{16} vapeur (Stanford)

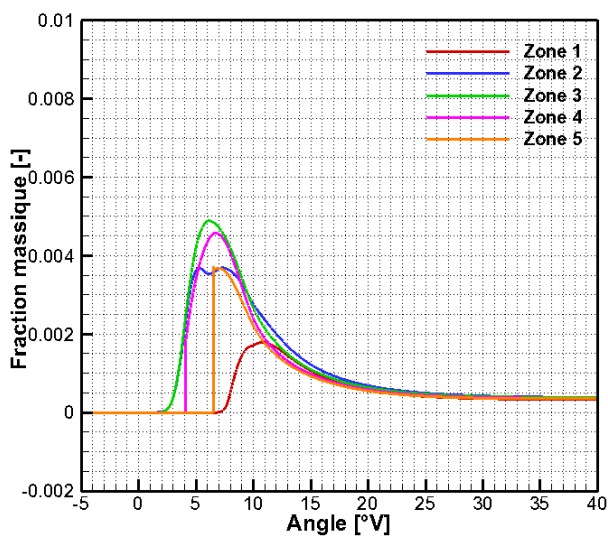


Figure 209 : Fractions massiques de C_3H_6 (Stanford)

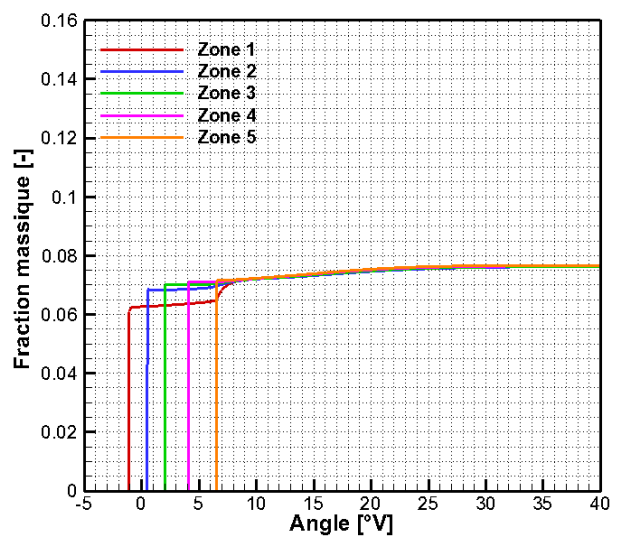


Figure 210 : Fractions massiques de CO_2 (Stanford)

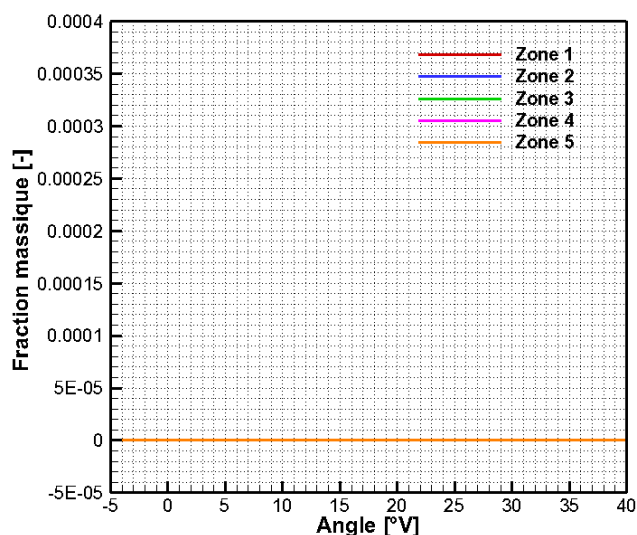


Figure 211 : Fractions massiques d'OH (Stanford)

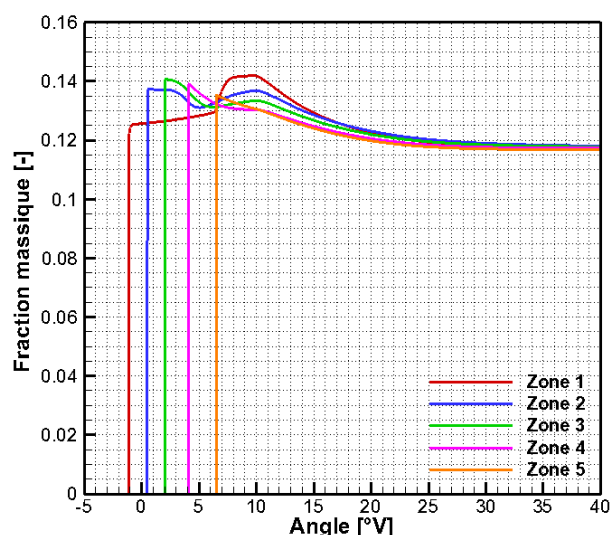


Figure 212 : Fractions massiques d'O₂ (Stanford)

Comme attendu, compte tenu des résultats obtenus au chapitre 3 dans une chambre à volume constant, le délai d'inflammation principale du mécanisme de Stanford est rallongé par rapport au mécanisme ERC. Comme l'injection a lieu pendant la détente, les températures des zones restent inférieures à 1100 K (Figure 207) et le mécanisme de Stanford donne seulement lieu à une combustion froide (Figure 205 et Figure 206) qui dégage seulement 150 Joules, soit moins de 20 % de l'énergie contenue dans le carburant (Figure 204). Très peu d'O₂ est consommé et très peu de CO₂ formé (Figure 210 et Figure 212), même si le carburant C₇H₁₆ se dissocie en espèces intermédiaires (Figure 208 et Figure 209). Il n'y a pas de production d'OH, caractéristique de l'inflammation secondaire (Figure 211). En conséquence, la variation de pression cylindre n'est pas significative (Figure 203) et reste très éloignée de la valeur expérimentale.

4.3.3.2 Nombre de zones du spray

Afin d'évaluer l'influence du nombre de zones sur les résultats, trois valeurs sont testées, toujours pour le cas de référence. Les longueurs de zones correspondantes sont présentées dans le Tableau 27. Les principaux résultats sont présentés sur les figures ci-dessous. Des informations complémentaires sont également disponibles en annexe 2.

Nombre des zones	Longueur des zones [cm]
5	0.85
7	0.607
9	0.472

Tableau 27 : Taille des zones du spray selon le nombre de zones

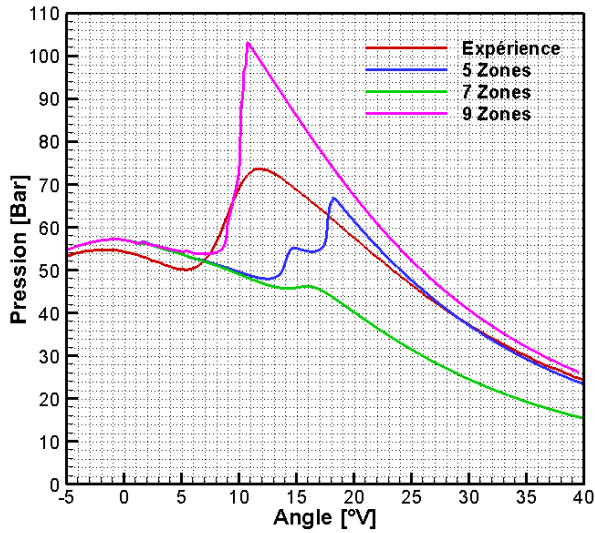


Figure 213 : Comparaison des pressions cylindre

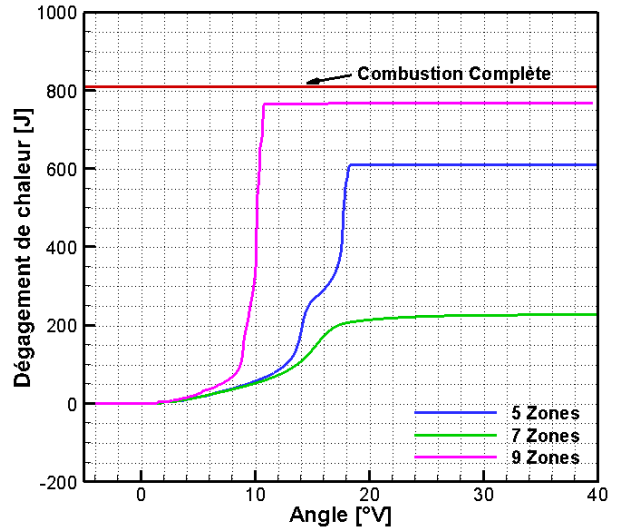


Figure 214 : Comparaison des dégagements de chaleur

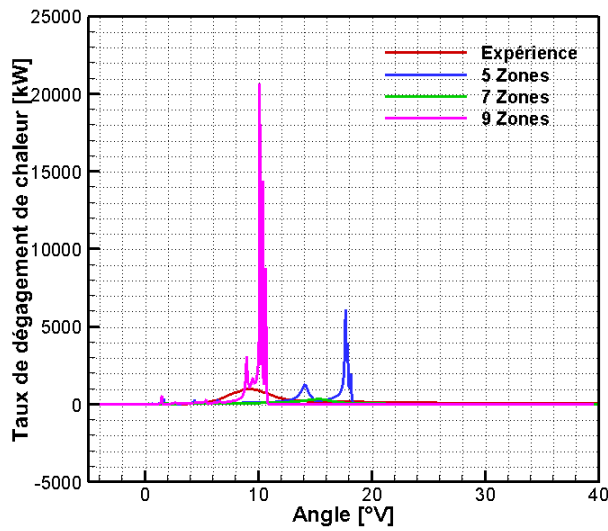


Figure 215a : Comparaison des taux de dégagement de chaleur total

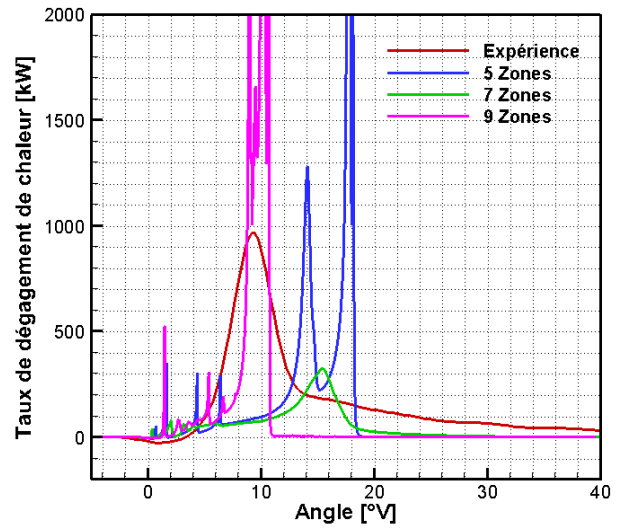


Figure 215b : Comparaison des taux de dégagement de chaleur total (Zoom)

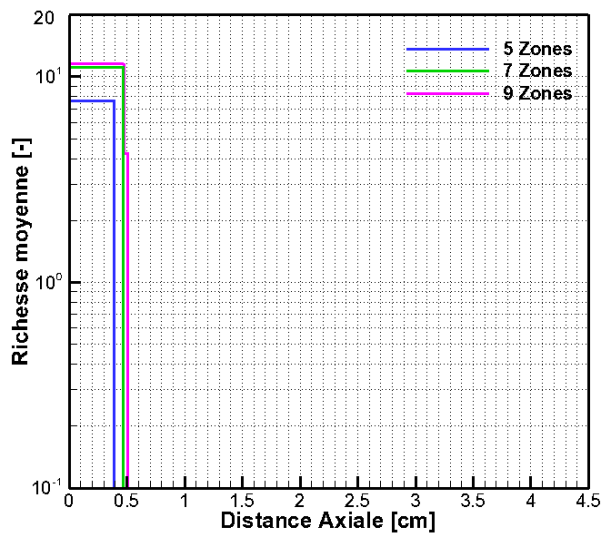


Figure 216 : Comparaison de la richesse à 0°V

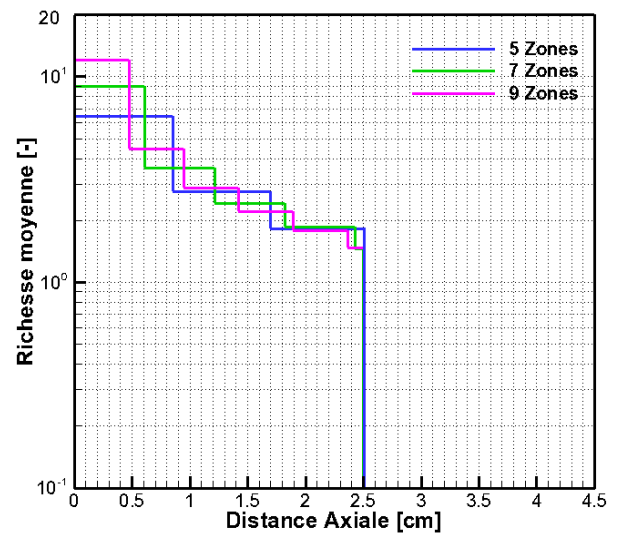


Figure 217 : Comparaison de la richesse à 4°V

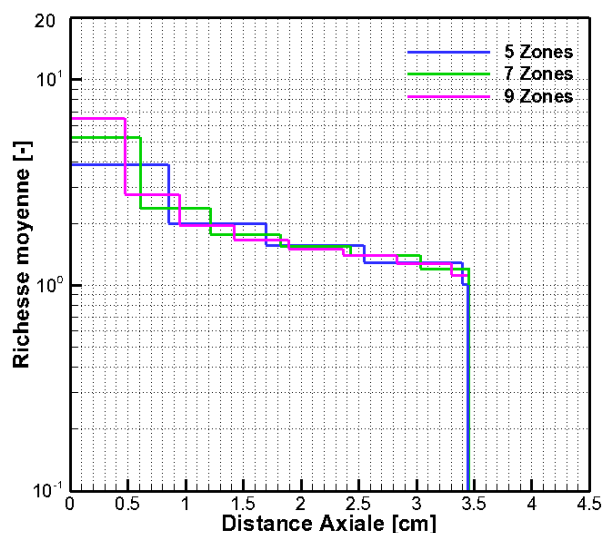


Figure 218 : Comparaison de la richesse à 6.7°V (EOI)

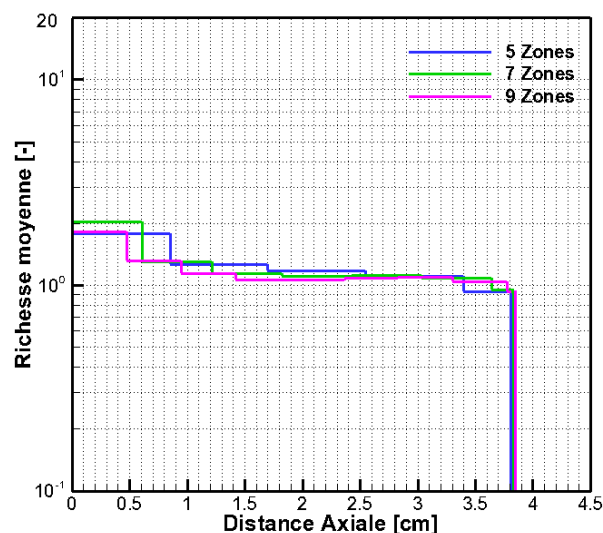


Figure 219 : Comparaison de la richesse à 8°V

La Figure 213 et la Figure 214 qui représentent les évolutions de la pression dans le cylindre et du dégagement de chaleur calculés avec 5, 7 et 9 zones montrent clairement qu'il n'y a pas d'évolution régulière des résultats en fonction du nombre de zones. Avec 9 zones, la combustion est avancée et plus intense que dans le cas de référence (5 zones), conduisant même à un dépassement de la pression expérimentale. Mais avec 7 zones, la tendance s'inverse et la combustion obtenue se limite à une combustion froide qui dégage très peu d'énergie. Sur la Figure 215 il apparaît que les délais d'inflammation varient en fonction du nombre de zones, le délai le plus court étant obtenu pour 9 zones et le plus long pour 7 zones. Cette évolution irrégulière du délai peut justifier les évolutions ultérieures de la combustion : compte tenu de la détente, plus le délai est long moins les conditions de pression et de température sont élevées et favorables à la combustion. De ce point de vue, le cas test de référence constitue une configuration plus « instable » par rapport à une configuration où l'injection et l'inflammation se produisent avant le PMH : une surestimation du délai a alors tendance à être compensée par l'augmentation de la pression et de la température à l'approche du PMH. Expérimentalement, les inflammations tardives dans la détente génèrent des disparités cycle à cycle élevées, voire des ratés d'allumage. Pour tenter d'expliquer l'évolution irrégulière du délai avec le nombre de zones, l'évolution axiale de la richesse à divers instants est représentée dans un cas inerte (Figure 216 à Figure 219). Il apparaît que, suivant les instants et les localisations considérés l'évolution de la richesse en fonction du nombre de zones n'est pas la même. Il est possible que ce comportement explique les résultats obtenus pour la combustion.

4.3.3.3 Découpage en zones

L'analyse effectuée dans une chambre à volume constant a déjà montré que le mode découpage en zones peut affecter les résultats de combustion. Cependant, les zones d'inflammation et les types de combustion étant différents, il apparaît intéressant d'étudier l'influence du découpage dans le cas moteur de référence (point n°2). Pour ce faire, un découpage en zones de volumes identiques est testé. Compte tenu de l'augmentation de section liée à l'angle du spray, la longueur des zones décroît alors lorsqu'on s'éloigne du nez de l'injecteur. Le Tableau 28 récapitule la longueur et le volume des différentes zones en fonction du mode découpage. la comparaison de la longueur et du volume des zones à la création des zones du spray sur les différentes façons de découpage des zones.

Zone		1	2	3	4	5
Zzones_fix	Longueur [cm]	0.85	0.85	0.85	0.85	0.85
	Volume [cm ³]	0.0057	0.0374	0.0995	0.1922	0.3154
Vzones_fix	Longueur [cm]	2.663	0.581	0.408	0.324	0.274
	Volume [cm ³]	0.13	0.13	0.13	0.13	0.13

Tableau 28 : Caractéristiques géométriques de deux modes de découpage en zones

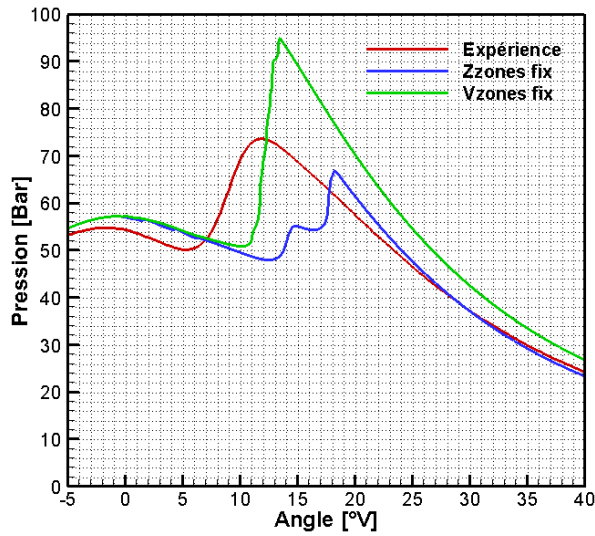


Figure 220 : Comparaison des pressions cylindre

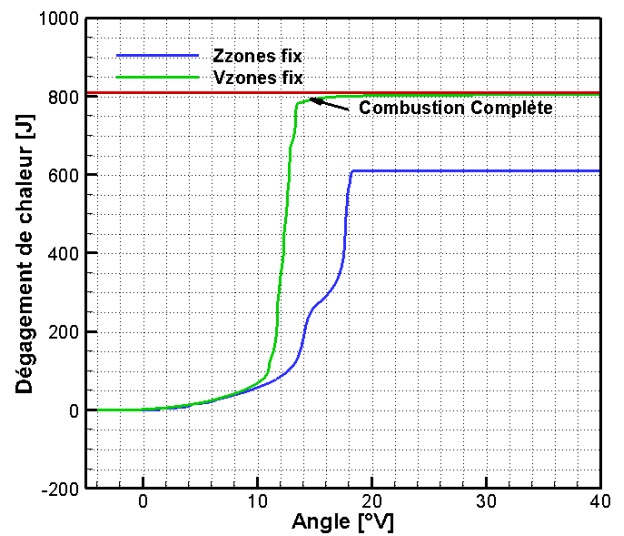


Figure 221 : Comparaison des dégagements de chaleur

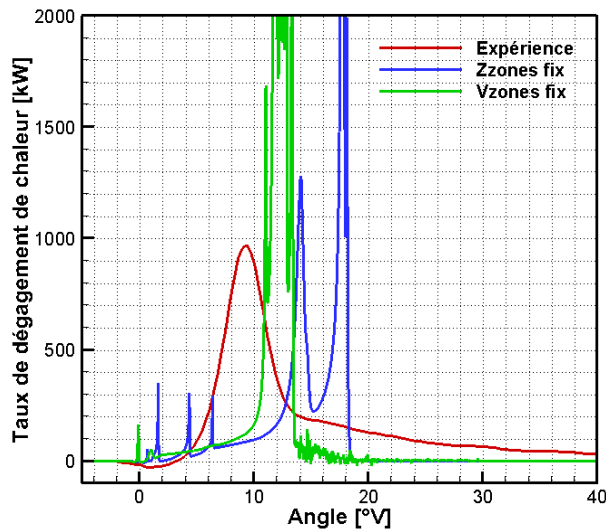


Figure 222 : Taux de dégagement de chaleur total

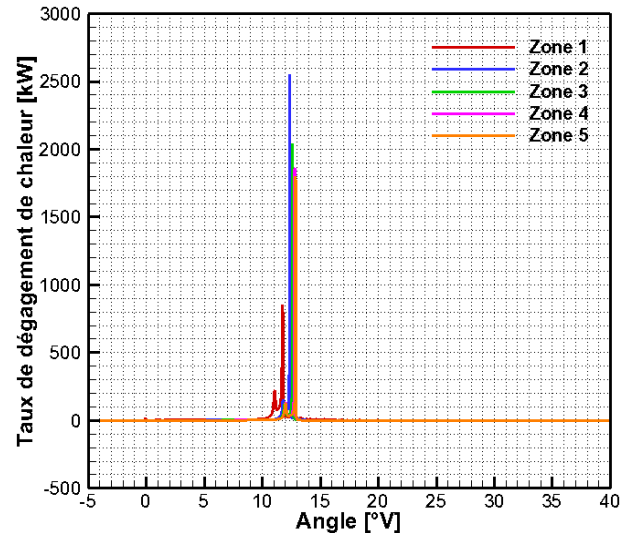


Figure 223 : Taux de dégagement de chaleur dans les zones

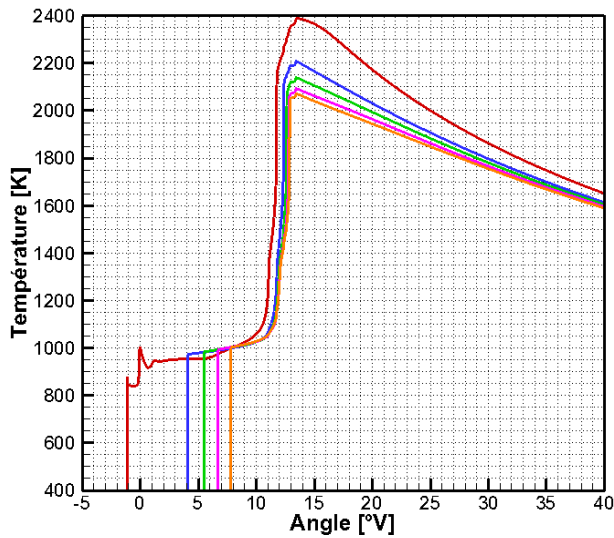


Figure 224 : Températures dans les zones (*Vzones fix*)

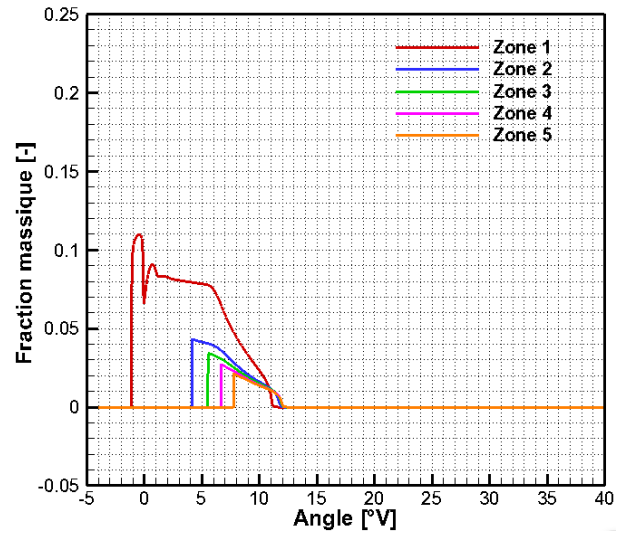


Figure 225 : Fractions massiques de C_7H_{16} vapeur (*Vzones fix*)

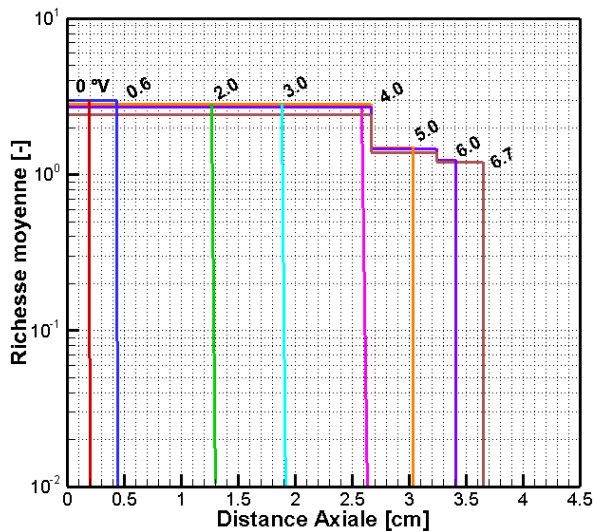


Figure 226a : Richesse avant la fin de l'injection, cas *inerte* (*Vzones fix*)

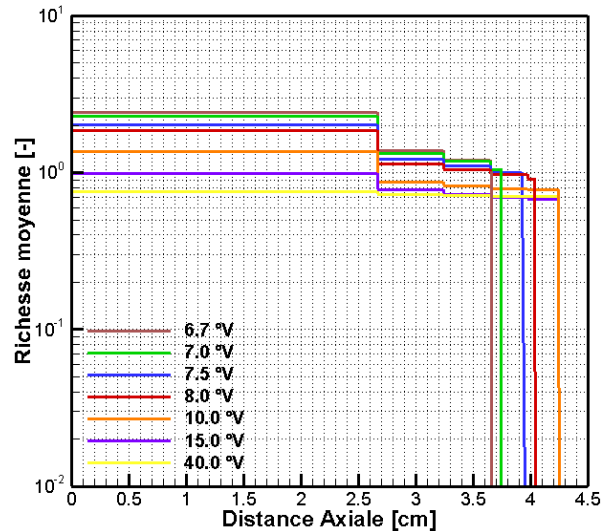


Figure 226b : Richesse après la fin de l'injection, cas *inerte* (*Vzones fix*)

Par rapport au découpage de référence, en zones de longueurs identiques, le découpage en zones de volumes identiques conduit effectivement à des résultats différents avec une combustion qui débute plus tôt, est plus intense et plus complète (Figure 220 à Figure 222). Si dans chaque zone le dégagement de chaleur a lieu en deux étapes, semblant indiquer une combustion froide suivie d'une combustion principale (Figure 223), les deux étapes ne sont plus perceptibles sur le dégagement total (Figure 222). Il apparaît aussi que l'inflammation n'a plus lieu d'abord à la tête du spray mais dans la première zone. Cette dernière est beaucoup plus longue que dans le découpage standard et s'étend du nez de l'injecteur jusqu'à 2.6 cm. La température dans cette zone 1 atteint 2400 K (Figure 224), soit 600K de plus qu'avec le découpage en zones de longueurs identiques. La combustion s'étend ensuite aux zones situées en aval du spray. Cet allumage dans la zone la plus proche de l'injecteur ne concorde pas avec les observations expérimentales recensées dans la bibliographie. En fait les évolutions de la richesse à différents instants calculées dans un cas inerte (Figure 226) montrent un appauvrissement des zones proches de l'injecteur et une homogénéisation du spray beaucoup plus rapide qu'avec le découpage standard (Figure 161) et qui ne semble pas

conforme à la réalité. Aussi, même si les résultats globaux peuvent paraître intéressants l'analyse détaillée met en lumière des incohérences et ce mode de découpage ne sera pas retenu.

4.3.3.4 Coefficient d'évaporation

Le coefficient d'évaporation $Revap$ est ici diminué d'un facteur 10, passant de 10^6 à 10^5 . Au niveau global les différences observées sont faibles, tant pour la pression cylindre (Figure 227) que pour le dégagement de chaleur (Figure 228 et Figure 229). Une combustion légèrement plus rapide et complète lorsque l'évaporation est ralentie ($Revap=10^5$) peut s'expliquer par une température légèrement plus élevée au moment de l'inflammation, moins de chaleur ayant été prélevée pour l'évaporation du carburant. Une analyse détaillée montre que les évolutions du taux de dégagement de chaleur et des températures dans les zones (Figure 230 et Figure 231) sont très proches de celles obtenues avec la valeur de référence (Figure 169 et Figure 170). Finalement, la principale conséquence du changement de valeur de $Revap$ est une masse de carburant liquide environ 10 fois plus élevée dans la zone 1 (Figure 232, attention il y a 2 échelles différentes). Cependant la masse liquide dans les autres zones reste très faible, et le temps au bout duquel tout le liquide est évaporé ne varie pas. L'influence de ce coefficient reste donc limitée.

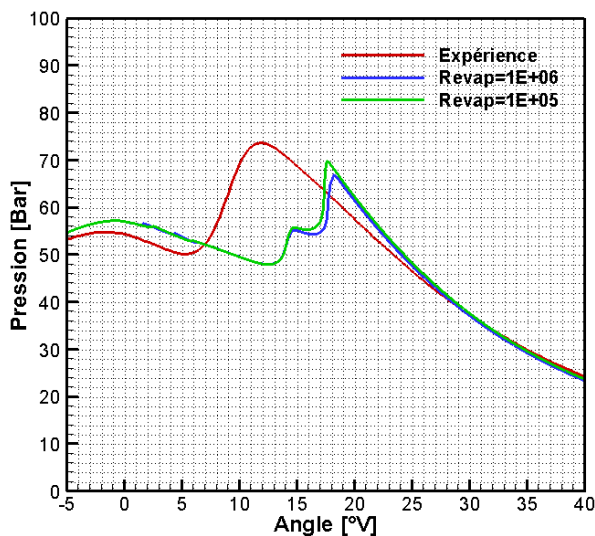


Figure 227 : Comparaison des pressions

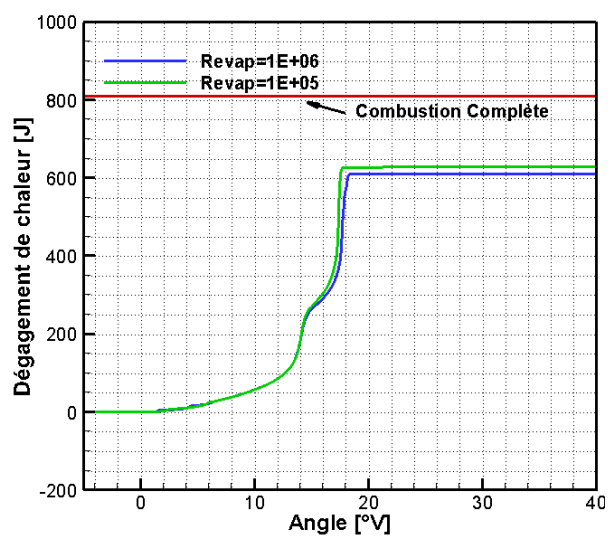


Figure 228 : Comparaison des dégagements de chaleur

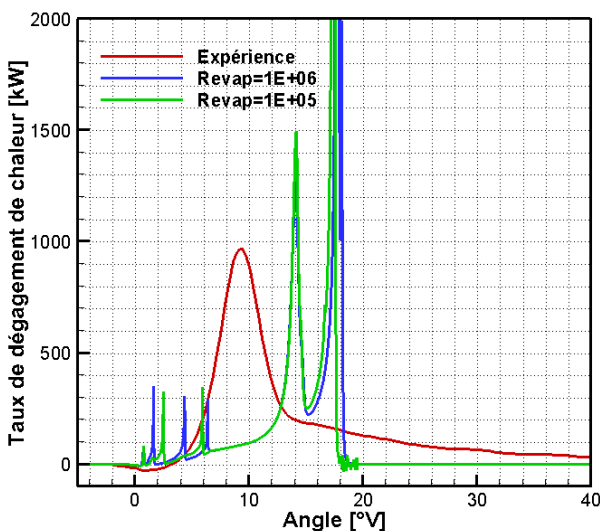


Figure 229 : Taux de dégagement de chaleur total

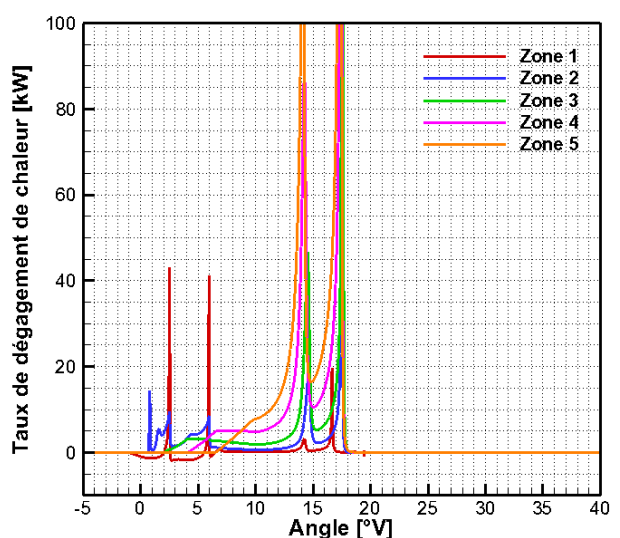


Figure 230 : Taux de dégagement de chaleur dans les zones
($Revap=10^5$)

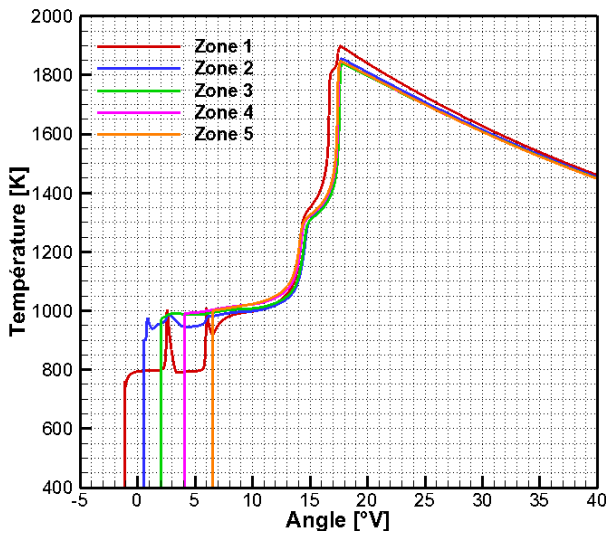


Figure 231 : Températures dans les zones ($Revap=10^5$)

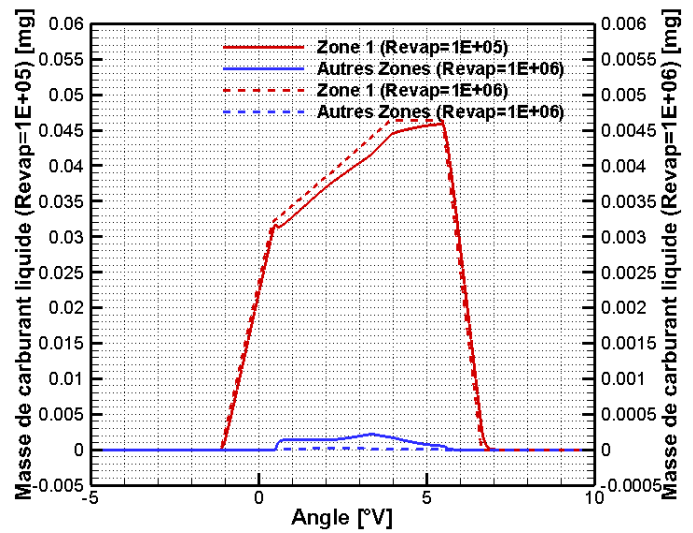


Figure 232 : Masses de carburant liquide dans les zones

4.3.3.5 Température du carburant

La température du gazole à la sortie de l'injecteur est difficile à mesurer et cette information n'est pas disponible pour les essais utilisés ici, et la température a été estimée à 100 °C. Pour évaluer l'influence de ce paramètre une température de 50 °C a également été simulée. L'évolution des fractions massiques de carburant liquide (Figure 238) n'est pas significativement modifiée par rapport au cas de référence (Figure 171), pas plus que la longueur liquide maximale (plus de 99% du carburant liquide se trouve dans la zone 1). En revanche, la diminution de la température du carburant conduit à une réduction générale des températures dans les zones (Figure 237) qui entraîne ensuite un allongement du délai d'inflammation et un retardement de la combustion (Figure 235) qui est aussi légèrement moins complète (Figure 234). Cet effet est également perceptible sur la pression cylindre (Figure 233). Cependant le déroulement général de la combustion, en particulier l'ordre d'inflammation des différentes zones (Figure 236) n'est pas altéré.

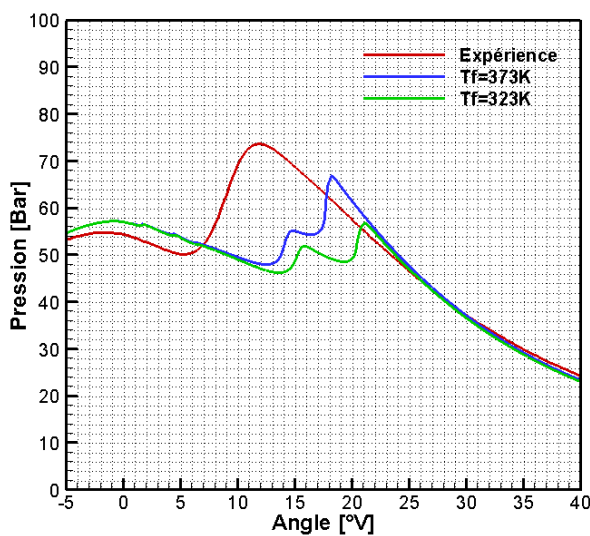


Figure 233 : Comparaison des pressions cylindre

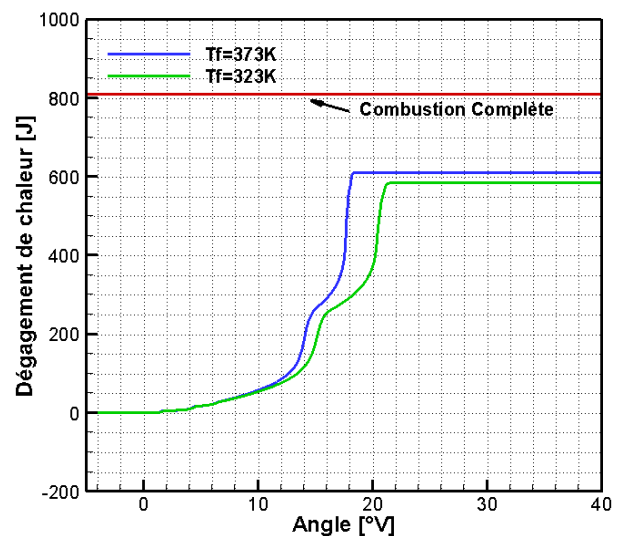


Figure 234 : Comparaison des dégagements de chaleur

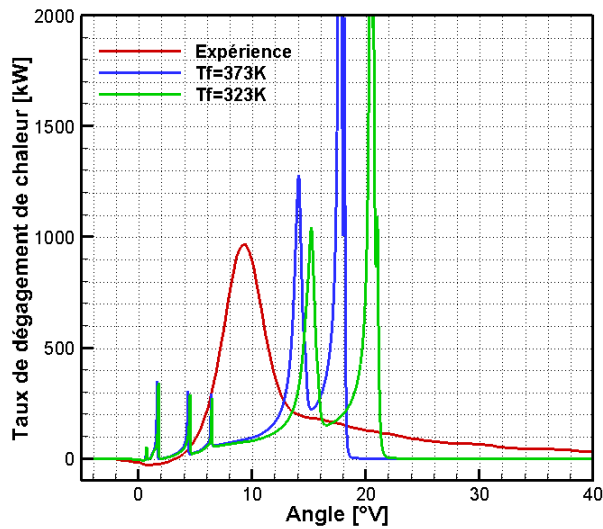


Figure 235 : Comparaison des taux de dégagement de chaleur

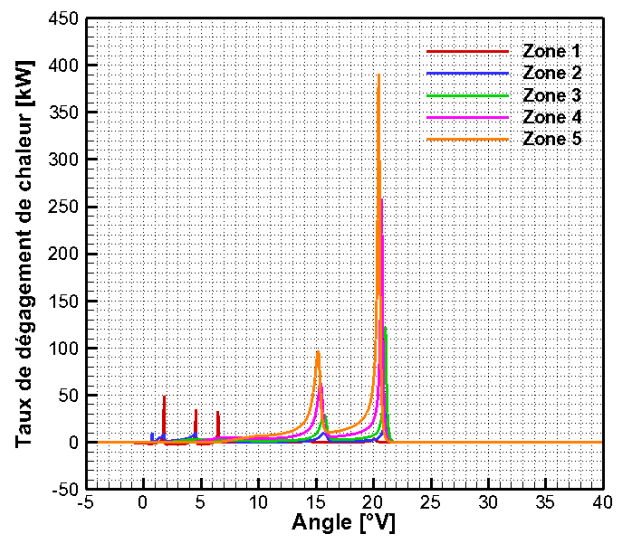


Figure 236 : Taux de dégagement de chaleur dans les zones (Tf=323 K)

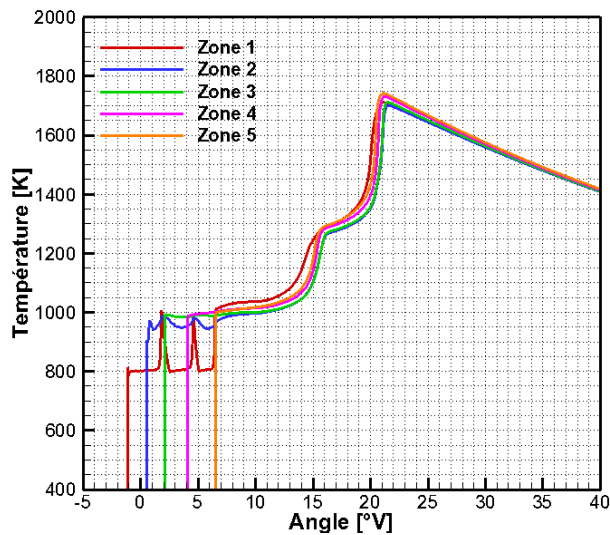


Figure 237 : Températures dans les zones (Tf=323 K)

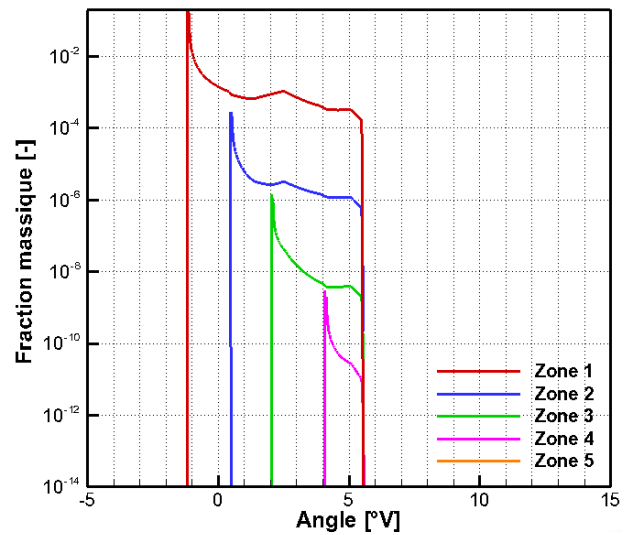


Figure 238 : Fractions massiques de carburant liquide (Tf=323 K)

4.3.3.6 Température de paroi

Dans les expériences, la température de paroi est un autre paramètre difficilement accessible. En outre, cette température n'est pas uniforme sur toutes les parois de la chambre de combustion et dépend des conditions de fonctionnement. Cependant, compte tenu des difficultés à estimer des températures différentes pour chaque surface, une valeur unique est utilisée dans ce modèle. Pour tester l'influence de ces hypothèses une température plus élevée de 50 K est testée.

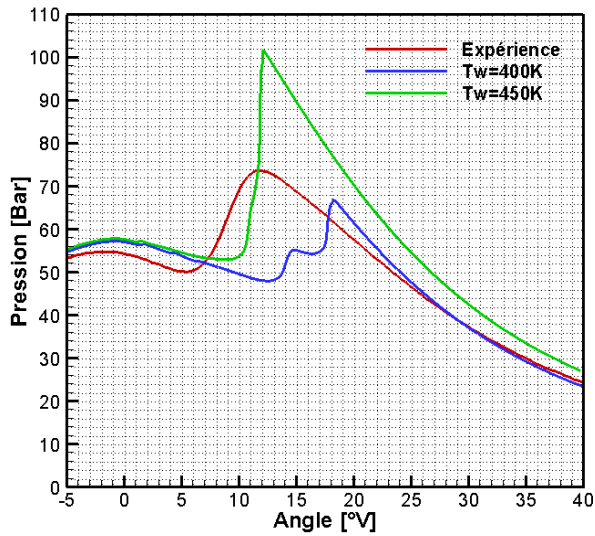


Figure 239 : Comparaison des pressions

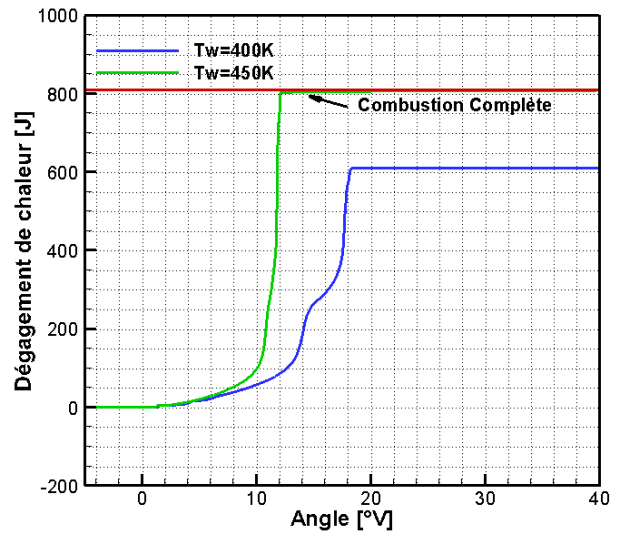


Figure 240 : Comparaison des dégagements de chaleur

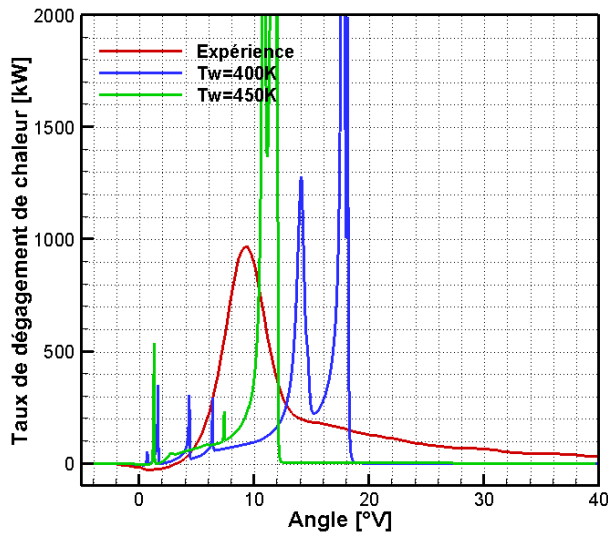


Figure 241 : Comparaison des taux de dégagement de chaleur

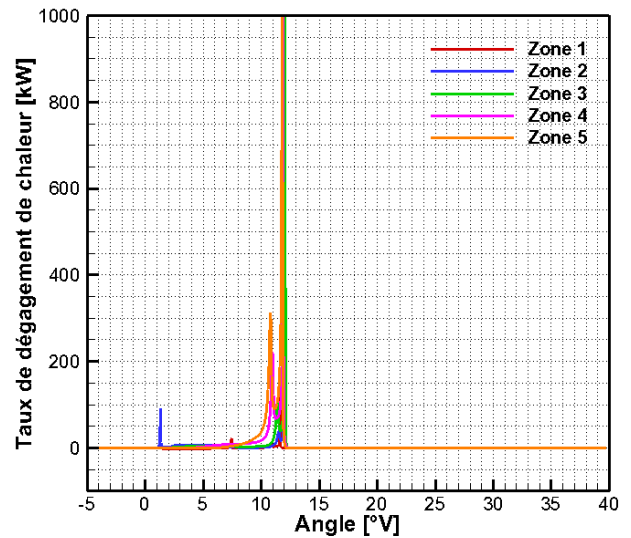


Figure 242 : Taux de dégagement de chaleur dans les zones ($T_w=450\text{ K}$)

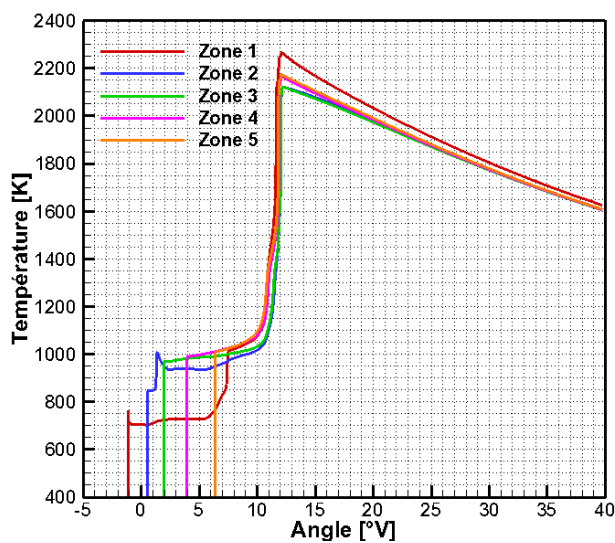


Figure 243 : Températures dans les zones ($T_w=450\text{ K}$)

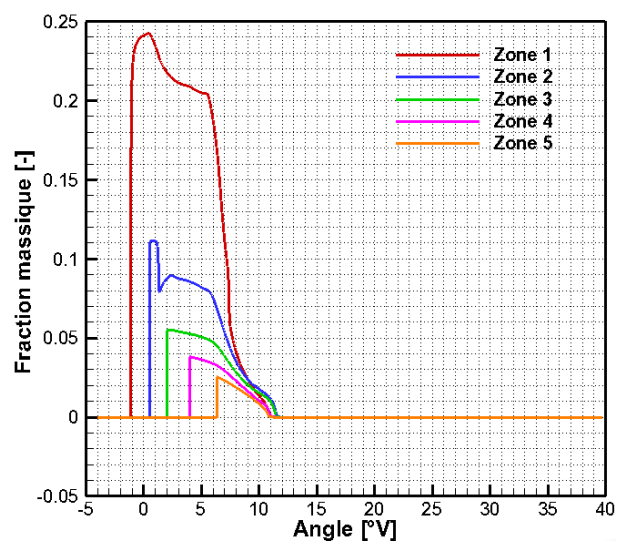


Figure 244 : Fractions massiques de C_7H_{16} ($T_w=450\text{ K}$)

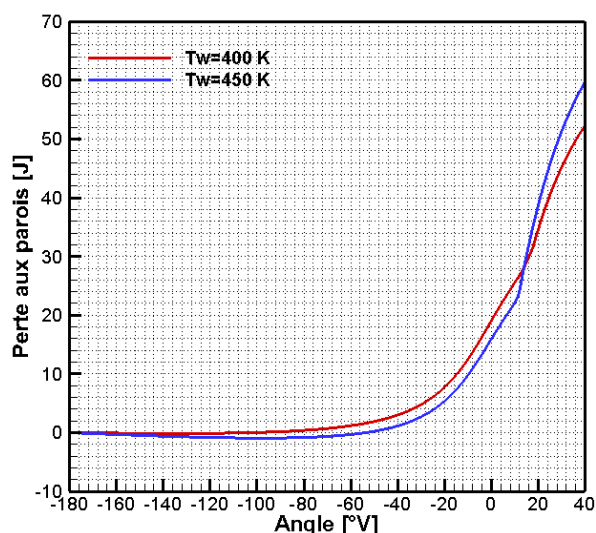


Figure 245 : Comparaison des pertes de chaleur cumulées à travers les parois

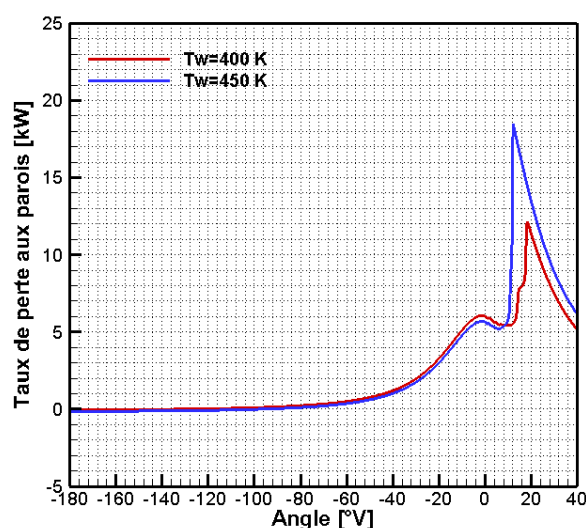


Figure 246 : Comparaison des flux thermiques instantanés à travers les parois

L'augmentation de 50K de la température des parois conduit pendant la phase de compression à une diminution des pertes thermiques à travers les parois (Figure 245 et Figure 246). Ainsi la température des gaz dans le cylindre est plus élevée au moment de l'injection. Par suite, les températures dans les zones du spray seront plus élevées au moment de l'inflammation (Figure 243) conduisant à un délai d'inflammation plus court, puis à une combustion plus rapide et plus complète (Figure 240 et Figure 241). La vitesse de combustion est d'ailleurs surestimée par rapport à la réalité et la pression cylindre maximale calculée est surestimée par rapport à la valeur mesurée (Figure 239). Il est à noter qu'au début de l'injection les températures dans les zones proches de l'injecteur (1 & 2) sont plus basses que dans le cas de référence (Figure 243 et Figure 169), en raison d'une évaporation plus intense, rendue possible par la température supérieure des gaz ambiants entraînés par le spray et qui se traduit par des fractions massiques de carburant vapeur plus élevées (Figure 244 et Figure 172). Toutefois le déroulement général de la combustion, en particulier l'ordre d'inflammation des différentes zones n'est pas modifié (Figure 242 et Figure 170). La Figure 245 et la Figure 246 montrent qu'après l'inflammation, comme la combustion est plus forte, les pertes thermiques deviennent plus importantes, en dépit de la température de paroi plus élevée. Au final, les pertes cumulées sont plus grandes que dans le cas de référence.

4.3.3.7 Coefficient C3 du modèle de Woschni

Afin de pleinement caractériser l'influence des pertes à travers les parois sur les résultats de combustion, un autre paramètre qui définit le flux de chaleur instantané dans le modèle de Woschni est également étudié. Une valeur plus petite par rapport au cas de référence (80 au lieu de 110) est utilisée pour obtenir une réduction des pertes. Les effets observés (Figure 247 à Figure 252) sont similaires à ceux obtenus précédemment en modifiant la température (4.3.3.6), quoique moins marqués : réduction du délai, combustion plus intense et complète. Toutefois l'augmentation de température pendant la combustion n'est pas suffisante pour compenser la réduction du coefficient C3 (Figure 254), si bien que les pertes cumulées sont ici inférieures (Figure 253)

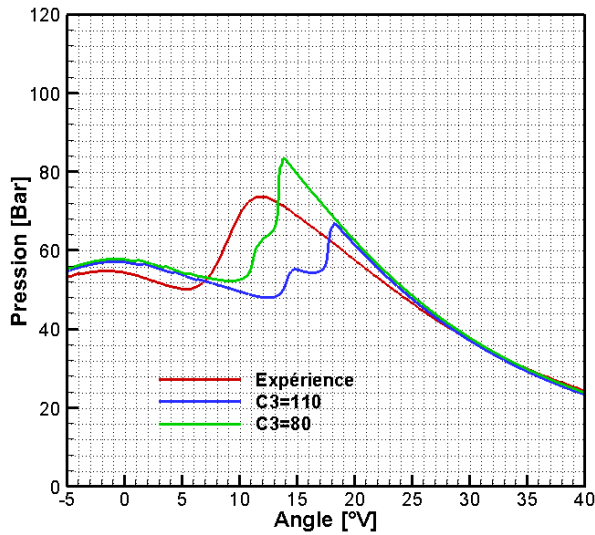


Figure 247 : Comparaison des pressions

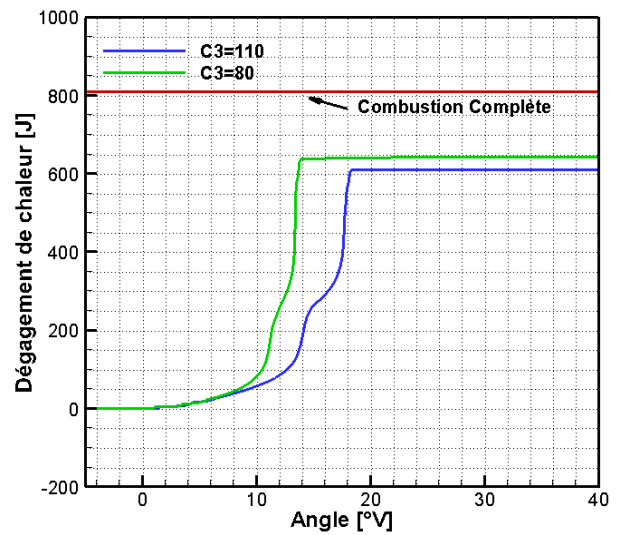


Figure 248 : Comparaison des dégagements de chaleur

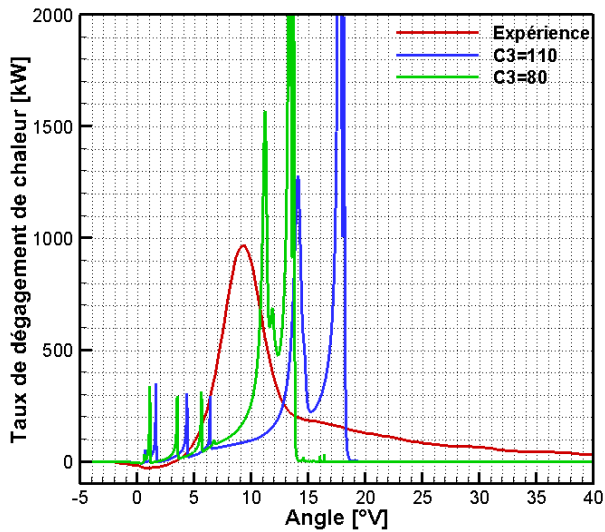


Figure 249 : Comparaison des taux de dégagement de chaleur

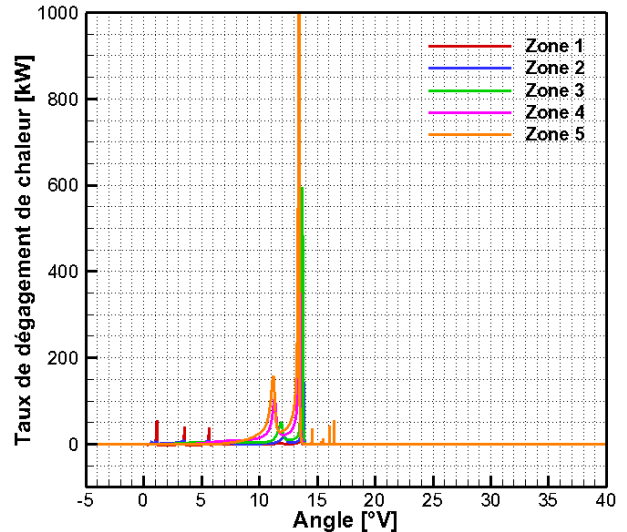


Figure 250 : Taux de dégagement de chaleur dans les zones (C3=80)

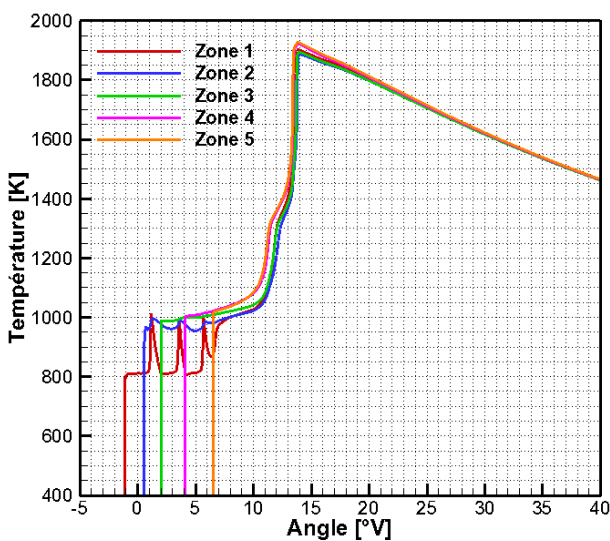


Figure 251 : Températures dans les zones (C3= 80)

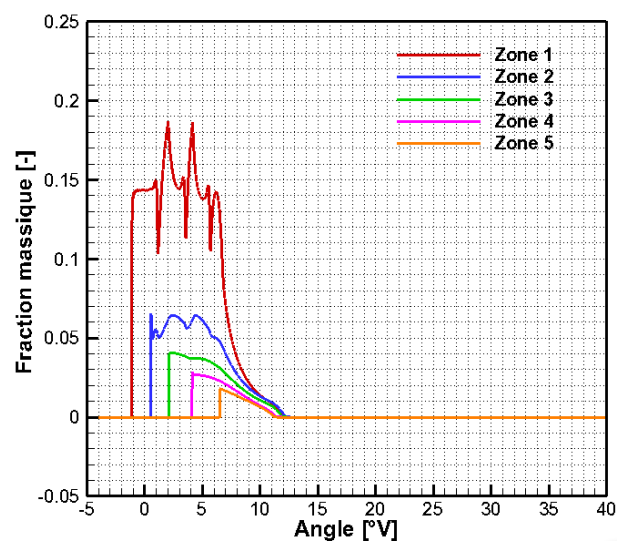


Figure 252 : Fractions massiques de $C_7H_{16,vap}$. (C3= 80)

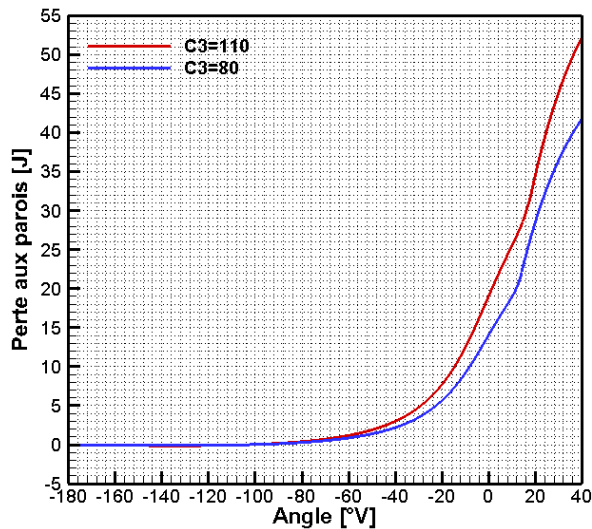


Figure 253 : Comparaison des pertes de chaleur cumulées à travers les parois

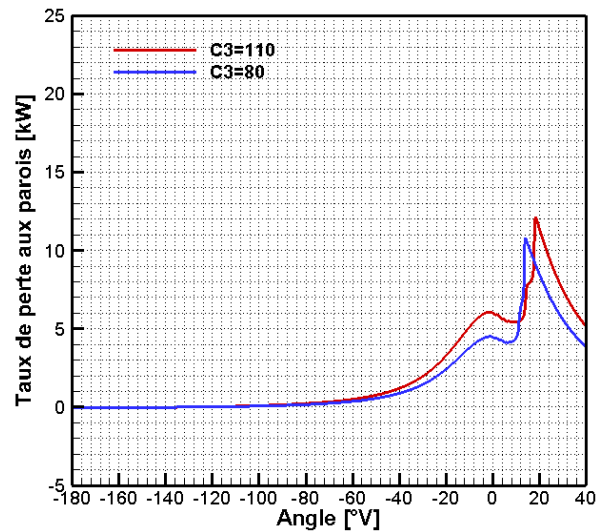


Figure 254 : Comparaison des flux thermiques instantanés à travers les parois

4.3.3.8 Coefficient Cjet du modèle d'angle de spray

Dans le sous-modèle d'angle de spray de Siebers, la densité du carburant liquide et la densité de l'air sont liés aux conditions de fonctionnement simulées. Par contre, le coefficient Cjet doit être ajusté pour obtenir le même angle ou la même pénétration (plus facilement évaluable) que l'expérience. En raison de l'absence d'accès optique dans le moteur utilisé comme support à la validation, il est difficile d'estimer précisément l'angle du spray (voir 4.1.6). Afin de quantifier les effets du paramètre Cjet sur le résultat final, une valeur légèrement supérieure à la valeur de référence est utilisée (0.52 au lieu de 0.5, soit des angles de spray de respectivement 26.1 deg et 26.5 deg).

L'augmentation de la valeur de l'angle conduit à un délai d'inflammation raccourci, suivi d'une combustion légèrement plus rapide et complète (Figure 255 à Figure 257), tous liés à une augmentation de l'entraînement de l'air (Figure 262) qui, comme déjà vu, aboutit à des zones plus pauvres, avec des températures plus élevées (Figure 259), sans pour autant modifier le déroulement général de la combustion (Figure 258 et Figure 260). L'augmentation de l'angle du spray conduit également à une pénétration légèrement moins rapide du spray (Figure 261).

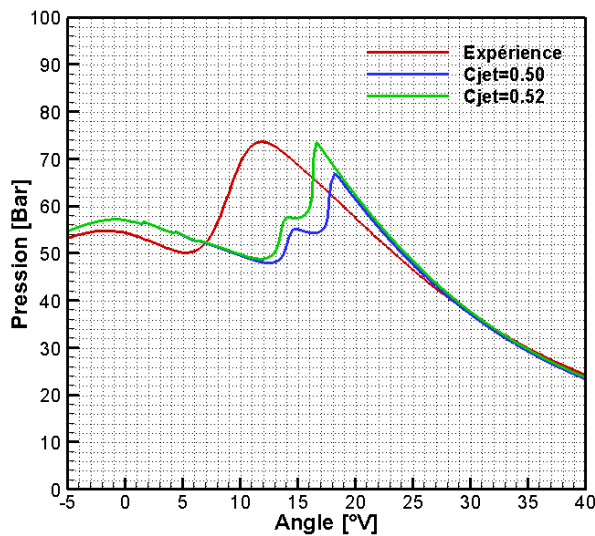


Figure 255 : Comparaison des pressions

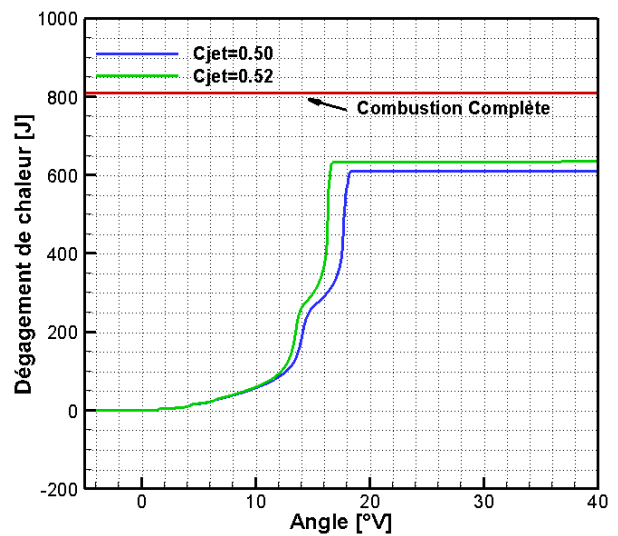


Figure 256 : Comparaison des dégagements de chaleur

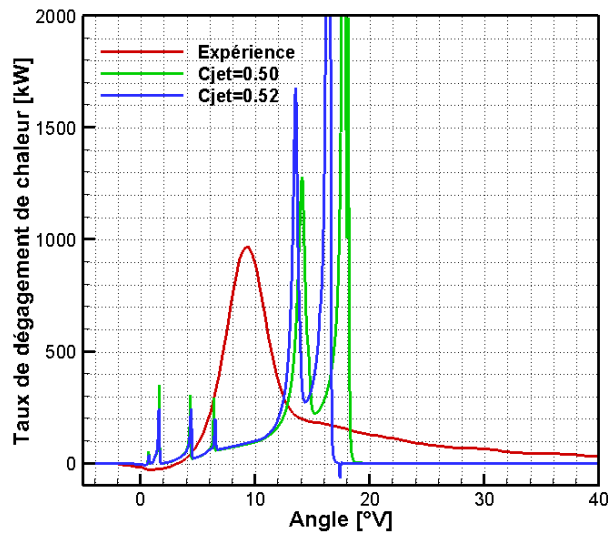


Figure 257 : Comparaison des taux de dégagement de chaleur

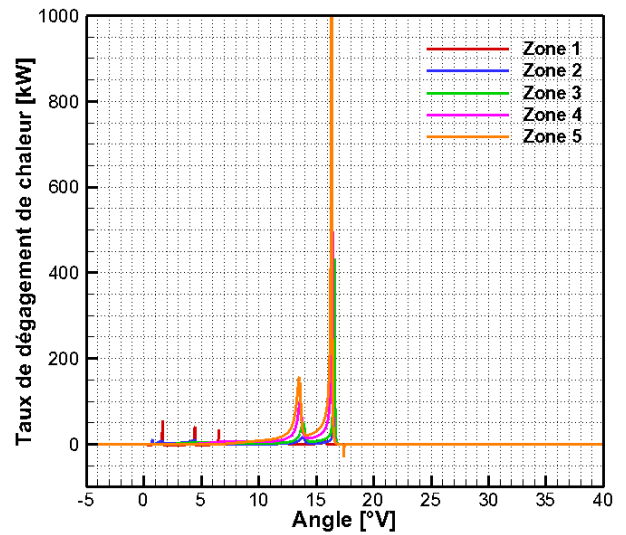


Figure 258 : Taux de dégagement de chaleur dans les zones ($C_{jet} = 0.52$)

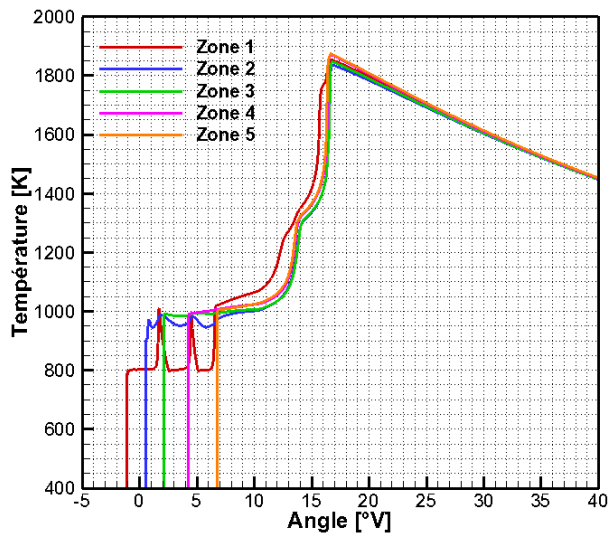


Figure 259 : Températures dans les zones ($C_{jet} = 0.52$)

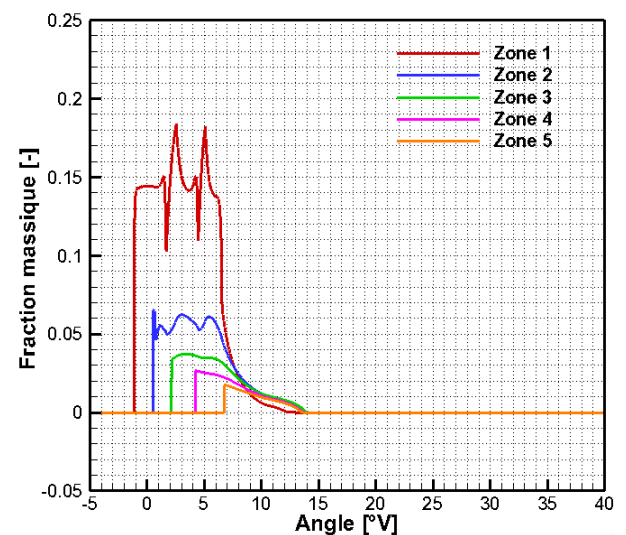


Figure 260 : Fractions massiques de C_7H_{16} ($C_{jet} = 0.52$)

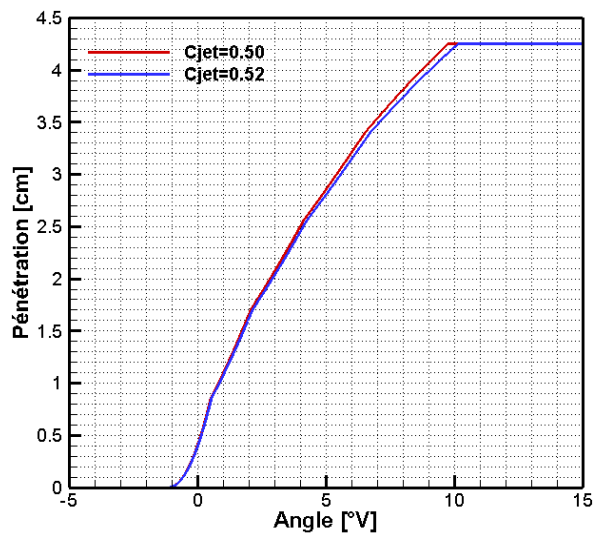


Figure 261 : Comparaison des pénétrations

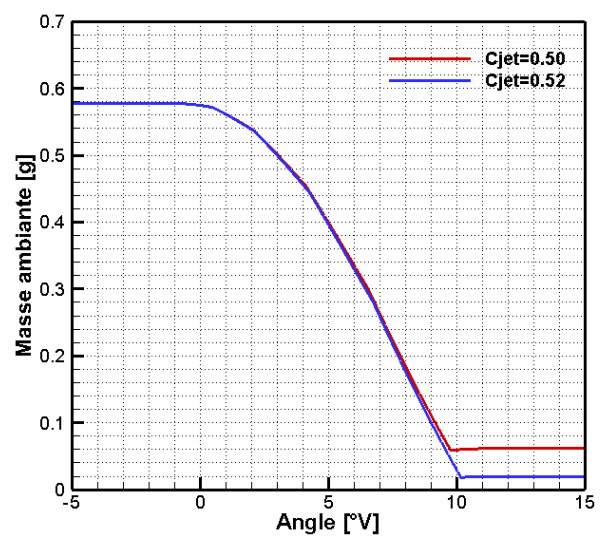


Figure 262 : Comparaison des masses des zones ambiantes

L'entraînement augmenté aboutit logiquement à une réduction de la masse de la zone ambiante (Figure 262) qui au moment de l'impact du spray sur la paroi est déjà très faible. Ainsi, une augmentation supplémentaire de l'angle aboutirait à entrainer l'intégralité de la masse de la zone ambiante avant l'impact. L'interaction entre les sprays n'étant pas modélisée, le modèle ne peut pas traiter ce genre de cas.

4.3.3.9 Impact du spray sur la paroi

Afin d'évaluer l'influence de l'impact du spray sur les parois, une combustion qui commence avant l'impact est choisie (point no.1). Tout en conservant la même longueur de zones, la position de la paroi est avancée jusqu'à l'extrémité de la zone 4. En conséquence, la pénétration maximale passe à 3.4 cm (Figure 263).

La Figure 264 montre qu'un impact avancé ne change pas le délai d'inflammation. D'une manière générale, les différences de dégagement de chaleur et de température sont très faibles (Figure 265 et Figure 266). A la fin de la simulation, la quantité de chaleur dégagée est identique (Figure 264). Sur la Figure 266, il apparaît que la combustion débute après l'impact du spray sur la paroi. Cependant, l'ordre d'inflammation des zones n'est pas modifié, l'inflammation commençant toujours en tête de spray (dernière zone), puis remontant vers l'injecteur.

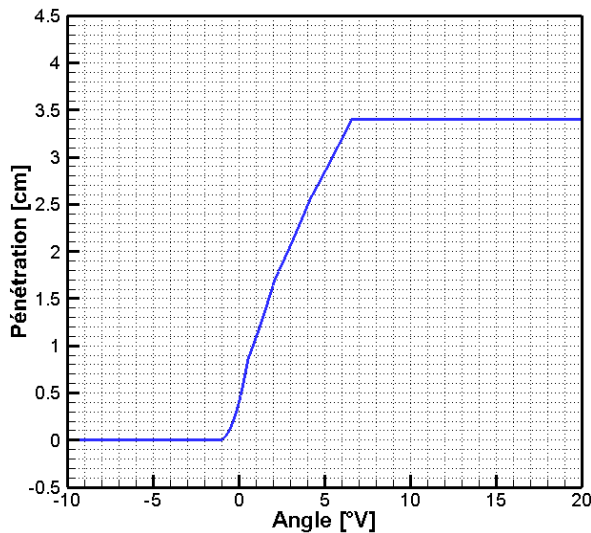


Figure 263 : Pénétration ($P_{max}=3.4$)

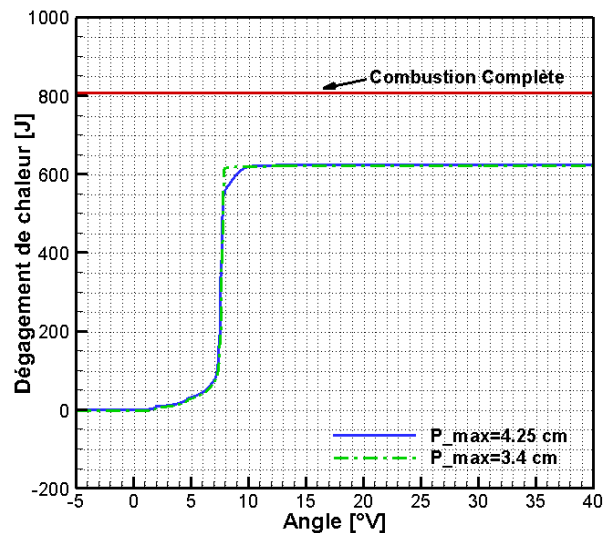


Figure 264 : Comparaison des dégagements de chaleur ($P_{max}=4.25$ et 3.4)

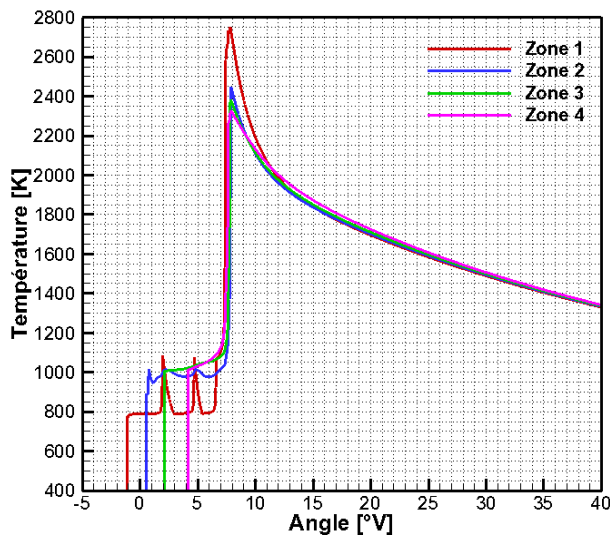


Figure 265 : Températures dans les zones ($P_{max}=3.4$)

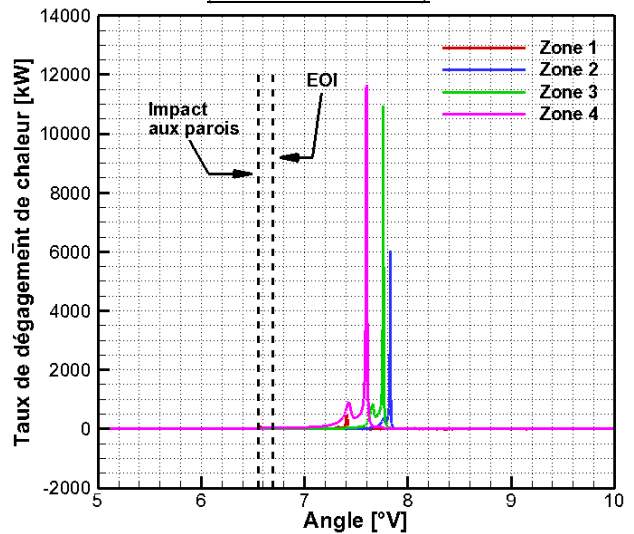


Figure 266 : Taux de dégagement de chaleur dans les zones ($P_{max}=3.4$)

4.3.4 Etude de sensibilité aux paramètres du modèle à chimie simplifiée (CS)

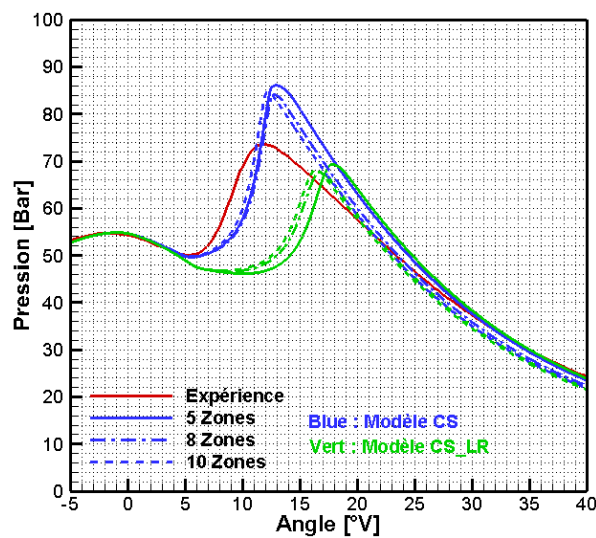
Les sensibilités aux paramètres des sous-modèles communs (évaporation, pertes aux parois, angle de spray) ont déjà été étudiées dans le cas du modèle CD (4.3.3) et ont permis d'aboutir à des conclusions claires, excepté pour l'influence du nombre de zones. Aussi pour le modèle de combustion à chimie simplifiée (CS) ou à chimie simplifiée avec limites de richesse (CS_LR), l'étude porte seulement sur les paramètres spécifiques et sur le nombre de zones. Les valeurs de référence et les valeurs comparées pour l'étude des modèles CS et CS_LR sont récapitulées dans le Tableau 29.

	Valeur de référence	Valeurs comparées
Nombre des zones	5	8, 10
A (facteur pré-exponentiel)	2.0 E+08	1.0 E+8, 3.0 E+8
E _a (énergie d'activation) [kJ/mol]	15780	14780, 16780
Limite de richesse supérieure (Modèle CS_LR)	2	1.5, 3
Limite de richesse inférieure (Modèle CS_LR)	0.2	0.05, 0.5

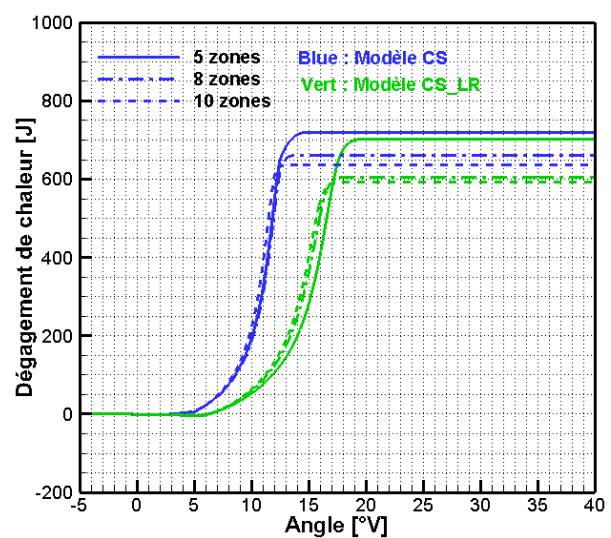
Tableau 29 : Etude de sensibilité aux valeurs des paramètres du modèle CS

4.3.4.1 Nombre de zones

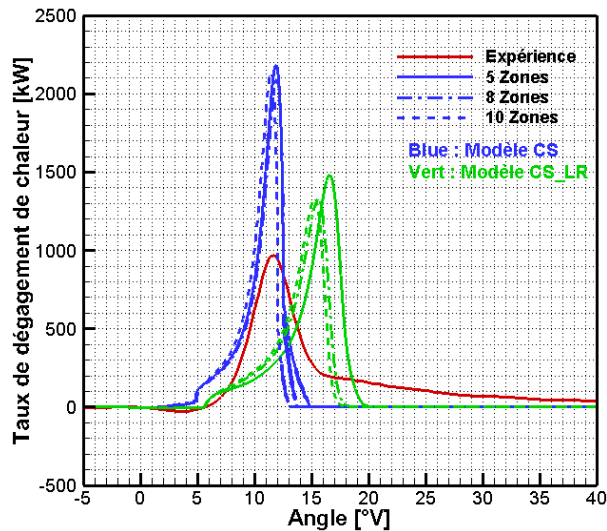
En supposant que la longueur des zones est identique, trois nombre des zones sont étudiés, avec des longueurs de zones de 0.85 cm (5 Zones), 0.53 cm (8 Zones) et 0.425 cm (10 Zones). La Figure 267 montre les résultats de la comparaison.



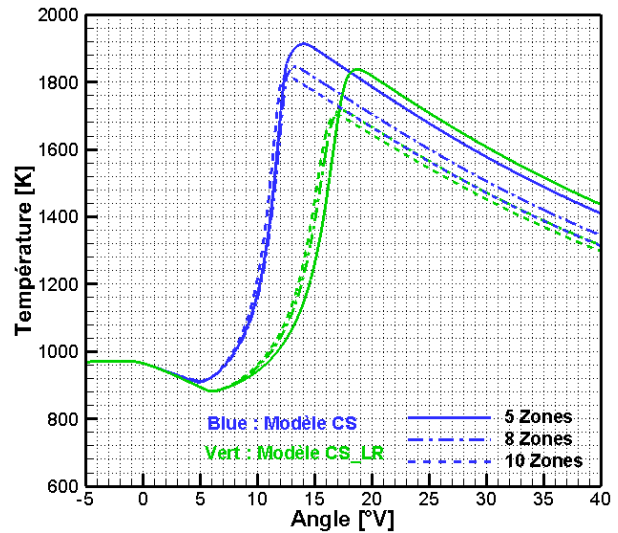
(a) : pression



(b) : dégagement de chaleur



(c) : taux de dégagement de chaleur



(d) : température moyenne

Figure 267 : Analyse de sensibilité au nombre de zones (Modèle CS et CS-LR)

Par rapport au nombre de zones de référence (5), l'augmentation du nombre des zones n'affecte le délai d'inflammation pour aucun des deux modèles (CS et CS_LR). Par contre, le taux de dégagement de chaleur augmente un peu plus rapidement lorsque le nombre de zones augmente et que la taille des zones diminue. Les pics de taux de dégagement de chaleur sont légèrement réduits, ce qui entraîne une baisse des températures et pressions maximales. Au moment de l'inflammation, les variations du nombre de zones modifient deux éléments : la masse de la zone ambiante et le flux de masse sortant de la dernière zone du spray. En effet, suivant le nombre de zones les pénétrations ne sont pas identiques, c'est-à-dire qu'au moment de l'impact du spray sur la paroi, les masses dans la zone ambiante sont différentes. De plus, comme la combustion commence dans la zone ambiante après l'impact, la composition dans cette zone varie donc légèrement en fonction du nombre de zones. Par ailleurs, les compositions dans les zones du spray varient également. Plus le nombre de zones est élevé, plus l'évolution axiale de la richesse est continue (chapitre 2.1). En conséquence, le flux de masse sortant de la dernière zone ($\dot{m} = \bar{\rho} \bar{\beta} u A$) varie aussi. Le Tableau 30 montre la comparaison des paramètres au moment de l'impact aux parois pour le modèle CS.

	5 Zones	8 Zones	10 Zones
Moment de l'impact [°V]	4.90	4.822	4.847
Masse ambiante [mg]	425.81	429.17	428.36
Section de dernière zone [cm ²]	0.715	0.772	0.792
Flux sortant de dernière zone [g/s]	68.66	67.97	69.44
Fraction massique de carburant [%]	6.00	5.13	5.4

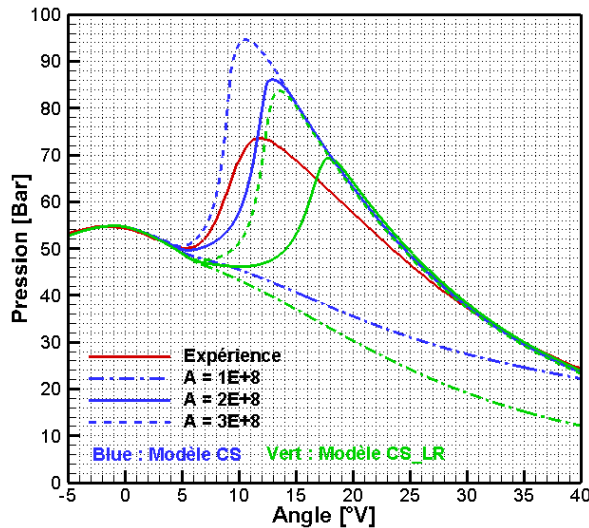
Tableau 30 : Comparaison de quelques paramètres au moment de l'impact sur les parois (modèle CS)

Contrairement au cas du modèle à chimie détaillée (4.3.3.2), la variation du nombre de zones semble ici produire des évolutions régulières des résultats qui semblent tendre vers une limite lorsque le nombre de zones augmente.

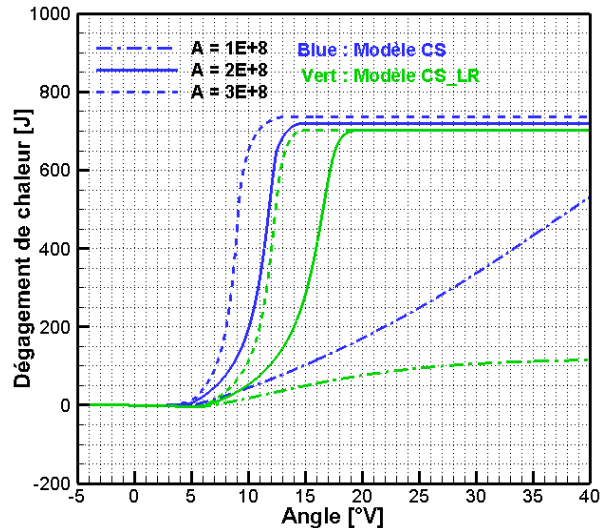
4.3.4.2 Paramètres du mécanisme simplifié

Pour le modèle à chimie simplifiée à 1 réaction, une loi d'Arrhenius est utilisée pour calculer la vitesse de réaction. Elle implique deux paramètres, A_a et E_a , dont l'influence est maintenant étudiée.

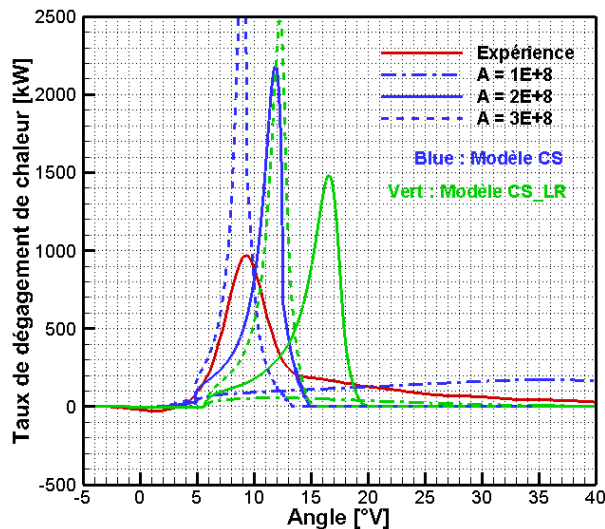
La Figure 268 montre l'analyse de sensibilité au facteur pré-exponentiel Aa , qui prend 3 valeurs : 10^8 , 2.10^8 (référence) et 3.10^8 . Comme attendu, il apparaît clairement qu'une augmentation de facteur pré-exponentiel accélère la combustion (Figure 268c). Toutefois, le délai d'inflammation n'est pas modifié car la combustion commence toujours en même temps que l'impact du spray sur les parois. Si la valeur est trop basse ($Aa = 10^8$), la combustion devient très lente et incomplète. Ces conclusions concernent les deux modèles (CS et CS_LR).



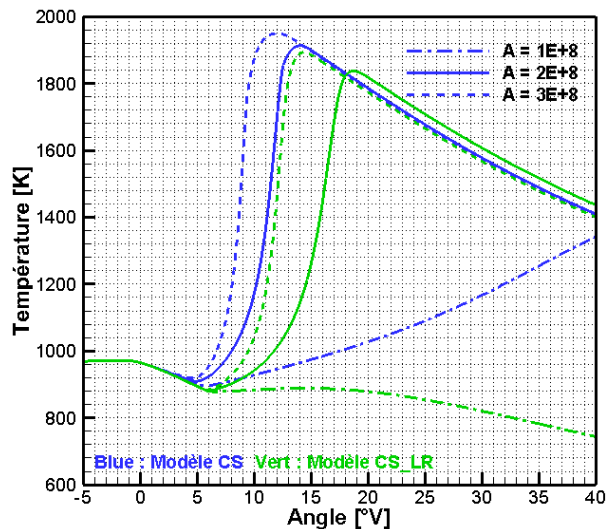
(a) : pression



(b) : dégagement de chaleur



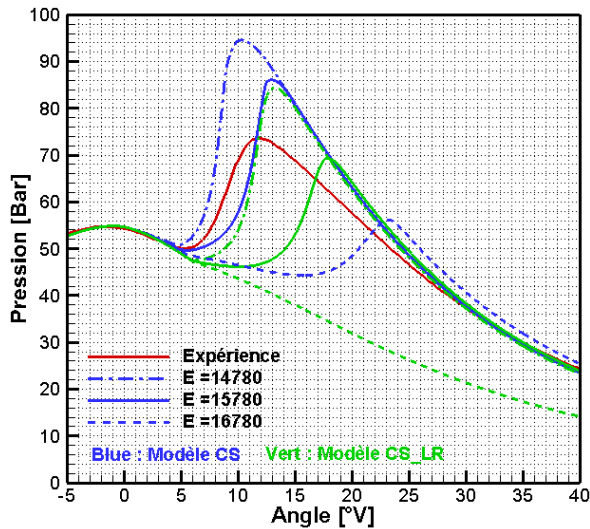
(c) : taux de dégagement de chaleur



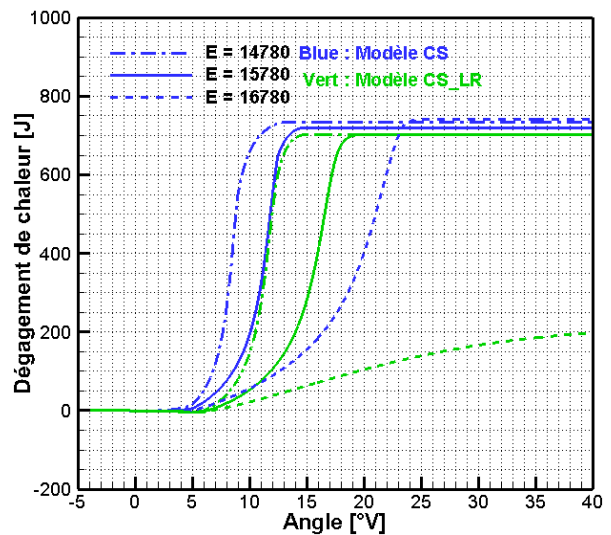
(d) : température moyenne

Figure 268 : Analyse de sensibilité au facteur pré-exponentiel A (Modèle CS et CS-LR)

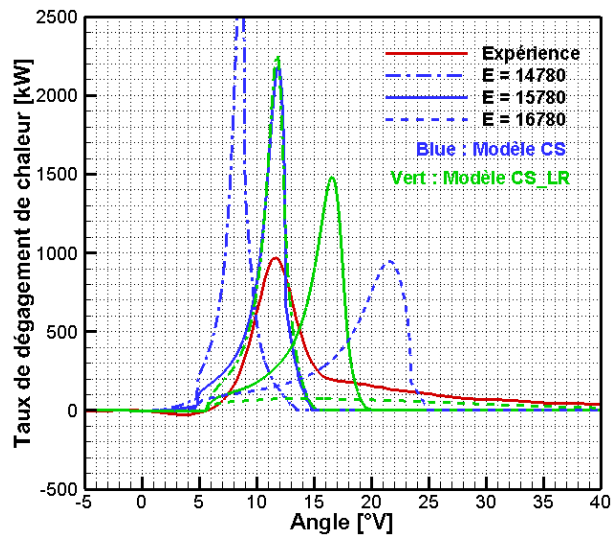
La Figure 269 montre l'analyse de sensibilité à l'énergie d'activation Ea , qui prend trois valeurs (en kJ/mol) : 14780, 1570 (référence) et 16780. Plus la valeur d' Ea est élevée, plus grande est l'énergie nécessaire pour activer la réaction, ce qui ralentit la combustion. Il est important de noter que le modèle CS_LR est plus sensible à ce paramètre (comparativement au modèle CS). Ainsi, une augmentation de seulement 6% de l'énergie d'activation change totalement le processus de combustion et aboutit à une combustion très incomplète.



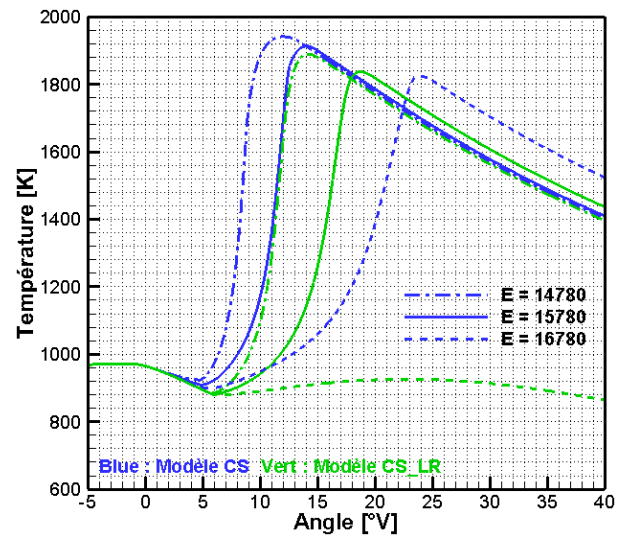
(a) : pression



(b) : dégagement de chaleur



(c) : taux de dégagement de chaleur

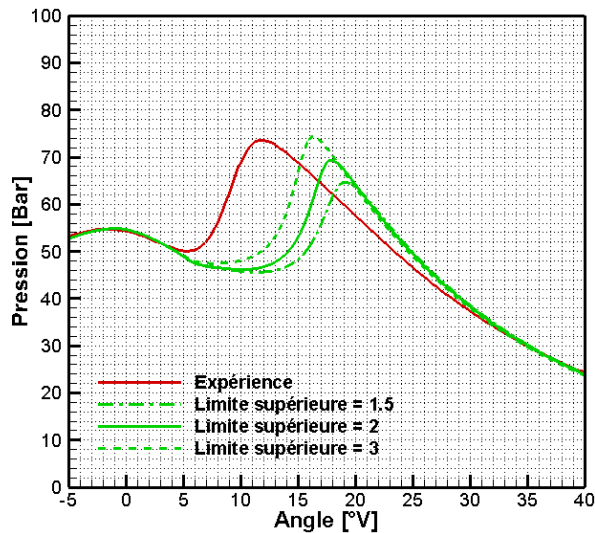


(d) : température moyenne

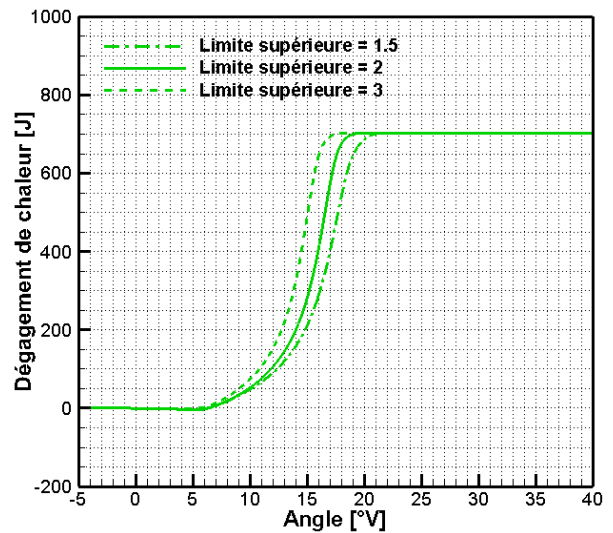
Figure 269 : Analyse de sensibilité à l'énergie d'activation E_a (Modèle CS et CS-LR)

4.3.4.3 Limites de richesse (Modèle SC_LR)

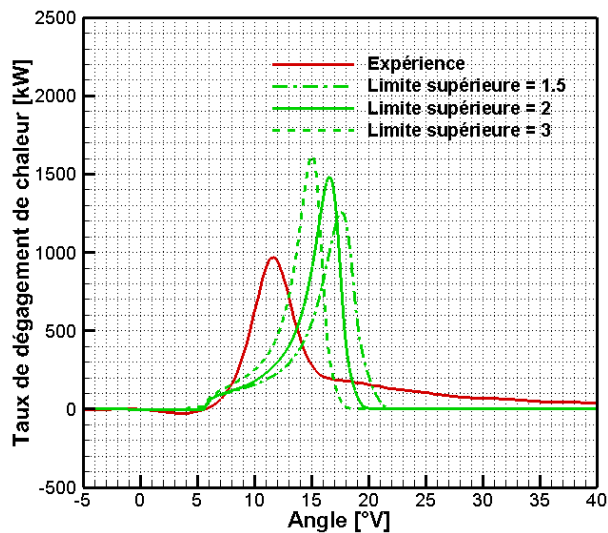
Les limites de richesse fixées dans ce modèle définissent une gamme de richesses favorables à la combustion et divise le mélange en deux parties: une partie prête à brûler et une partie qui n'est pas, en l'état susceptible de participer à la combustion, car trop riche ou trop pauvre. Plus la gamme de richesse permettant la combustion est étroite, plus la combustion sera ralentie par rapport à un modèle dépourvu de limites. La Figure 270 et la Figure 271 montrent respectivement les influences de limite supérieure et de la limite inférieure.



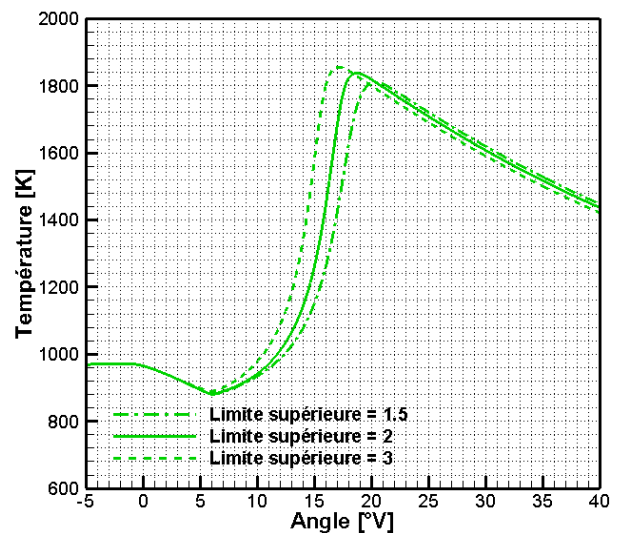
(a) : pression



(b) : dégagement de chaleur



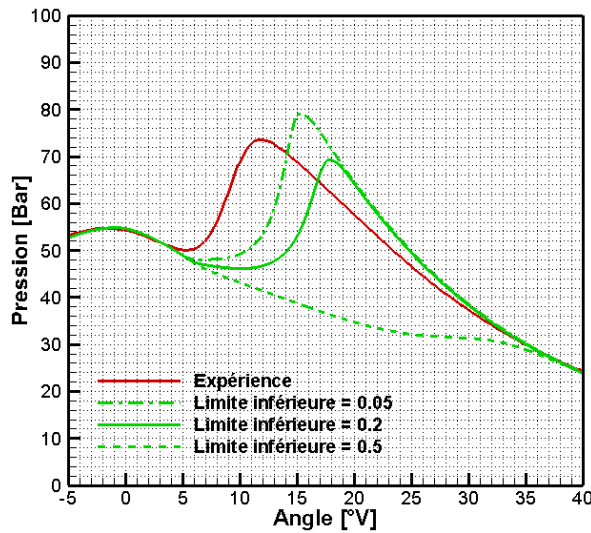
(c) : taux de dégagement de chaleur



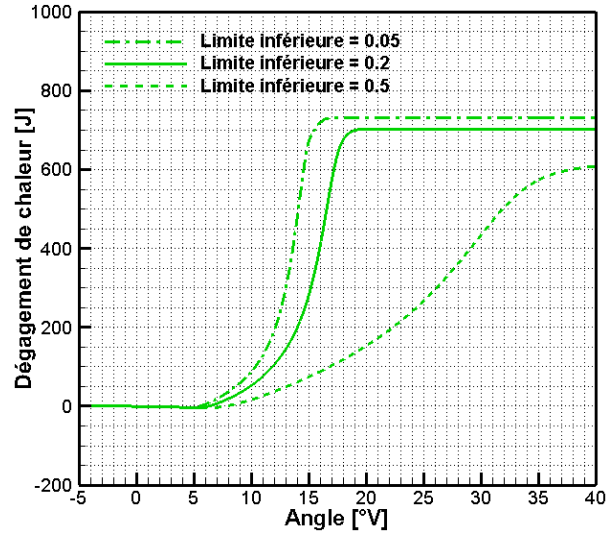
(d) : température moyenne

Figure 270 : Analyse de sensibilité à la limite de richesse supérieure (Modèle CS-LR)

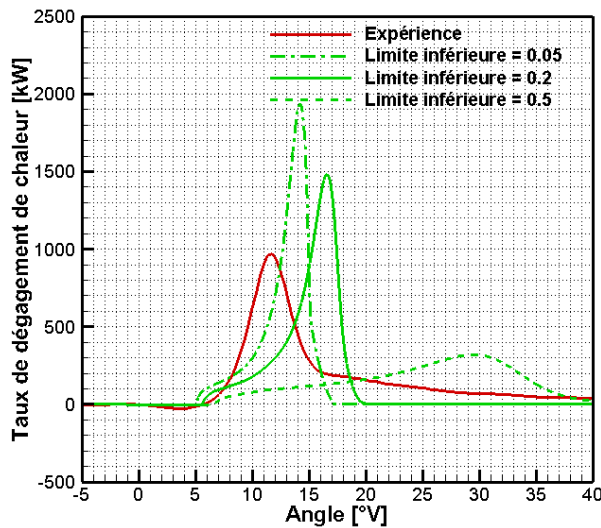
Trois valeurs sont testées pour la limite supérieure de richesse : 1.5, 2 (référence) et 3. La limite supérieure n'affecte pas le délai d'inflammation, car la combustion commence dans une zone pauvre. Ensuite, comme attendu, plus la limite supérieure de richesse est plus haute, plus la part de mélange concernée par la combustion est grande (Figure 270c). Cette partie de mélange supplémentaire contribue à accélérer la réaction. En suite, après la fin de l'injection, l'entraînement de l'air dilue rapidement le mélange trop riche (Figure 272 a et b) si bien que, in fine, l'intégralité du carburant brûle, quelle que soit la limite supérieure (Figure 270b).



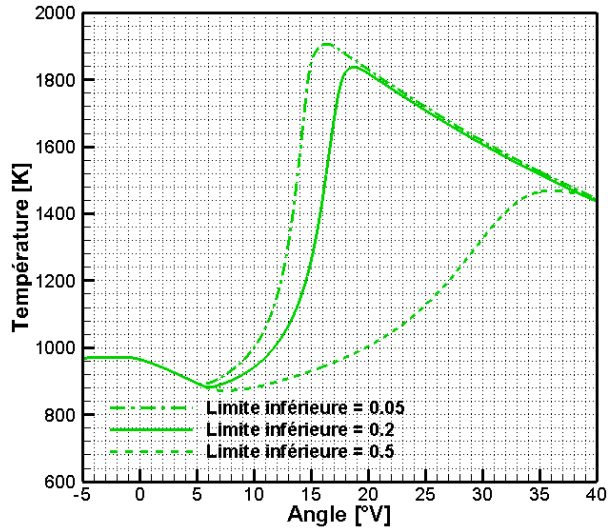
(a) : pression



(b) : dégagement de chaleur



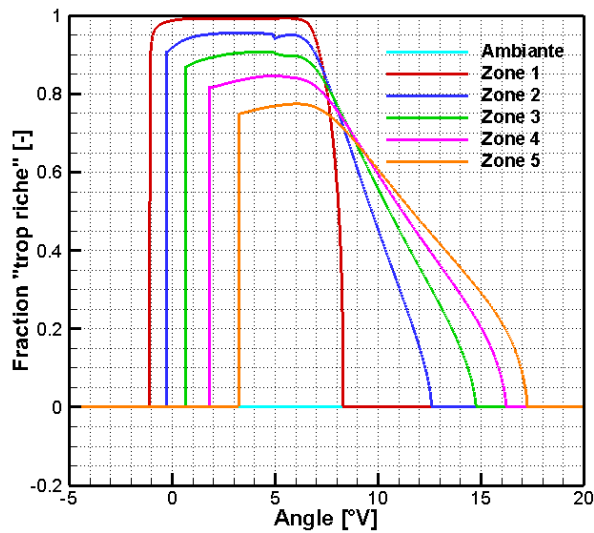
(c) : taux de dégagement de chaleur



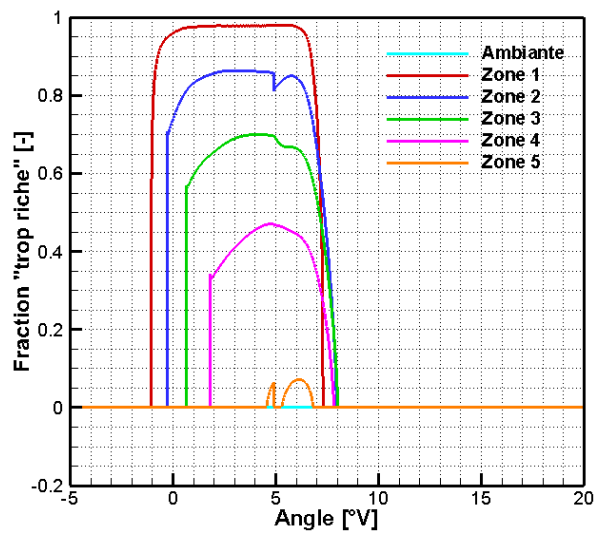
(d) : température moyenne

Figure 271 : Analyse de sensibilité à la limite de richesse inférieure (Modèle CS-LR)

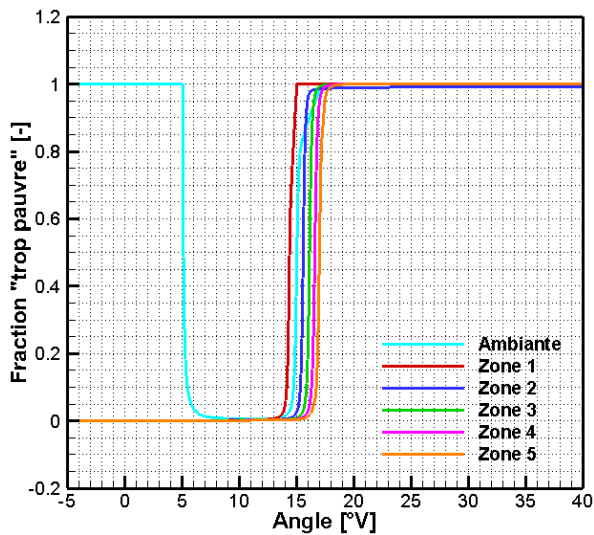
Trois valeurs sont testées pour la limite inférieure de richesse : 0.05, 0.2 (référence) et 0.5. La limite inférieure de richesse affecte aussi sur le taux de réaction : plus la limite est haute moins la part de mélange disponible pour brûler est grande. Les effets sont en outre plus marqués que pour la limite supérieure. En particulier, la zone ambiante, globalement pauvre est, cette fois ci, impactée (Figure 272 c et d). A l'issue du délai d'inflammation, la richesse dans la zone ambiante est faible. La Figure 271c montre qu'une part très important du mélange à une richesse inférieure à 0.5, dont une partie se situe entre 0.05 et 0.2. Avec une limite inférieure à 0.5, la combustion démarre lentement, l'augmentation de température dans la zone ambiante n'est pas suffisante pour élever la température des zones du spray et atteindre des valeurs qui permettent une combustion rapide. Ensuite, l'entraînement des gaz de la zone ambiante appauvrit rapidement le spray qui se retrouve en partie en dessous de la richesse limite inférieure (Figure 272 c et d). En conséquence, à la fin de simulation, une partie du carburant reste imbrulé (Figure 271b).



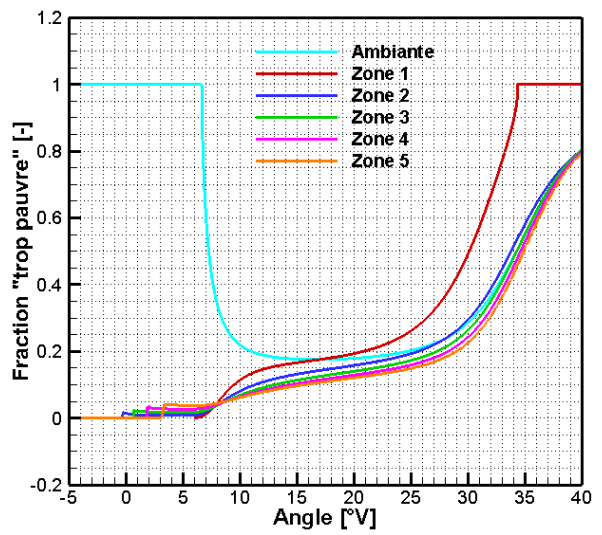
(a) : richesse supérieure = 1.5



(b) : richesse supérieure = 3



(c) : richesse inférieure = 0.05



(d) : richesse inférieure = 0.5

Figure 272 : Analyse de sensibilité aux limites de richesse inférieure et supérieure (Modèle CS-LR)

4.3.5 Etude de sensibilité aux paramètres du modèle sans chimie

Comme pour les modèles à chimie simplifiée, pour les modèles sans chimie (SC) et sans chimie avec « micro-mélange » (SC_MM), l'étude porte seulement sur les paramètres spécifiques et sur le nombre de zones. Les valeurs de référence et les valeurs comparées pour l'étude des modèles SC et SC_MM sont récapitulées dans le Tableau 31.

	Valeur de référence	Valeurs comparées
Nombre des zones	5	8, 10
ID (délai d'inflammation fixé) [°V ASOI]	7.3	6.2, 8.2
r_{reac} (Modèle SC)	2000	1500, 2500
c_G (Modèle SC_MM)	1	0.75, 1.25
c_k (Modèle SC_MM)	1	0.75, 1.25
k_{diff} (Modèle SC_MM)	6	4.5, 7.5

Tableau 31 : Etude de sensibilité aux paramètres des modèles SC et SC MM

4.3.5.1 Nombre de zones

Trois nombres de zones sont testés pour les modèles sans chimie: 5 (référence), 8, 10. La Figure 273 montre la comparaison des résultats.

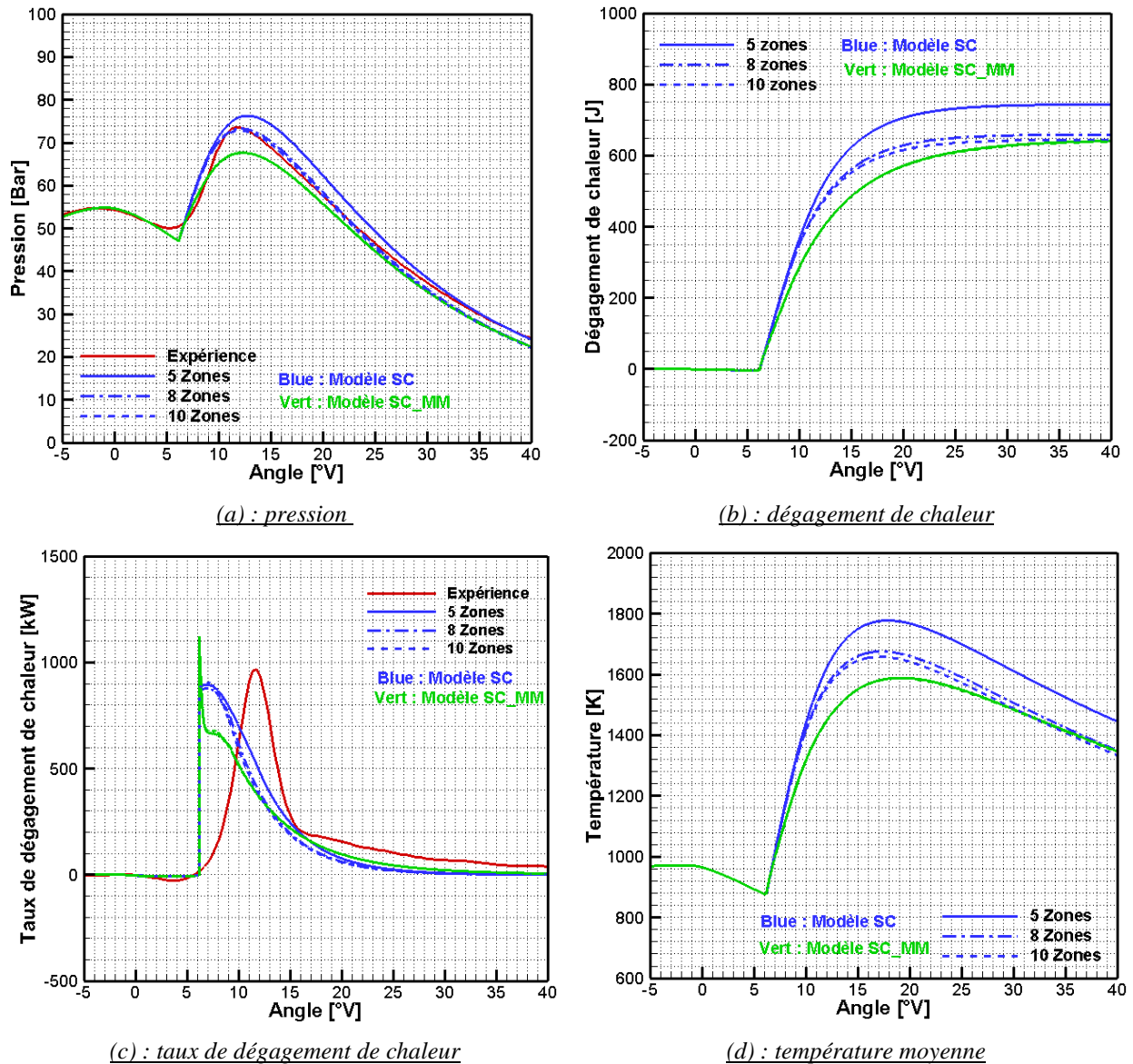


Figure 273 : Analyse de sensibilité au nombre de zones (Modèle SC et SC_MM)

D'une manière générale les tendances observées sont similaires à celles obtenues avec les modèles à chimie simplifiée (4.3.4.1). L'évolution des résultats en fonction du nombre de zones semble régulière. La phase initiale de combustion ne varie pas en fonction du nombre de zones. Les différences apparaissent essentiellement après le premier pic de taux de dégagement de chaleur (Figure 273 c). Plus le nombre de zones augmente, moins le taux de dégagement de chaleur est élevé. Naturellement, les différentes températures, notamment la température moyenne sont affectées (Figure 273 d). Les simulations du modèle SC à 8 ou 10 zones donnent des prédictions de pression très proches de l'expérience (Figure 273 a).

Concernant le modèle SC_MM, l'influence du nombre de zones apparaît beaucoup plus réduite.

4.3.5.2 Délai d'inflammation fixé

La Figure 274 montre une comparaison des résultats obtenus avec 3 valeurs de délai d'inflammation : 6.2°V , 7.3°V (référence) et 8.2°V , soit des débuts de combustion à 5°V , 6.16°V et 7°V après le PMH. En effet, même s'il s'agit ici d'une entrée du modèle, la détermination de ce paramètre dépend de la définition qu'on en donne (voir chapitre 1) et peut donc conduire à des valeurs légèrement différentes.

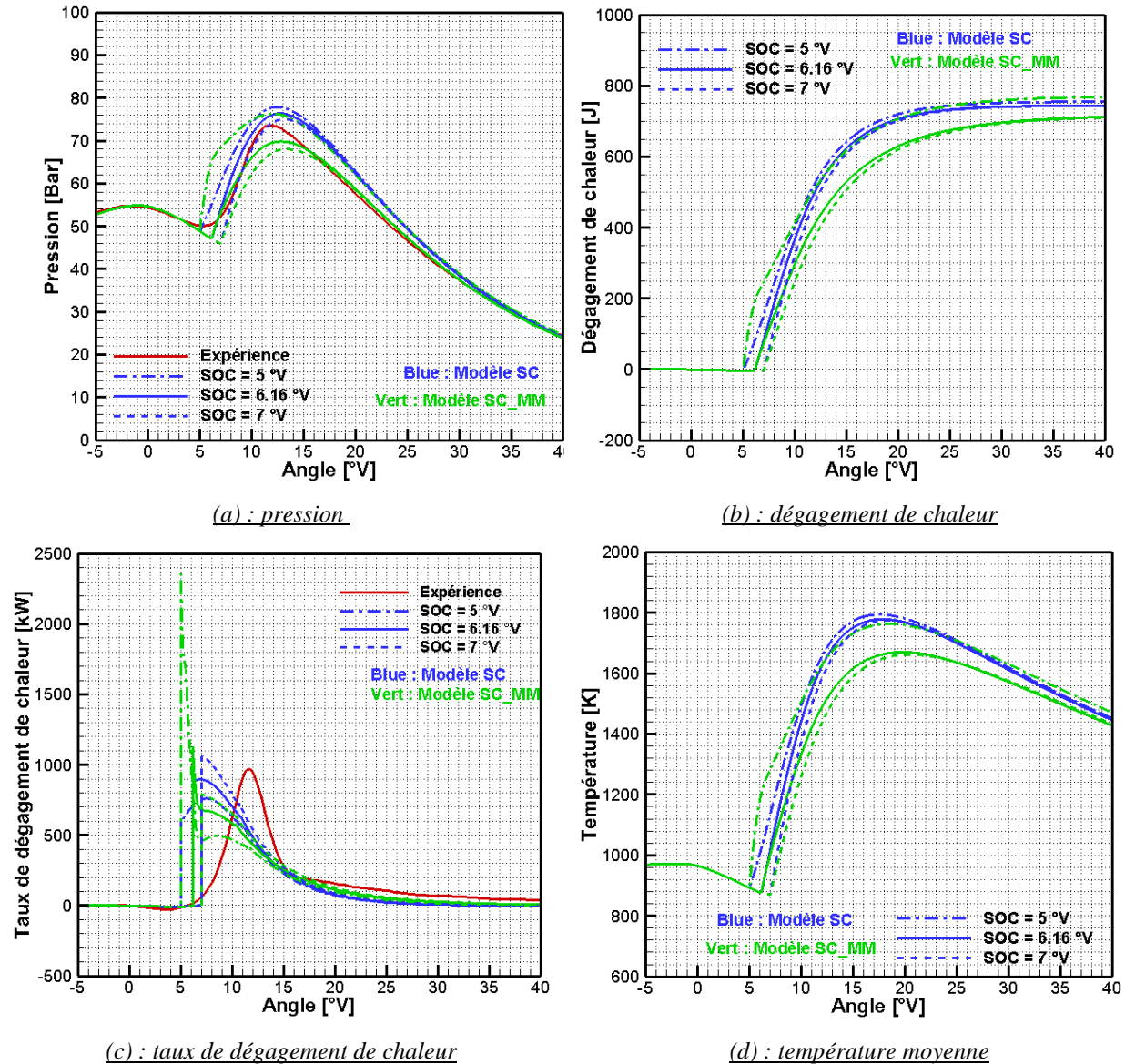


Figure 274 : Analyse de sensibilité au délai d'inflammation fixé (Modèle SC et SC_MM)

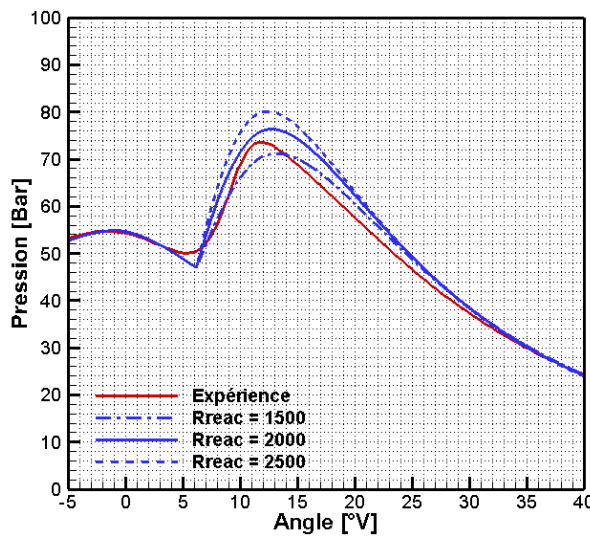
Le changement de délai d'inflammation modifie les compositions des zones au moment de l'inflammation. En particulier plus le délai est court, moins la masse de mélange prêt à brûler dans la zone ambiante est importante, car on est alors plus proche de l'impact du spray sur la paroi qui intervient 4.9°V après le PMH. Les effets sont ensuite différents selon le modèle considéré (SC ou SC_MM).

Pour le modèle SC, la fréquence de réaction r_{reac} est constante. Par conséquent, plus la masse de mélange dans la zone ambiante est importante, plus le pic de taux de dégagement de chaleur est élevé : à l'issue du délai, le mélange disponible réagit très rapidement avec une pente de taux de dégagement de chaleur quasi verticale, mais le pic de cette phase initiale est d'autant plus élevé que le délai est long.

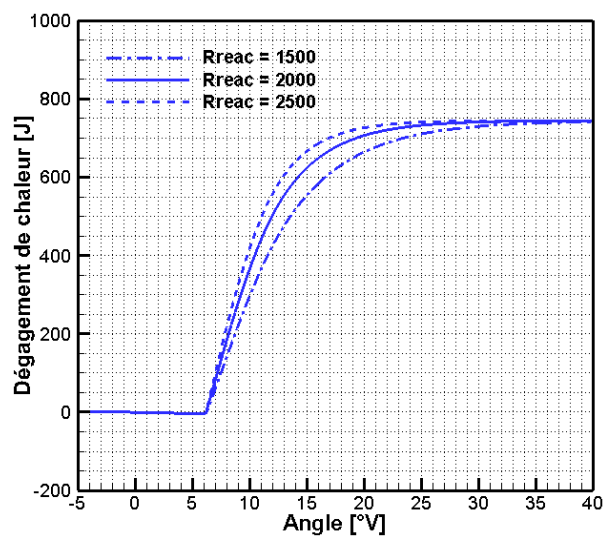
Pour le modèle SC_MM en revanche, le pic de taux de dégagement de chaleur est plus élevé quand le délai est plus court. Cela est lié à l'évolution de la fréquence de micro mélange. Une explication détaillée sera présentée dans la partie 4.3.5.4. La tendance obtenue ici semble incohérente avec les observations expérimentales qui montrent une augmentation du dégagement de chaleur initial lorsque le délai est augmenté. Elle est sans doute inhérente à la modélisation SC_MM telle qu'elle a été développée, dans laquelle le micro mélange n'affecte pas le carburant pendant le délai, contrairement à la réalité.

4.3.5.3 Paramètres de modèle SC

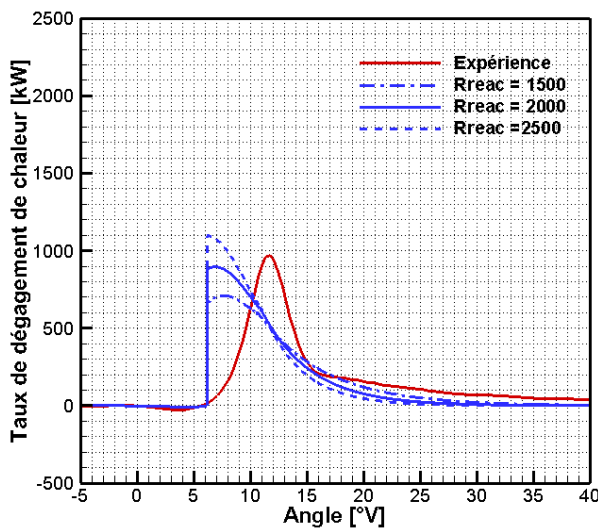
Dans le modèle SC, le coefficient r_{reac} détermine l'intensité de la réaction de combustion. Afin de situer son influence sur les résultats, trois valeurs distinctes sont testées : 1500, 200 (référence) et 2500. La Figure 275 compare les résultats obtenus. Comme attendu, une augmentation du coefficient R_{reac} accélère la combustion et le dégagement de chaleur.



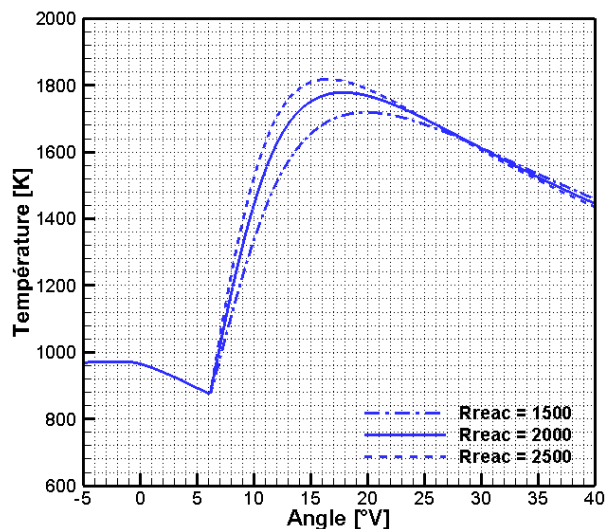
(a) : pression



(b) : dégagement de chaleur



(c) : taux de dégagement de chaleur



(d) : température moyenne

Figure 275 : Analyse de sensibilité au coefficient de réaction R_{reac} (Modèle SC)

4.3.5.4 Paramètres du modèle SC_MM

Dans le modèle SC_MM, le taux de réaction est déterminé par le processus de micro-mélange. En fait, le terme de fréquence de mélange f_{mix} correspond au coefficient de réaction r_{reac} dans le modèle SC, mais sa valeur varie au cours de la simulation, en fonction en particulier du processus d'injection, et dépend des valeurs de plusieurs coefficients empiriques.

Avant l'étude de sensibilité de ces coefficients, une analyse de la fréquence de mélange plus détaillée est proposée. Selon Barba, le processus de micro-mélange a deux sources : la turbulence causée par le mouvement du piston et celle causée par l'introduction du carburant. Le terme $c_G * c_m^2$ correspond à la vitesse de mélange liée au mouvement du piston (c_m est la vitesse du piston). La valeur de c_G est liée à la forme de la chambre de combustion et au swirl (c_G augmente avec le swirl). Le terme $ck*k$ représente la contribution à la turbulence liée à l'introduction du carburant.

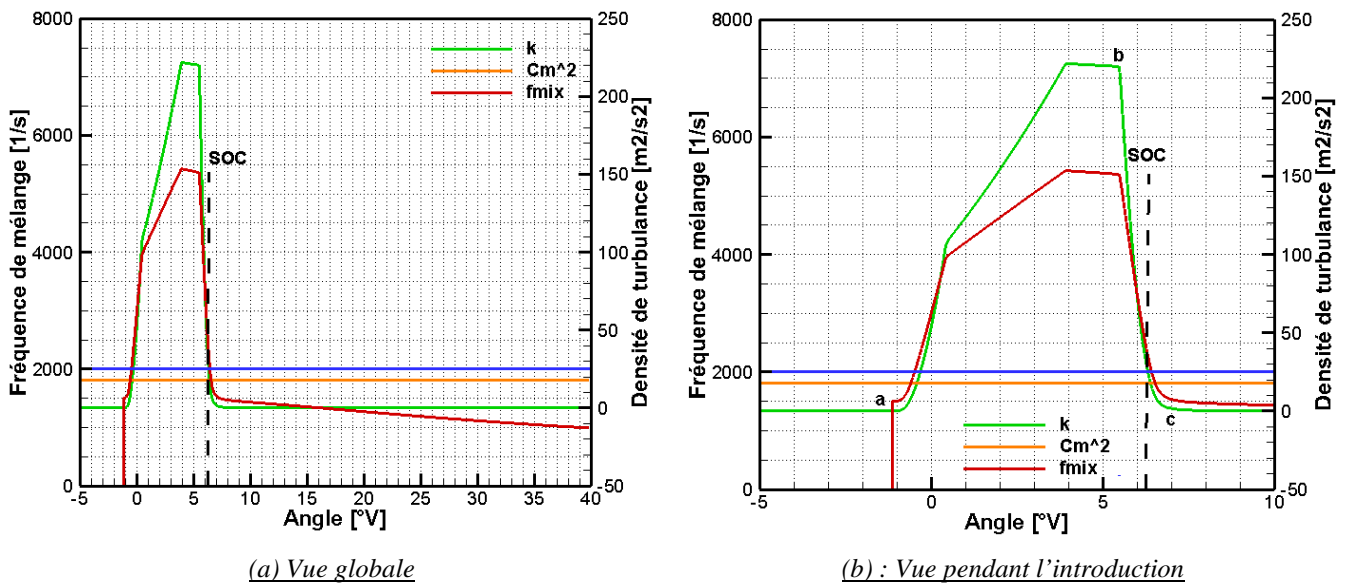
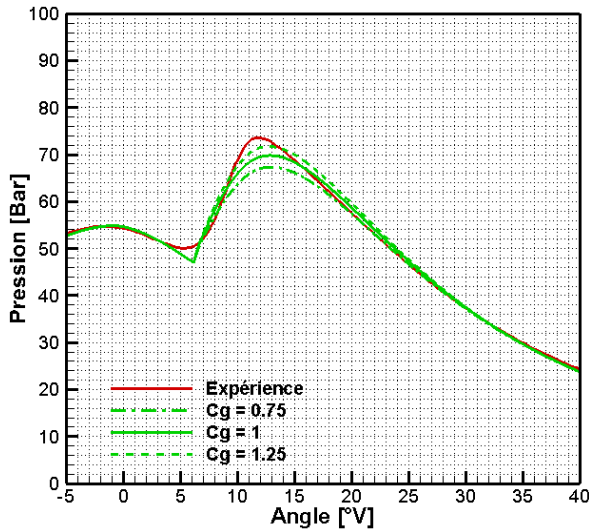


Figure 276 : Fréquence de mélange du modèle SC_MM (en bleu : valeur de r_{reac} du modèle SC)

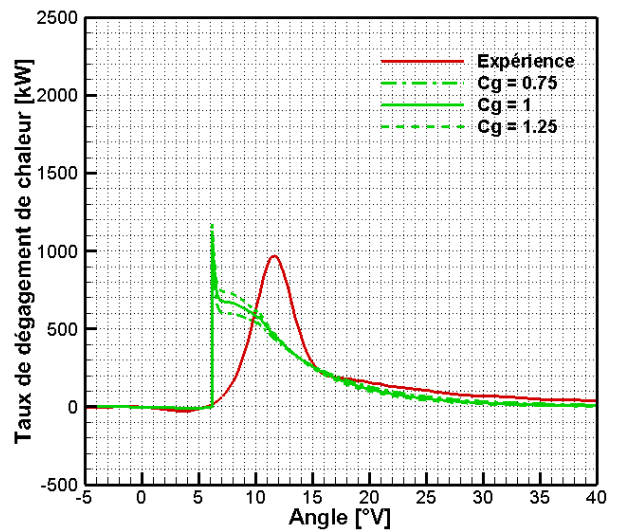
La Figure 276 montre les évolutions des différents termes au cours d'un cycle et fait apparaître plusieurs phases :

- Phase ab : du début de l'injection jusqu'à la fin de l'injection « pseudo permanente », le coefficient c_{spray} joue un rôle prépondérant sur la densité de production de turbulence k . Comme k est beaucoup plus grand que c_m^2 , la turbulence liée au spray contrôle le mélange. Cela explique les évolutions observées au 4.3.5.2.
- Phase bc : du début de la fermeture de l'injecteur jusqu'à la fin de l'injection. Dans cette phase, l'énergie produite par l'introduction devient faible. Le coefficient c_{diss} détermine la disparition de la turbulence (Plus c_{diss} est élevé plus la dissipation est rapide). A l'issue du délai d'inflammation, la fréquence de mélange est de 2500 Hz, plus élevée que r_{reac} , ce qui explique un pic de dégagement de chaleur plus haut avec le modèle SC_MM sur la Figure 192. Comme les valeurs de k et c_m^2 sont comparables, cette phase est contrôlée par les deux sources de turbulence.
- Phase c→fin : après la fin de l'injection. Dans cette phase, il n'y a plus de turbulence apportée par l'injection. La valeur de k devient très petite. Le mélange est contrôlé par la turbulence liée au mouvement du piston. Comme le volume de chambre augmente, la fréquence de mélange continue à diminuer.

Les figures ci-dessous montrent l'analyse de sensibilité à ces différents coefficients, au point de fonctionnement no.2. Le délai d'inflammation est 7.3 °V.

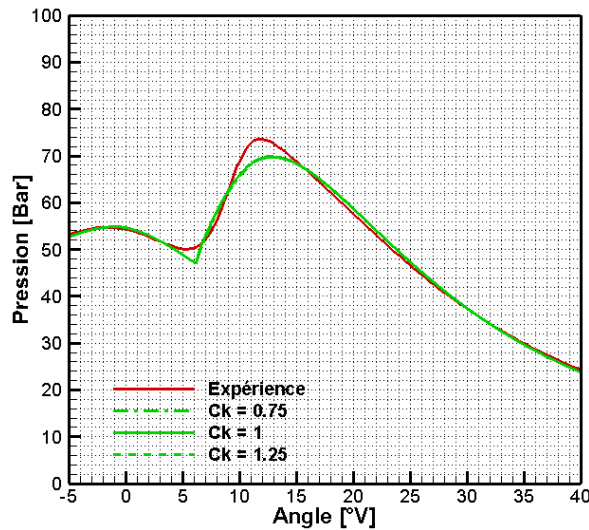


(a) : pression

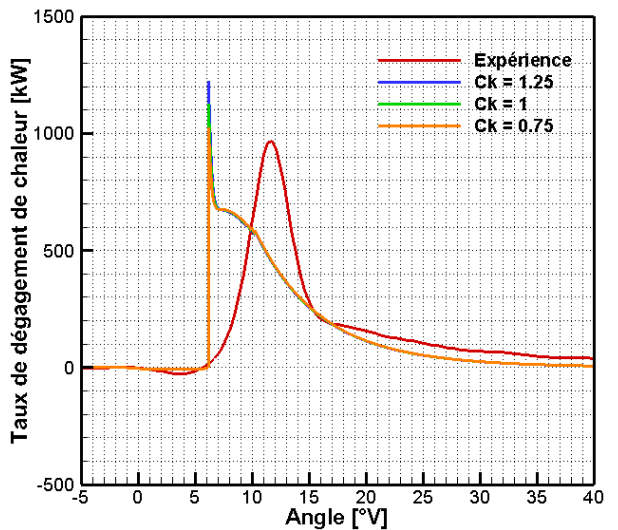


(b) : taux de dégagement de chaleur

Figure 277 : Analyse de sensibilité au coefficient C_G (Modèle SC MM)

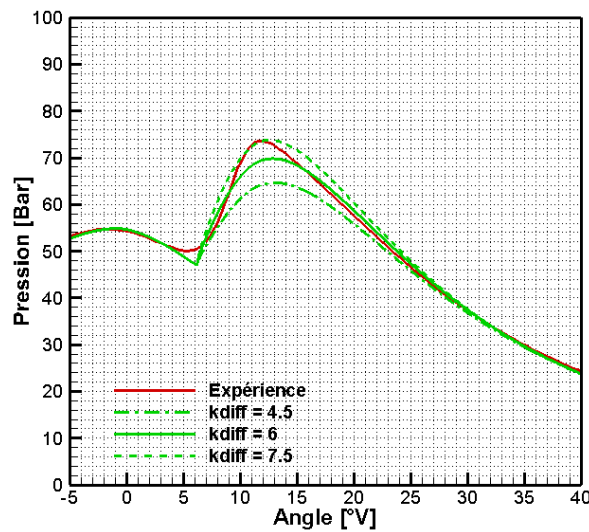


(a) : pression

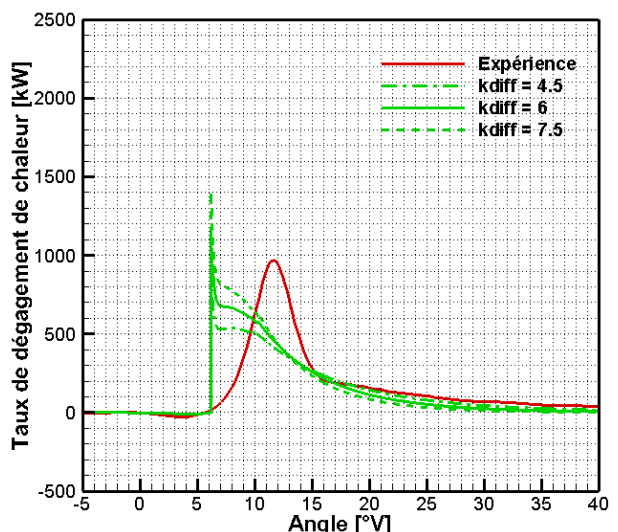


(b) : taux de dégagement de chaleur

Figure 278 : Analyse de sensibilité au coefficient C_k (Modèle SC MM)



(a) : pression



(b) : taux de dégagement de chaleur

Figure 279 : Analyse de sensibilité au coefficient k_{diff} (Modèle SC MM)

La variation du coefficient c_G affecte la combustion seulement après le pic initial de dégagement de chaleur (Figure 277). Cela est cohérent avec les observations précédentes qui montrent que ce coefficient ne devient prépondérant qu'après la fin de l'injection (point c sur la Figure 276). Plus la valeur de c_G est élevée plus la combustion est intense.

La variation du coefficient ck au contraire n'affecte que le pic initial de dégagement de chaleur (Figure 278) pour lequel on peut distinguer les différentes couleurs de courbes. Plus il est élevé, plus le pic est important. Cette période initiale étant très courte, la combustion n'est globalement pratiquement pas affectée (pas d'effet visible sur la pression cylindre).

Enfin, le paramètre k_{diff} est un facteur multiplicatif de la fréquence de mélange. Il joue donc un rôle pendant toute la durée de la simulation (Figure 279). Plus il est grand, plus la combustion est intense.

4.4 Etude de sensibilité aux paramètres physiques

Dans cette partie les différentes versions du modèle (CD, CS et CS_LR, SC et SC_MM) sont successivement testées pour évaluer leur aptitude à prendre en compte l'influence d'un paramètre physique (taux d'EGR, pression d'injection, pression de suralimentation, température d'admission,..) sur le déroulement de la combustion.

4.4.1 Modèle à chimie détaillée

4.4.1.1 Influence de l'EGR

Les points de fonctionnement 1 (EGR=2.9%) & 2 (point de référence, EGR=40.2%) (Tableau 7, Tableau 34) sont choisis pour étudier l'influence de l'EGR sur la combustion. Les résultats expérimentaux montrent que, pour une injection simple, la hausse du taux d'EGR conduit à une augmentation du délai d'inflammation. Le pic du taux de dégagement de chaleur est ensuite décalé et légèrement plus haut, probablement car la combustion de pré mélange implique une masse de carburant plus élevée (Figure 282). Qualitativement, le modèle CD retrouve ces évolutions, même si, quantitativement, il existe des écarts avec l'expérience, notamment une surestimation des délais d'inflammation. Pour le point 1 la combustion se déroule de façon assez similaire au point de référence. Toutefois, l'inflammation a lieu dans la zone 4, qui constitue alors la tête de spray puis dans la zone 5 lorsque celle-ci est créée, avant de remonter vers l'injecteur.

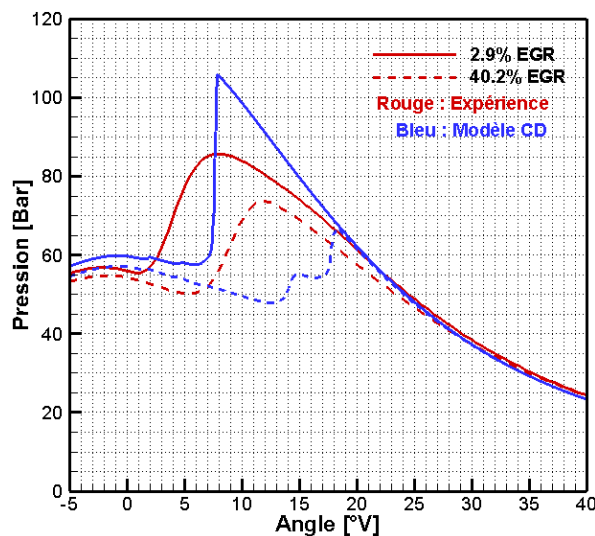


Figure 280 : Comparaison des pressions (EGR = 2.9 % et 40.2 %)

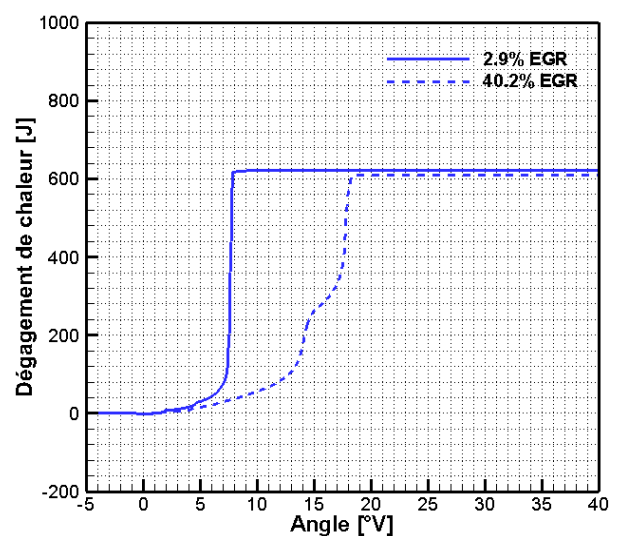


Figure 281 : Comparaison des dégagements de chaleur simulés (EGR = 2.9 % et 40.2 %)

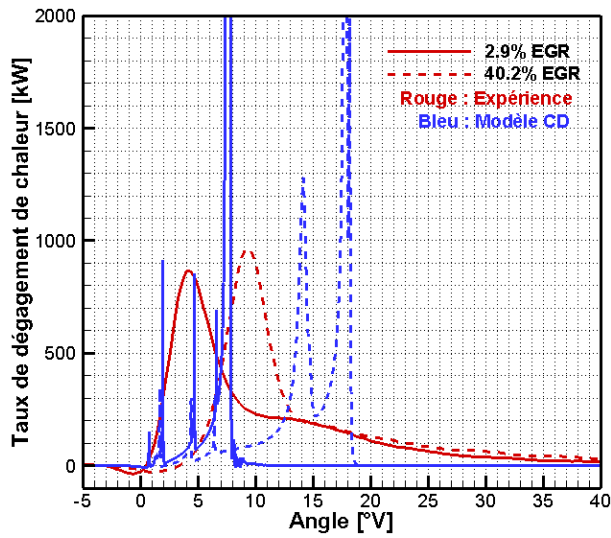


Figure 282 : Comparaison des taux de dégagement de chaleur (EGR = 2.9 % et 40.2 %)

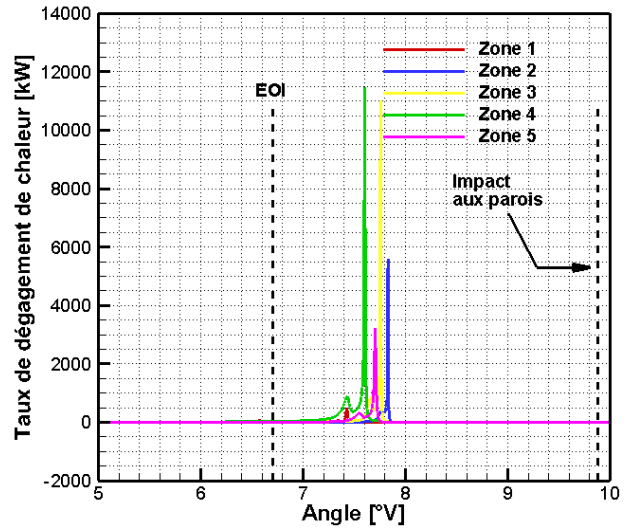


Figure 283 : Taux de dégagement de chaleur dans les zones (EGR = 2.9 %)

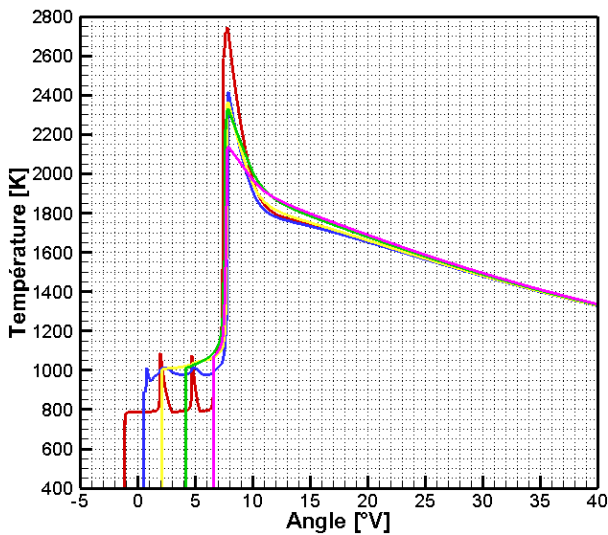


Figure 284 : Température dans les zones (EGR = 2.9 %)

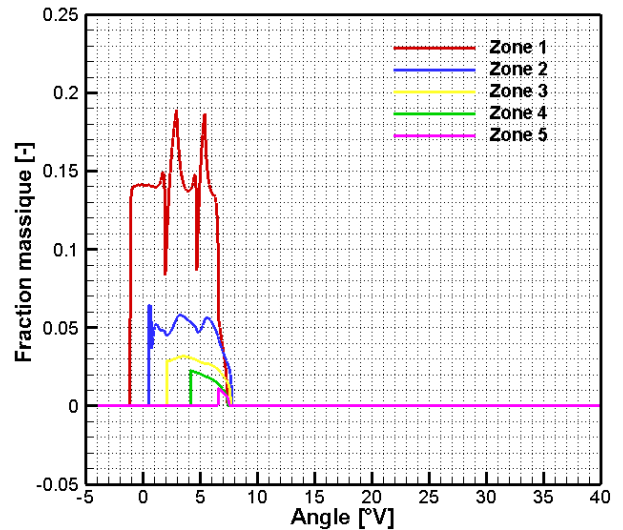


Figure 285 : Fractions massiques de C_7H_{16} (EGR = 2.9 %)

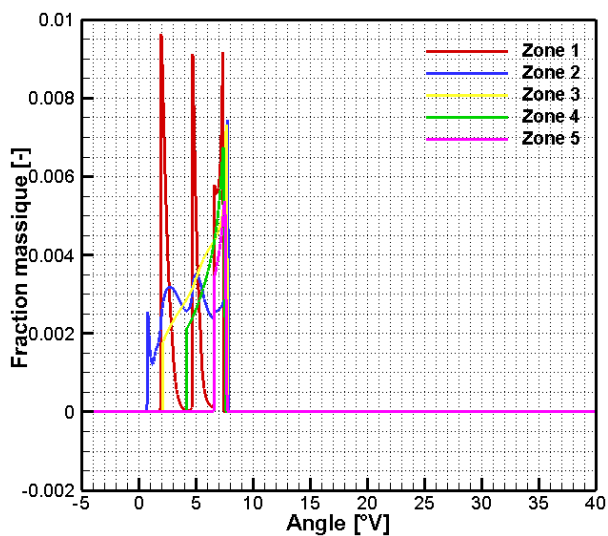


Figure 286 : Fractions massiques de C_3H_6 (EGR = 2.9 %)

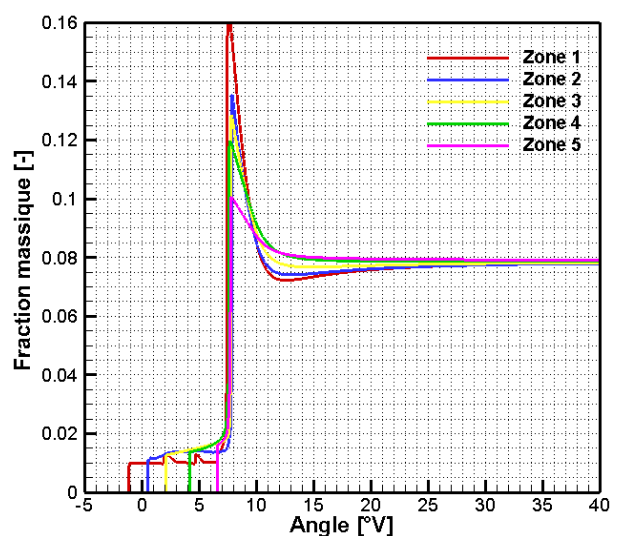


Figure 287 : Fractions massiques de CO_2 (EGR = 2.9 %)

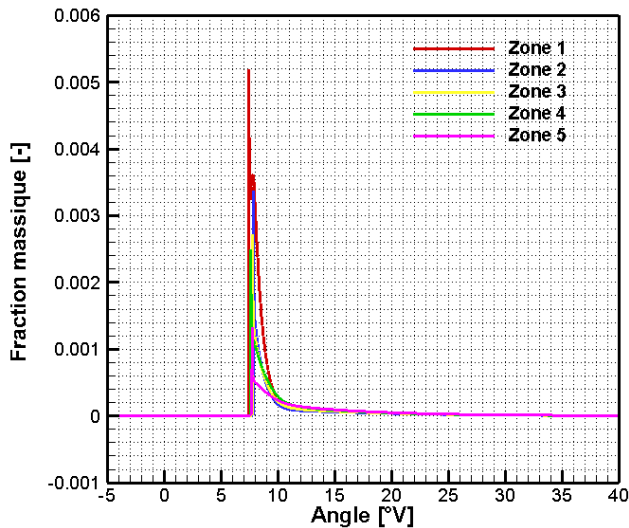


Figure 288 : Fractions massiques d'OH (EGR = 2.9 %)

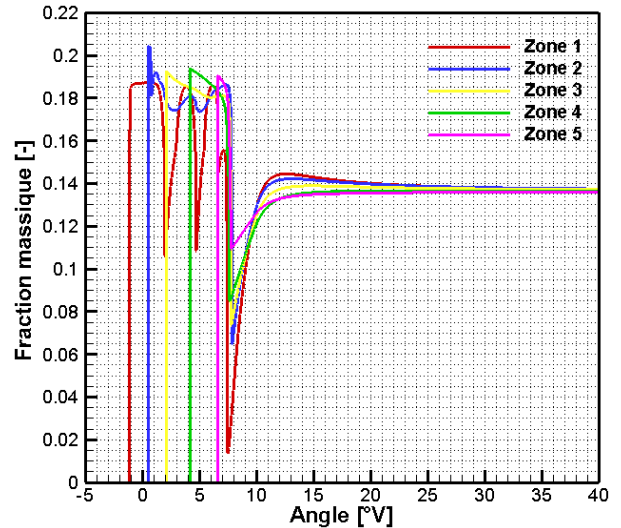


Figure 289 : Fractions massiques d'O₂ (EGR = 2.9 %)

Comme attendu, les températures de zones sont sensiblement plus élevées (Figure 284 et Figure 169). Les évolutions des autres paramètres (Figure 285 à Figure 289) sont semblables, avec, bien entendu, des teneurs en O₂ et CO₂ différentes, respectivement supérieures et inférieures par rapport au cas de référence (Figure 172 à Figure 176).

4.4.1.2 Influence de la pression d'injection

Les points de fonctionnement 3 (Prail=1500 bar) & 2 (point de référence, Prail=900 bar) (Tableau 7, Tableau 34) sont ensuite choisis pour étudier l'influence de la pression d'injection sur la combustion.

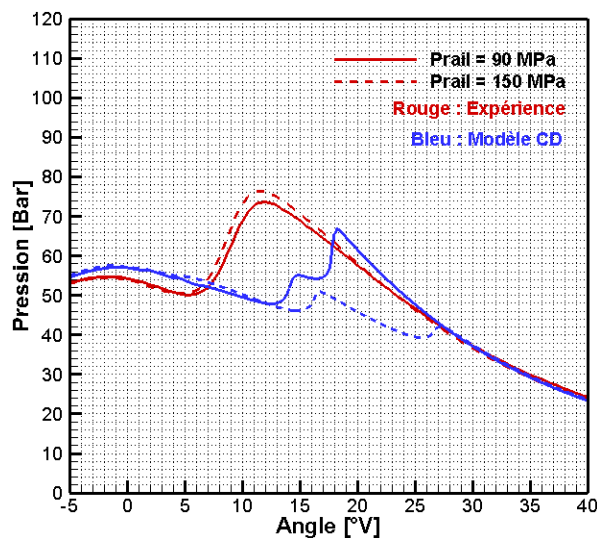


Figure 290 : Comparaison des pressions (Prail = 90 MPa et 150 MPa)

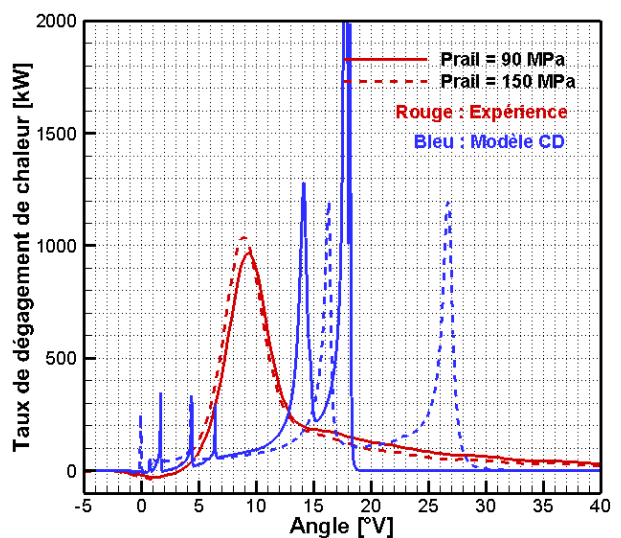


Figure 291 : Comparaison des taux de dégagement de chaleur (Prail = 90 MPa et 150 MPa)

Expérimentalement, la pression d'injection n'a pas une influence très importante sur la combustion, dans le cas étudié (Figure 290 et Figure 291). Le délai d'inflammation reste très voisin, tandis que le pic de taux de dégagement de chaleur est légèrement augmenté. Les résultats de simulation ne donnent pas la même tendance. Avant 10°V, les deux courbes de simulation sont comparables. Après, la tendance est inverse par rapport à l'expérience. Le délai augmente lorsque la pression d'injection est plus élevée, puis la combustion est retardée et moins intense.

Comme le mécanisme de chimie détaillée est très sensible aux conditions ambiantes (pression, température), pour réduire l'influence de la combustion froide, une combustion plus avancée est simulée : pour ce faire une température de paroi de 450 K (au lieu de 400K) est utilisée.

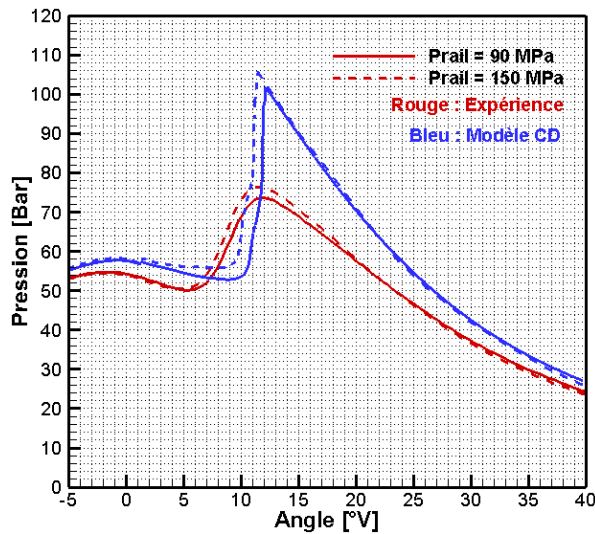


Figure 292 : Comparaison de pression- $T_w=450K$
(Prail = 90 MPa et 150 MPa)

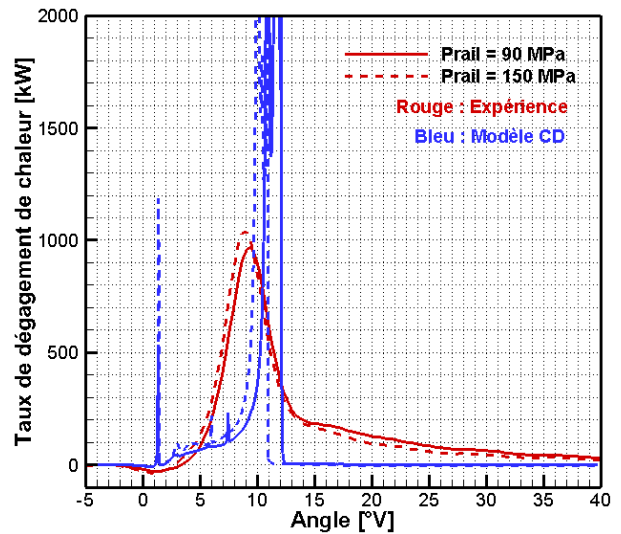


Figure 293 : Comparaison de taux de dégagement de chaleur total- $T_w=450K$ (Prail = 90 MPa et 150 MPa)

Les résultats ainsi obtenus (Figure 292 et la Figure 293) font alors apparaître des délais d'inflammation raccourcis beaucoup plus proches des délais expérimentaux. Qualitativement, le modèle à chimie détaillée donne alors la même tendance d'évolution que l'expérience : les délais sont similaires, et le pic de taux de dégagement de chaleur est légèrement accru par l'augmentation de la pression d'injection. Ce résultat met en lumière la sensibilité du modèle à chimie détaillée et la nécessité d'adapter finement les paramètres du modèle au cas simulés, y compris pour les échanges thermiques par les parois.

4.4.2 Modèle à chimie simplifiée (Injection simple)

Pour les points de fonctionnement à injection simple, les études de sensibilité aux paramètres physiques sont effectuées pour deux niveaux de PME : 5 bar (Tableau 34) et 7 bar (Tableau 35). Suite aux résultats de l'étude de sensibilité au nombre de zones (4.3.4.1) les simulations sont réalisées avec 10 zones. Par ailleurs, la limite inférieure de richesse pauvre est fixée à 0.05, pour éviter de générer trop d'imbrûlés par excès d'appauvrissement.

4.4.2.1 Influence de l'EGR

L'influence de l'EGR est étudiée pour deux niveaux de PME. A chaque fois deux niveaux d'EGR sont considérés : 2.9 % et 40.2 % pour une PME de 5 bar, puis 1.3 % et 30.8 % pour une PME de 7 bar. La Figure 294 et la Figure 295 montrent les comparaisons des pressions cylindre et des taux de dégagement de chaleur obtenus pour chaque point de fonctionnement. Expérimentalement, l'augmentation du taux d'EGR donne un délai d'inflammation plus court et un pic de pression plus élevé. Le pic du taux de dégagement de chaleur est retardé et légèrement amplifié. Les résultats de simulation montrent des tendances qualitatives similaires. Quantitativement, les délais d'inflammation sont généralement un peu surestimés, puis les pics de taux de dégagement de chaleur sont largement surévalués, ce qui conduit à des pics de pressions simulées environ 15% à 20 % plus élevés que les valeurs mesurées. Pour chaque point de fonctionnement, le modèle CS_LR donne un délai d'inflammation majoré et une

combustion plus lente après le délai par rapport au modèle CS. Le pic de pression simulé est alors plus proche de l'expérience.

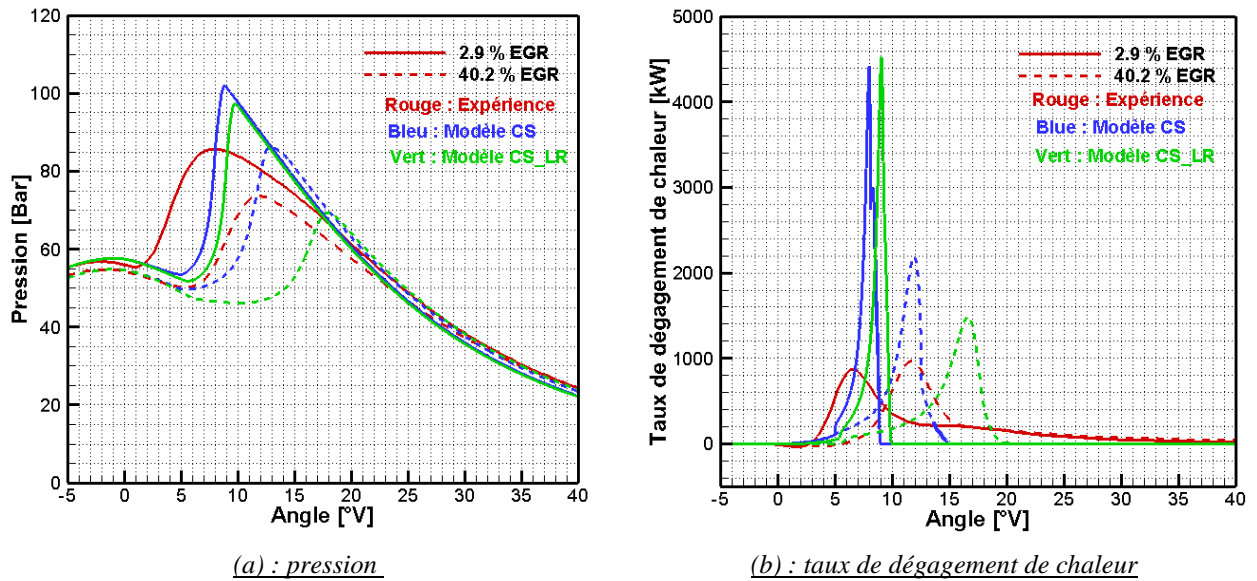


Figure 294 : Influence de l'EGR pour les points de fonctionnement à PME 5

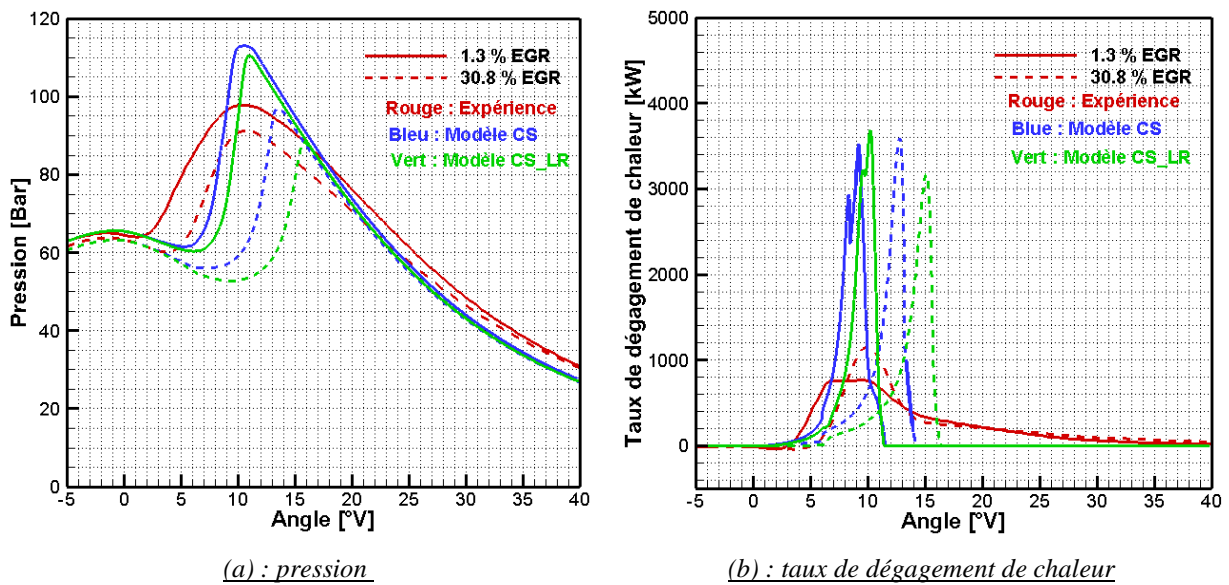
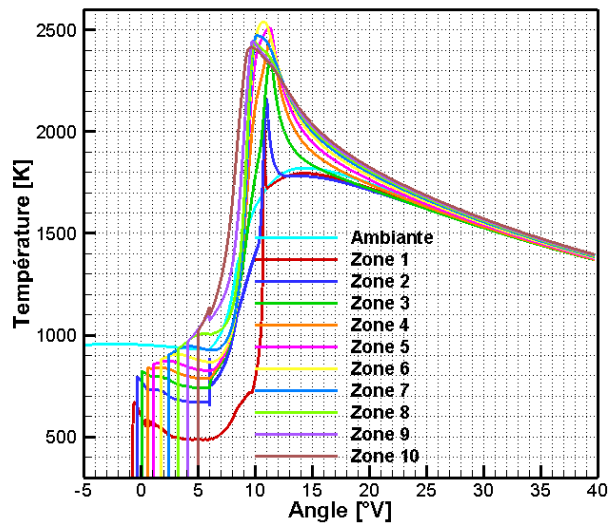
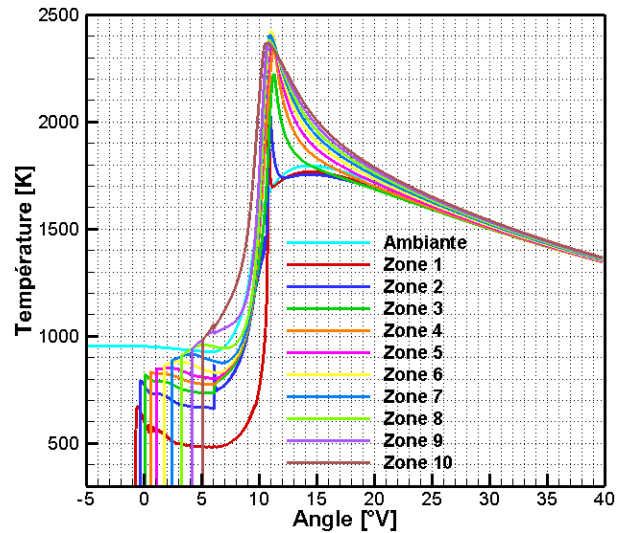


Figure 295 : Influence de l'EGR pour les points de fonctionnement à PME 7

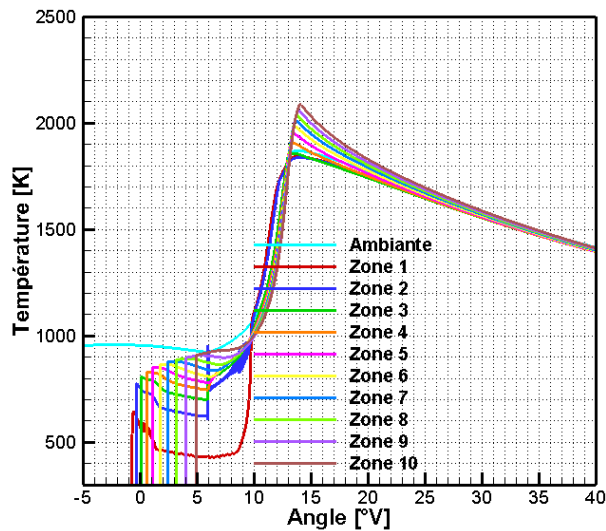
La Figure 296 montre les températures des zones simulées par le modèle CS et le modèle CS_LR. Avec un taux d'EGR presque nul, la température maximale atteint environ 2500 K. comme attendu, l'utilisation d'EGR diminue significativement la température, 30 % d'EGR conduisant à un abaissement d'environ 400 K (CS) à 500 K (SC_LR). La localisation de l'inflammation semble aussi affectée par la présence d'EGR, ce qui est cohérent avec l'allongement du délai.



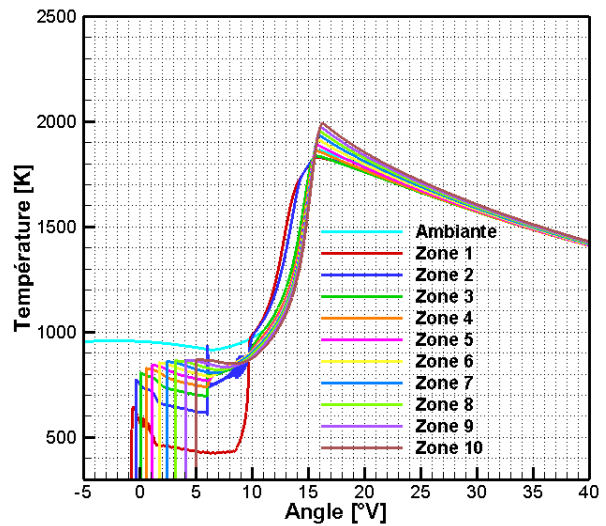
(a) : point 4 modèle CS (PME 7, 1% EGR)



(b) : point 4 modèle CS LR (PME 7, 1% EGR)



(c) : point 5 modèle CS (PME 7, 30% EGR)



(d) : point 5 modèle CS LR (PME 7, 30% EGR)

Figure 296 : Températures des zones pour les points 4 et 5 (Gauche : modèle CS, Droite : modèle CS LR)

4.4.2.2 influence de la pression d'injection

Comme pour le modèle CD, l'influence de la pression d'injection est étudiée avec le point 2 (Référence, Prail =90 MPa) et point 3 (Prail=150 MPa). La Figure 297 montre la comparaison des pressions et des taux de dégagement de chaleur simulés et expérimentaux.

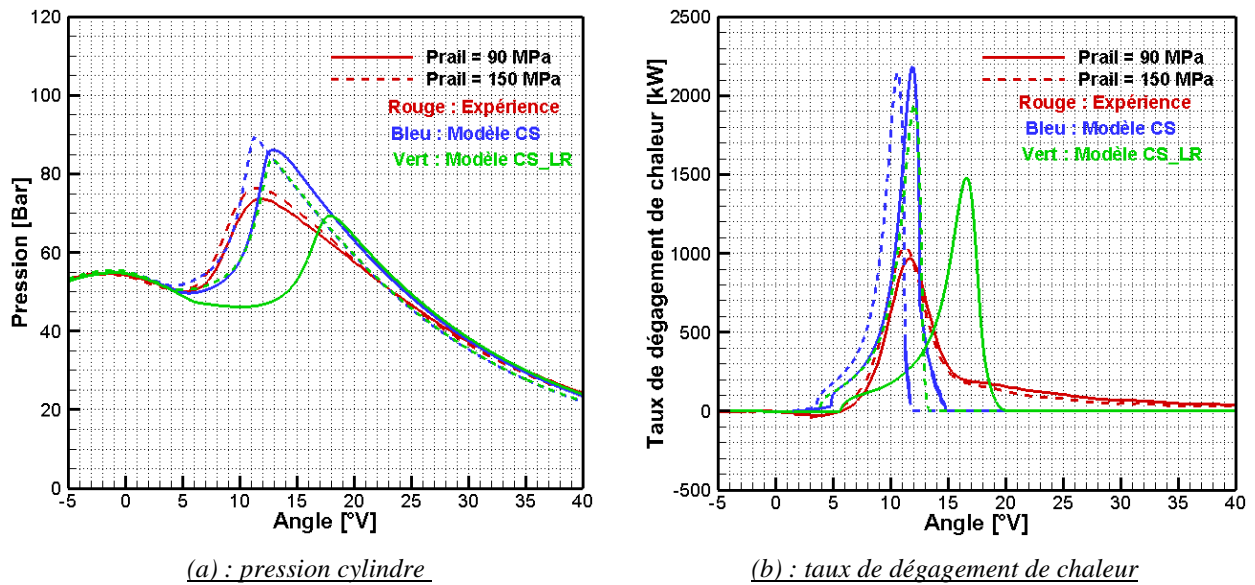


Figure 297 : Influence de la pression d'injection pour les points de fonctionnement à PME 5

Contrairement au modèle CD, les modèles à chimie simplifiée donnent la même tendance d'évolution que l'expérience. Toutefois, si l'amplitude de variation obtenue avec le modèle CS semble raisonnable et du même ordre que celle mesurée, le modèle CS_LR est plus sensible à ce paramètre. Cela est probablement lié à la pénétration plus rapide lorsque la pression d'injection augmente qui modifie ensuite les richesses locales et conduit à une fraction de mélange à l'intérieur des limites de richesse plus importante.

4.4.2.3 Influence de la pression d'admission

L'influence de la pression d'admission est étudiée pour deux niveaux : 1.359 bar et 1.175 bar (points 4 et 6). La Figure 298 montre la comparaison des pressions et des taux de dégagement de chaleur simulés et expérimentaux.

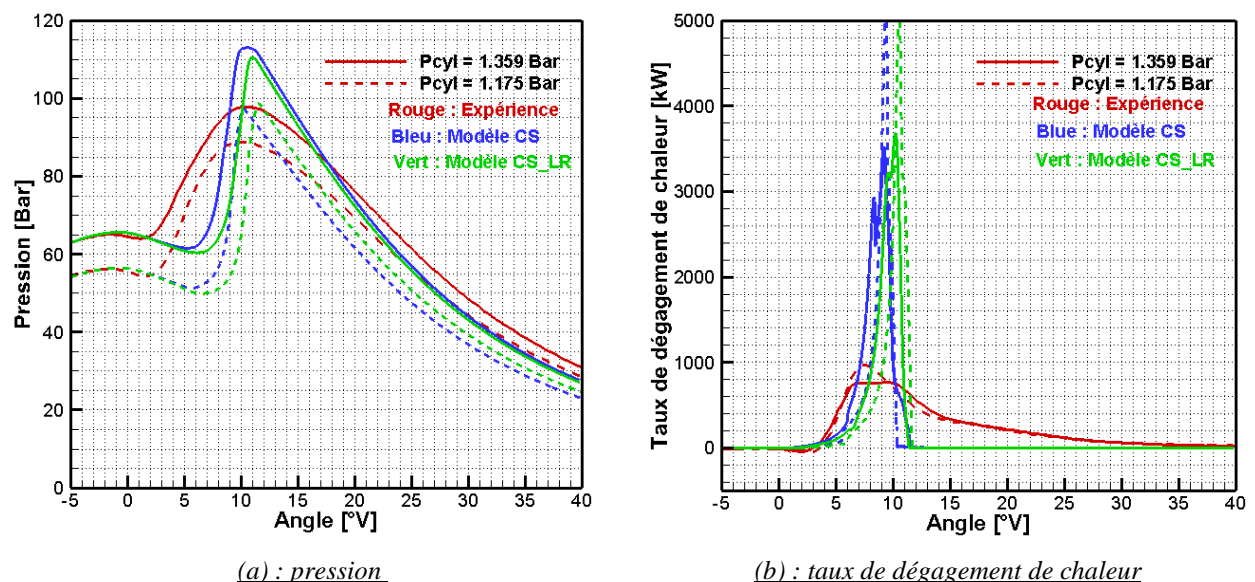


Figure 298 : Influence de la pression d'admission pour les points de fonctionnement à PME 7

Expérimentalement, la variation de pression d'admission ne change pas significativement le délai d'inflammation. Ensuite, le point avec la pression d'admission la plus faible brûle plus rapidement. Les deux modèles donnent des prédictions qualitativement correctes, en capturant ces deux points.

4.4.3 Modèle sans chimie (Injection simple)

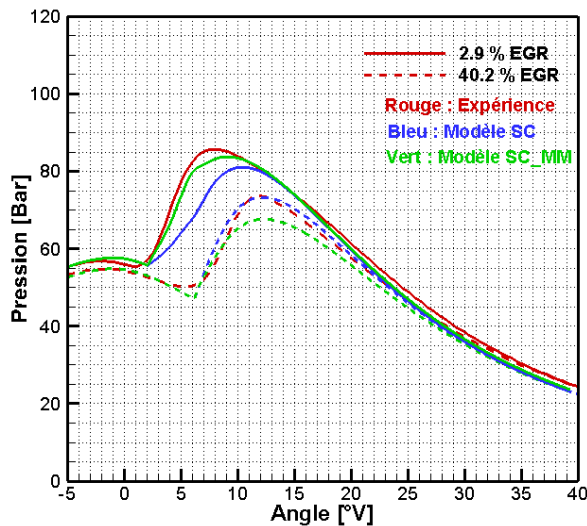
Les tests effectués pour le modèle sans chimie (SC) sont les mêmes que ceux menés avec le modèle à chimie simplifiée (CS) qui viennent d'être décrits (4.4.2). Pour tous les points de fonctionnement, le délai est défini comme le moment où la chaleur dégagée par la combustion égale celle absorbée par l'évaporation. Le Tableau 32 regroupe les délais ainsi déterminés pour chaque point de fonctionnement avec une injection simple.

Délai d'inflammation [°V après SOI]	
Point no.1	3.24
Point no.2	7.3
Point no.3	6.84
Point no.4	4.3
Point no.5	6.3
Point no.6	4.4

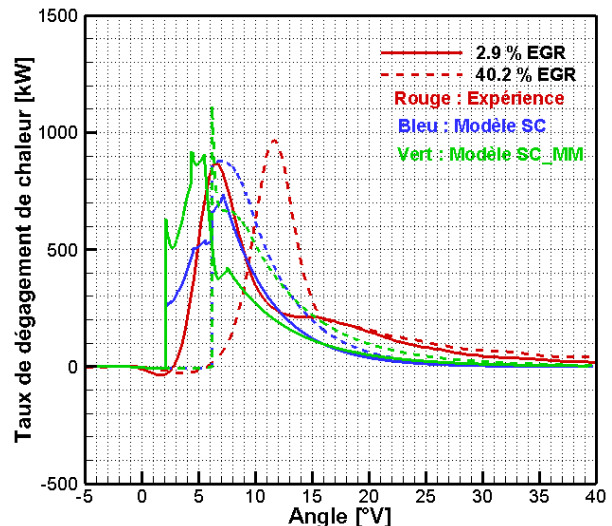
Tableau 32 : Délais d'inflammation utilisés pour les modèles sans chimie (Injection simple)

4.4.3.1 Influence de l'EGR

La Figure 299 montre la comparaison des pressions cylindre et taux de dégagement de chaleur pour les points de fonctionnement à PME = 5 bar. Globalement, les deux modèles retrouvent les tendances observées expérimentalement. L'augmentation du taux d'EGR allonge le délai d'inflammation et retarde le taux de dégagement de chaleur, mais le pic reste du même niveau. Pour le point no. 1 au taux d'EGR presque nul, la combustion commence assez tôt, pendant la durée d'injection. Par conséquent, comme déjà expliqué plus haut, dans le modèle SC_MM, le facteur contrôlant la fréquence de mélange est alors la turbulence liée au spray et celle-ci est beaucoup plus élevée que le coefficient de réaction r_{reac} dans le modèle SC. La combustion pendant l'injection est donc plus forte pour le modèle SC_MM. Le pic de pression avec le modèle SC_MM au point 1 (2.9 % EGR) est ainsi plus élevé qu'avec le modèle SC (Figure 299a).



(a) : pression



(b) : taux de dégagement de chaleur

Figure 299 : L'effet d'EGR pour les points de fonctionnement à PME 5

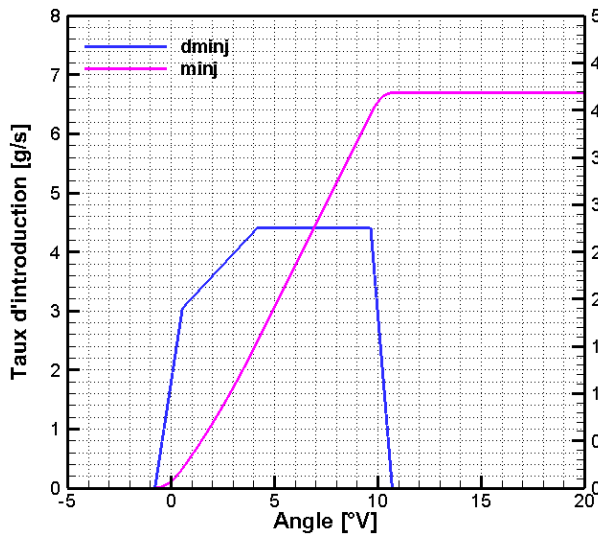


Figure 300 : Taux d'introduction pour les points à PME 7

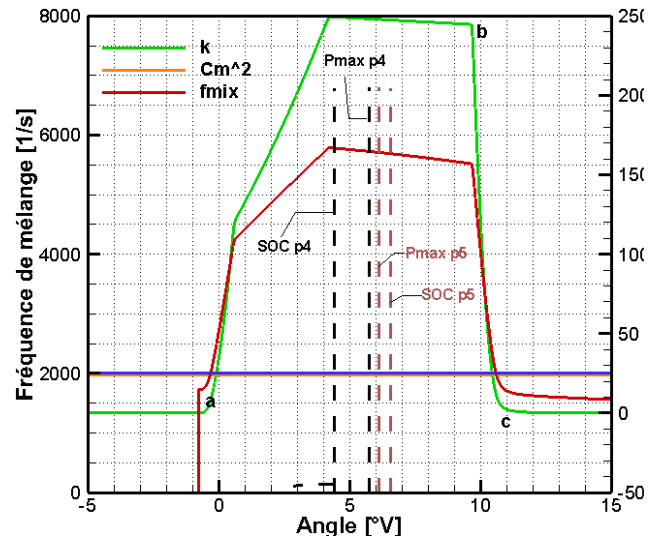
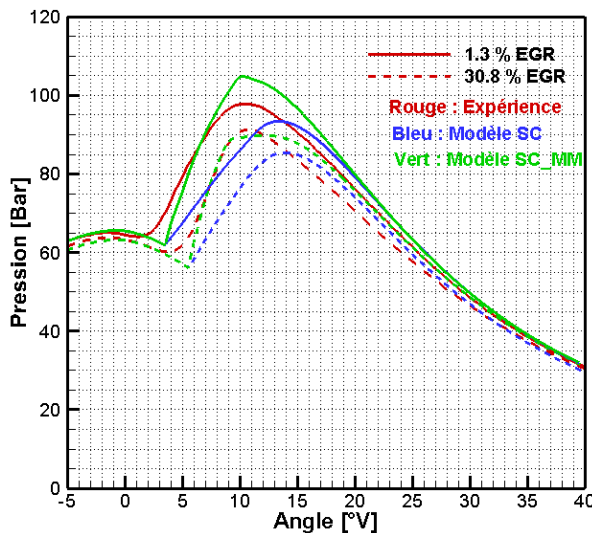
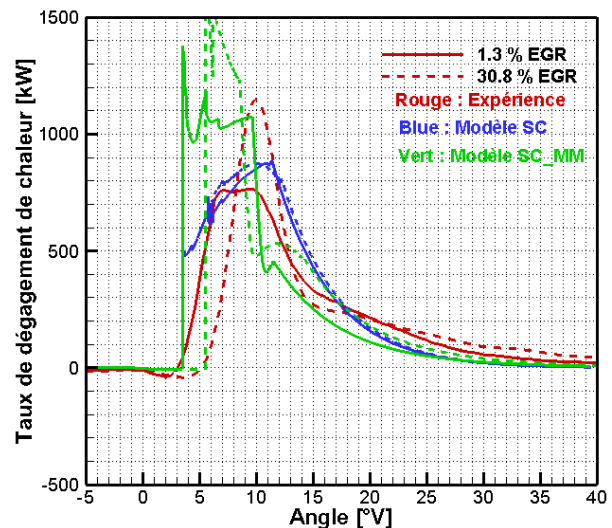


Figure 301 : Fréquence de mélange f_{mix} (point 4 et 5)

La Figure 301 donne l'évolution de la fréquence de mélange du modèle SC_MM pour les points de fonctionnement à PME = 7 Bar (Point 4 sans EGR et Point 5 avec 31% d'EGR). La ligne bleue représente le coefficient de réaction du modèle SC. La pénétration maximale (Pmax) est également indiquée pour visualiser l'impact du spray sur les parois. Comme pour les points à PME = 5 bar, le point sans EGR brûle pendant l'injection, tandis qu'un fort taux d'EGR allonge le délai et conduit à une combustion qui commence après l'impact sur les parois. Par contre, pour PME = 7 Bar, la durée d'injection est plus longue et l'injection n'est pas terminée au moment de l'inflammation. La fréquence de mélange est donc toujours élevée, comme pour le point sans EGR.



(a) : pression



(b) : taux de dégagement de chaleur

Figure 302 : L'effet d'EGR pour les points de fonctionnement à PME 7

La Figure 302 compare les pressions cylindre et taux de dégagement de chaleur pour les points de fonctionnement à PME=7 bar. L'augmentation du taux d'EGR conduit à une combustion plus tardive mais aussi plus forte, la part pré mélangée étant sans doute majorée. Ces tendances sont bien retrouvées par les modèles, surtout SC_MM.

4.4.3.2 Influence de la pression d'injection

La Figure 303 montre les résultats des points 1 et 3 utilisés pour étudier l'influence de la pression d'injection. Avec des taux d'EGR forts et des injections courtes pour les deux points, les combustions commencent toutes après la fin de l'injection et l'impact du spray sur les parois.

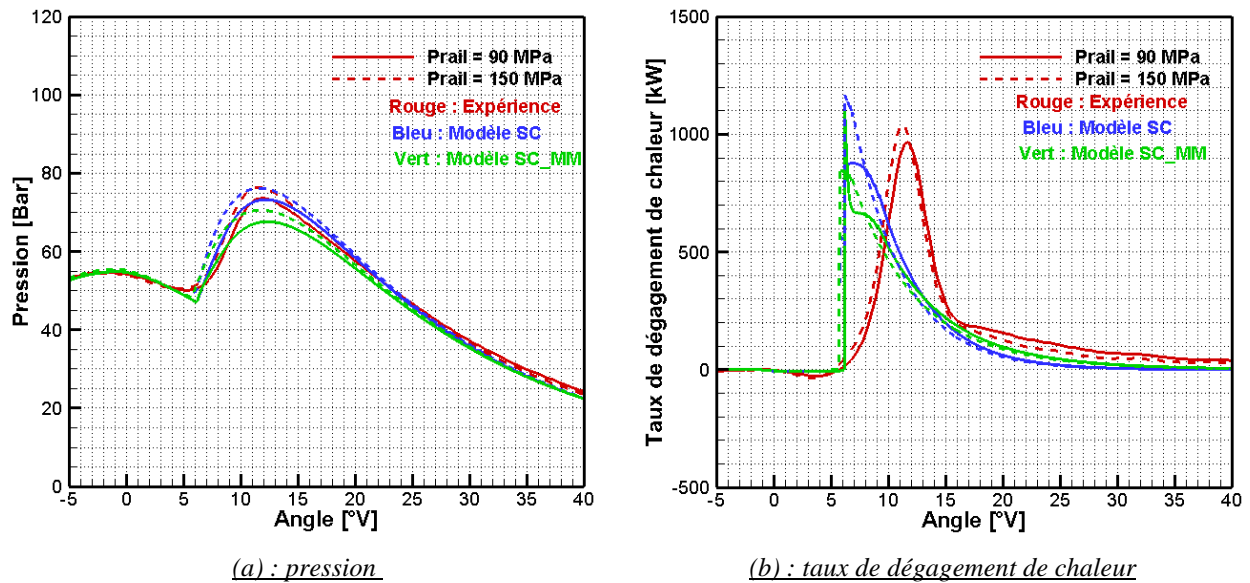


Figure 303 : Influence de la pression d'injection pour les points de fonctionnement à PME 5

Les modèles SC et SC_MM indiquent des tendances conformes à l'expérience. La différence entre les résultats simulés et expérimentaux est faible. Pour le modèle SC_MM c'est le mouvement du piston qui contrôle la fréquence de mélange au moment de l'inflammation. Ainsi la valeur de f_{mix} est inférieure à celle du coefficient r_{reac} du modèle SC. En conséquence, pour ces points, le modèle SC donne des combustions légèrement plus intenses.

4.4.3.3 Influence de la pression d'admission

Les points 4 et 6 sont simulés pour étudier la sensibilité à la pression d'admission (Figure 304).

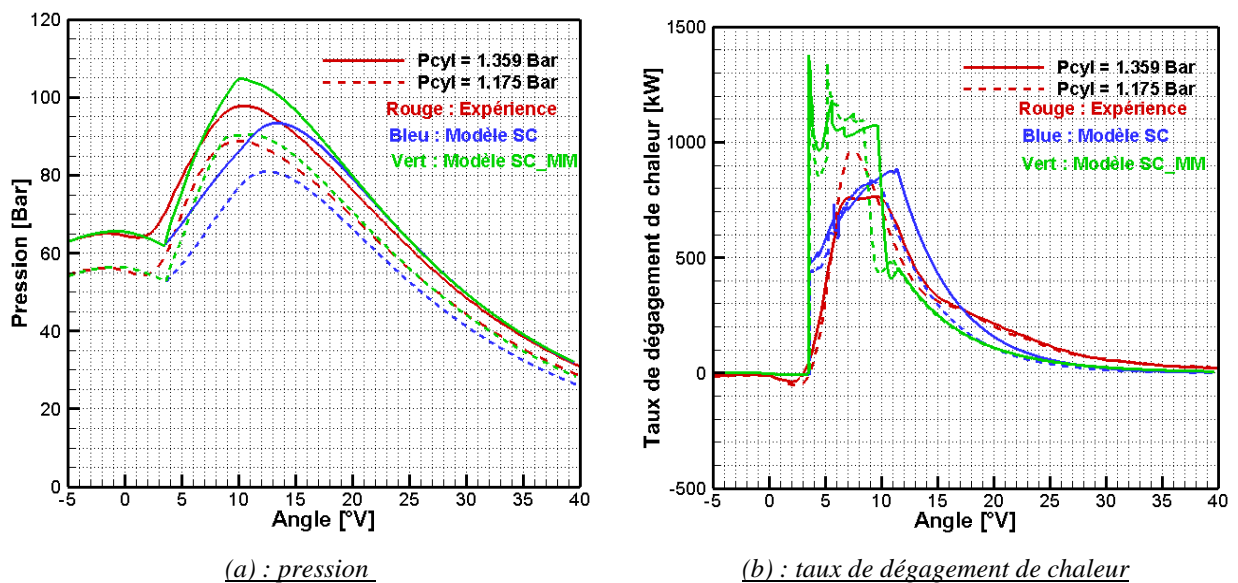


Figure 304 : Influence de la pression d'admission pour les points de fonctionnement à PME 7

Les modèles conduisent a des résultats assez proches des relevés expérimentaux, sans pour autant que les taux de dégagement de chaleur calculés soient plus élevés lorsque la pression d'admission est plus basse, comme observé expérimentalement. Par ailleurs, ces deux points tous brûlent pendant l'injection. Le modèle SC_MM conduit donc a des taux de dégagement de chaleur plus importants car $f_{mix} > r_{reac}$ dans le modèle SC.

4.4.4 Modèle à chimie simplifiée (Multi Injections)

Dans cette partie, on réaliser une étude de sensibilité aux paramètres physiques pour le cas d'une injection double pour le modèle à chimie simplifiée (taux d'EGR, température d'admission, intervalle entre les deux injections). On détaille d'abord les résultats pour un cas de référence. Les valeurs des paramètres empiriques sont les mêmes que précédemment (paragraphe 4.4.2). Le nombre de zone est fixé à 5 pour des raisons de temps de calcul.

4.4.4.1 Analyse d'un point de référence

Le point no. 16 du Tableau 38 est étudié ici. Les résultats du modèle sont donnés ci-après :

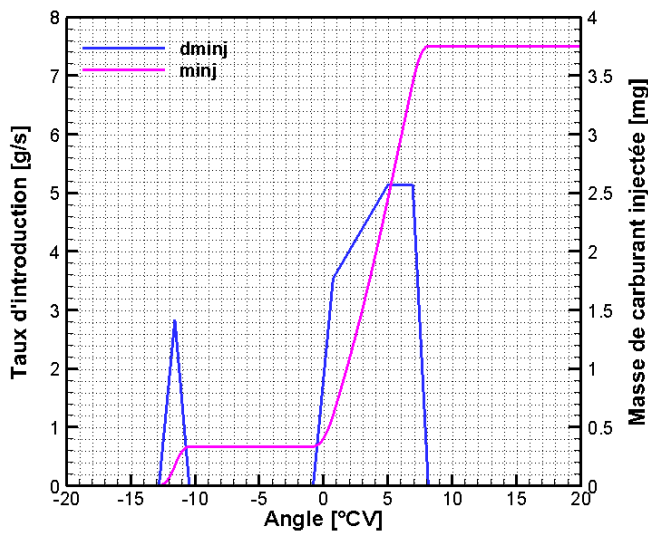


Figure 305: Taux d'introduction (point 16)

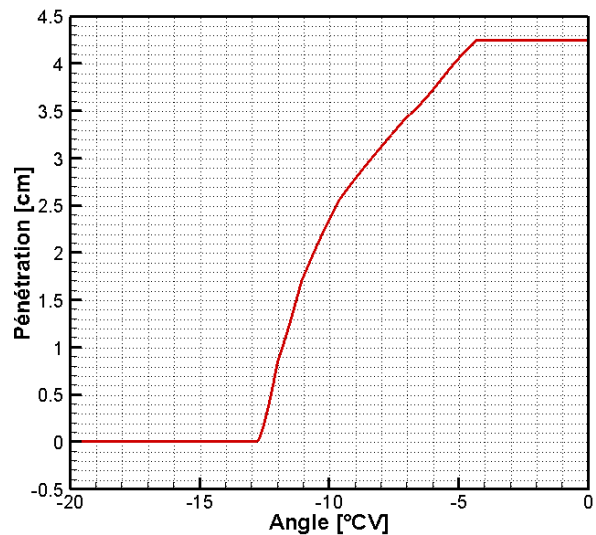


Figure 306: Pénétration de spray (point 16)

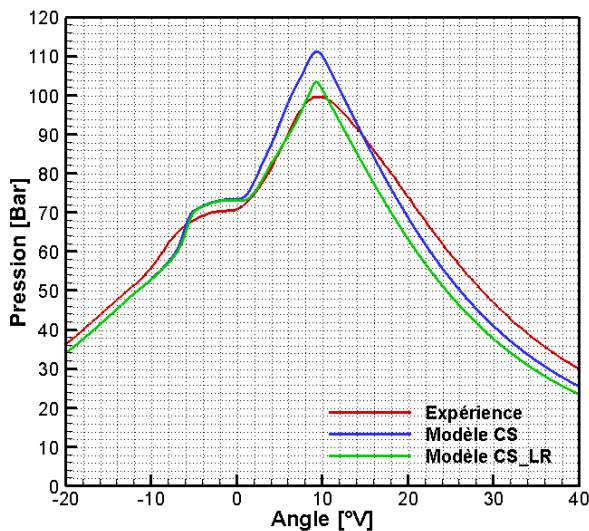


Figure 307: Comparaison de pression

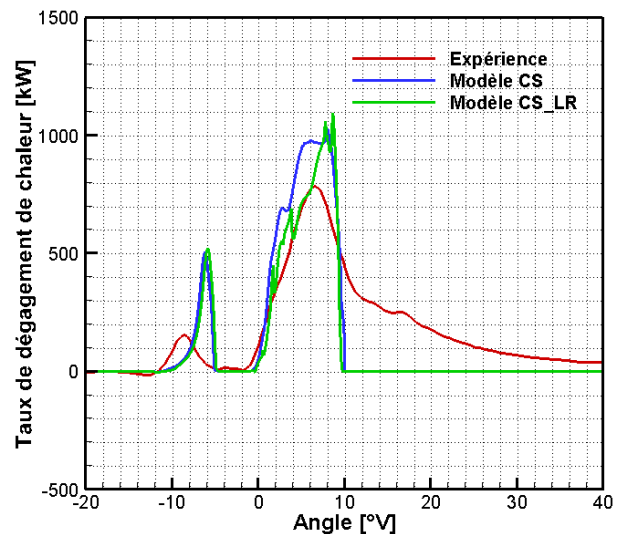


Figure 308: Taux de dégagement de chaleur total

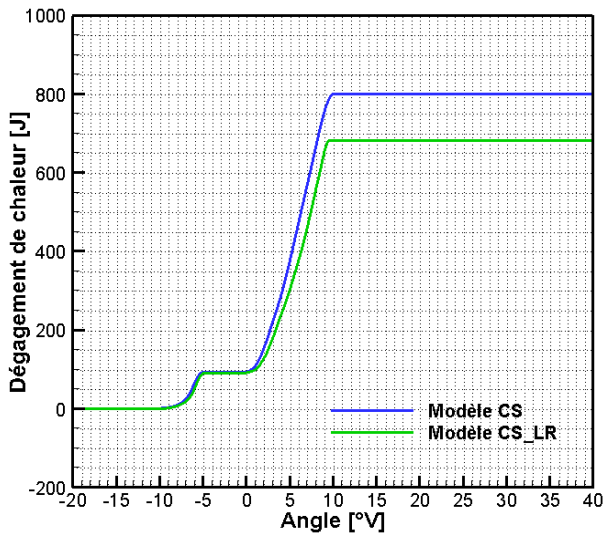


Figure 309 : Dégagement de chaleur total

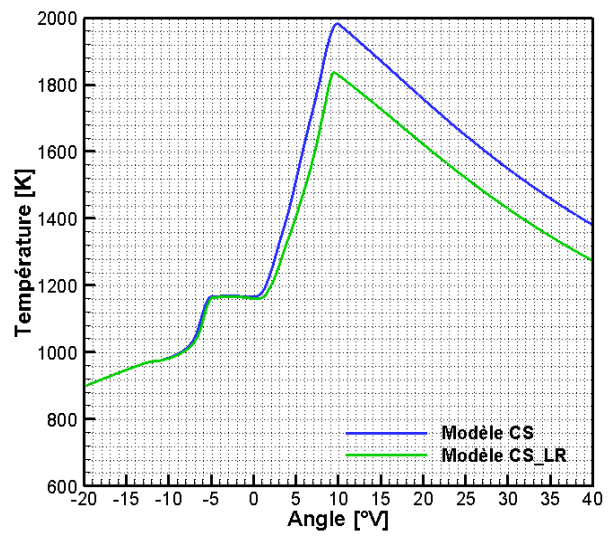


Figure 310: Température moyenne du cylindre

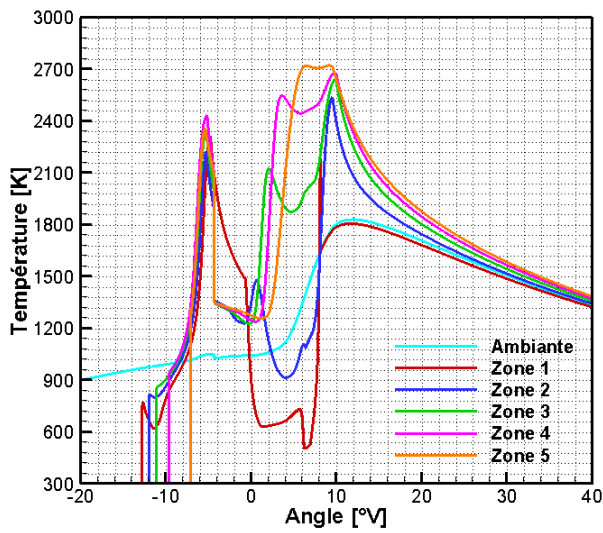


Figure 311 : Température de la zone du spray (Modèle CS)

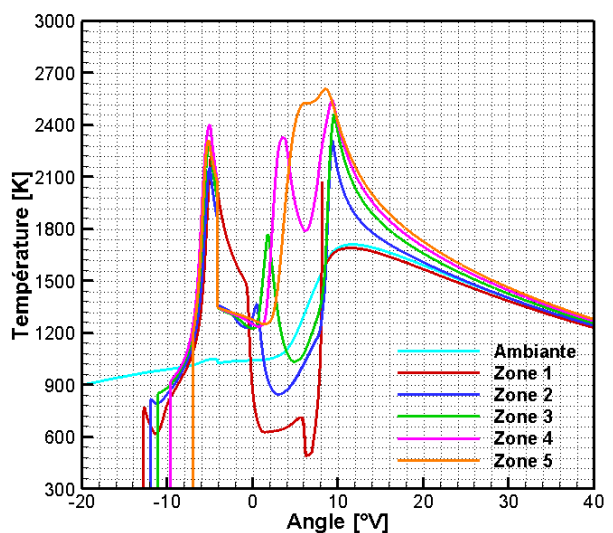


Figure 312: Température de la zone du spray (Modèle CS_LR)

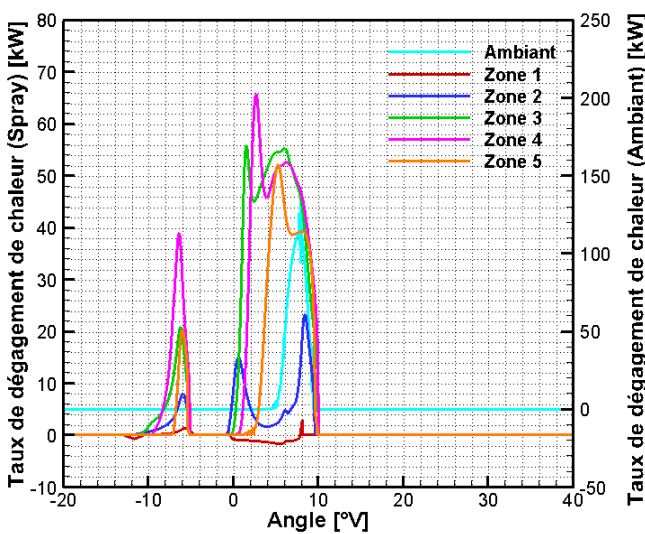


Figure 313: Taux de dégagement de chaleur dans les zones (Modèle CS)

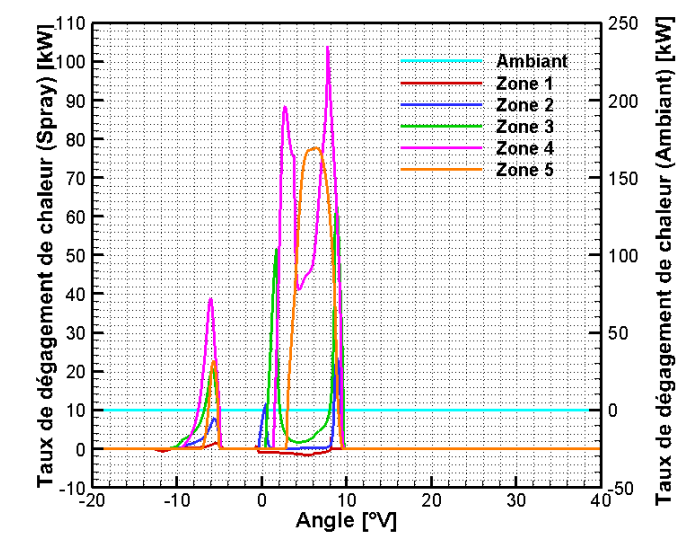


Figure 314: Taux de dégagement de chaleur dans les zones (Modèle CS_LR)

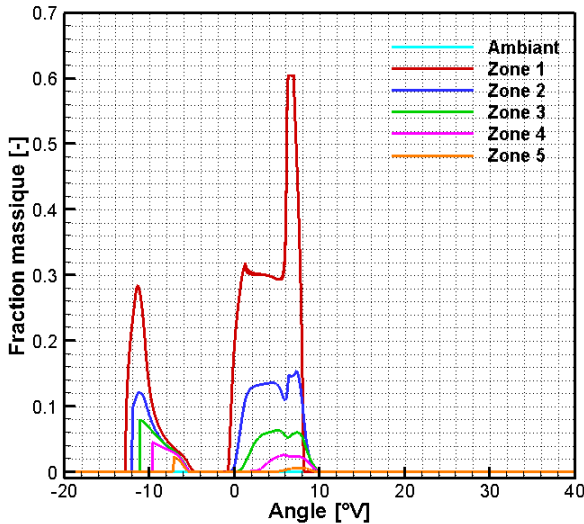


Figure 315 : Fraction massique de carburant vapeur (Modèle CS)

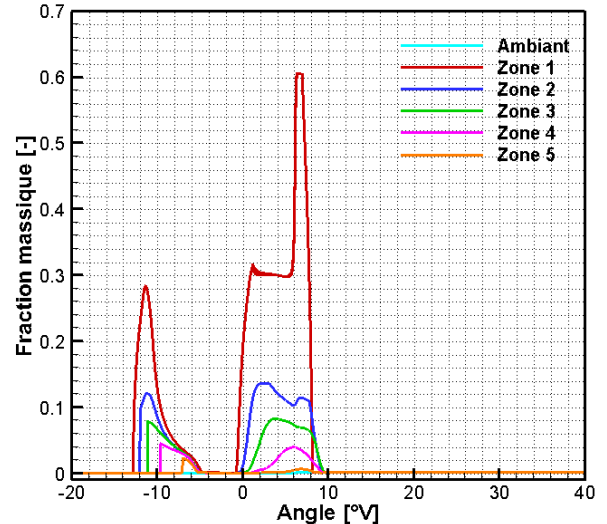


Figure 316 : Fraction massique de carburant vapeur (Modèle CS_LR)

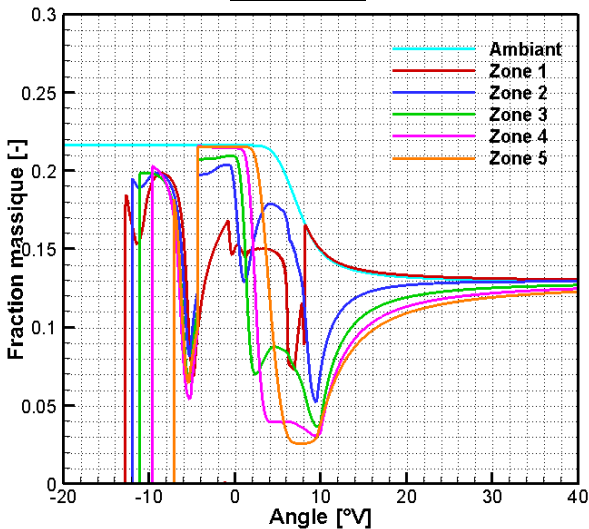


Figure 317 : Fraction massique d' O2 (Modèle CS)

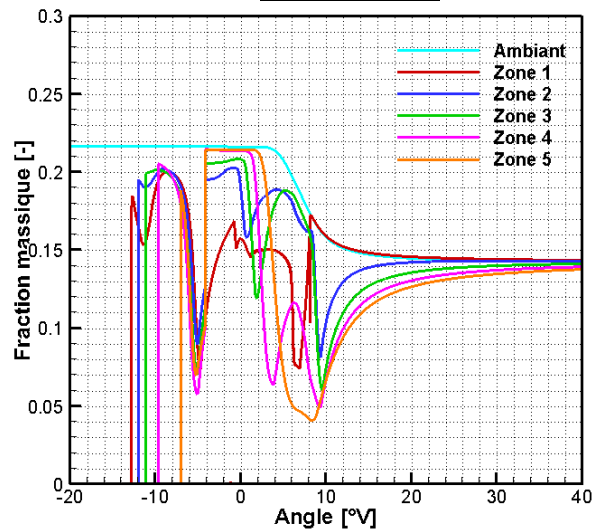


Figure 318 : Fraction massique d' O2 (Modèle CS_LR)

Le taux d'introduction est montré sur la Figure 305. L'injection pilote commence à 12.8 °V avant le point mort haut, tandis que l'injection principale commence à 0.8 °V avant le PMH. La pénétration de spray sur la Figure 306 montre que le spray touche la paroi vers 4 °V avant le PMH, avant l'injection principale.

La Figure 309 et la Figure 310 donnent les comparaisons globales entre le calcul et l'expérience. On constate que les modèles à chimie simplifiée donnent de bons résultats du point de vue qualitatif et quantitatif. Le taux de combustion pilote est surestimé. Le taux de combustion principal est également légèrement surestimé. Le modèle CS_LR donne les meilleurs résultats. La réduction du délai d'inflammation de la combustion principale (par comparaison au cas sans pilote) est bien capturée par le modèle.

A la lumière des figures (Figure 311 à Figure 318), on peut découper la combustion en plusieurs étapes, comme résumé ci-après :

Délai de combustion pilote (-12.8 °V ~ -10 °V). Dans cette phase, le carburant pénètre dans le spray et se mélange avec le gaz ambiant chaud.

Combustion pilote en mode pré mélange (-10 °V ~ -8 °V). Vers 10 °V avant le PMH, la combustion commence au nez du spray (Zone 3). La température augmente rapidement jusqu'à 2400 K.

Fin de combustion pilote (-9 °V ~ -5 °V). La combustion pilote se propage en aval du spray (zones 4 et 5). Avant l'impact aux parois, vers 5 °V avant le PMH, tout le carburant injecté est consommé.

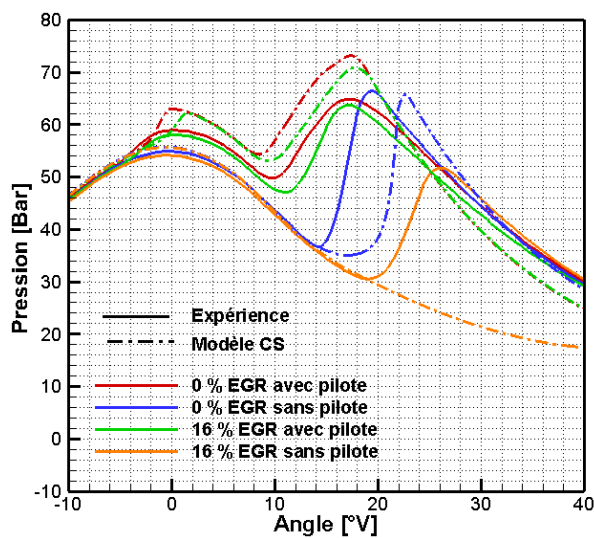
Impact de paroi et refroidissement (-5 °V ~ -0.8 °V). Il y a refroidissement des gaz après l'impact de la paroi et avant inflammation du carburant principal.

Inflammation de combustion principale (-0.8 °V ~ 2 °V). Très peu de temps après le début de l'introduction de carburant de l'injection principale, le carburant s'enflamme près du nez de l'injecteur (zone 2) du fait du mélange avec les produits chauds issus de la combustion pilote, et s'étend ensuite aux zones en aval au fur et à mesure de la pénétration du jet issu de l'injection principale. On retrouve ici bien les observations expérimentales présentées dans la littérature concernant l'inflammation du carburant suite à une combustion pilote.

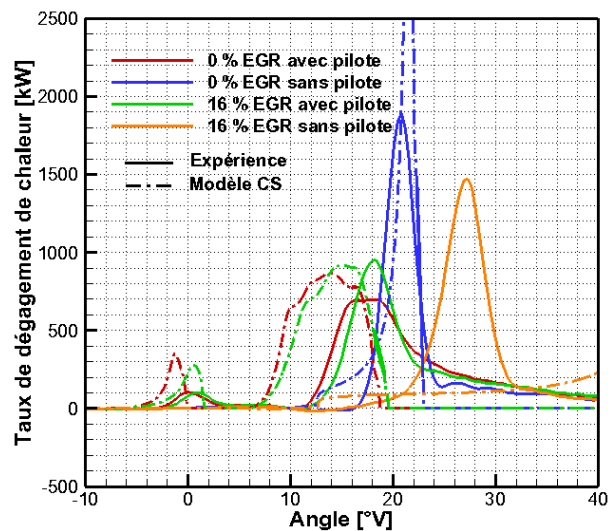
Développement de combustion principale (2 °V ~ 9 °V). La combustion est alors diffusive et se fait donc au fur et à mesure que le spray brasse des gaz ambiants.

4.4.4.2 Influence de l'EGR

Les points no. 7 à 10 du Tableau 36 sont étudiés ici pour avoir l'effet d'EGR dans le cas d'une injection double. Deux niveaux d'EGR, 0 % et 16 %, sont considérés ici. L'injection principale démarre à 5.8°C après le PMH. L'injection pilote démarre à -8.1°C. Sur les figures suivantes, on donne également les résultats sans injection pilote (mêmes paramètres pour l'injection principale).



(a) : pression



(b) : taux de dégagement de chaleur

Figure 319 : Influence de l'EGR pour les points de fonctionnement 7 et 10 (Modèle CS)

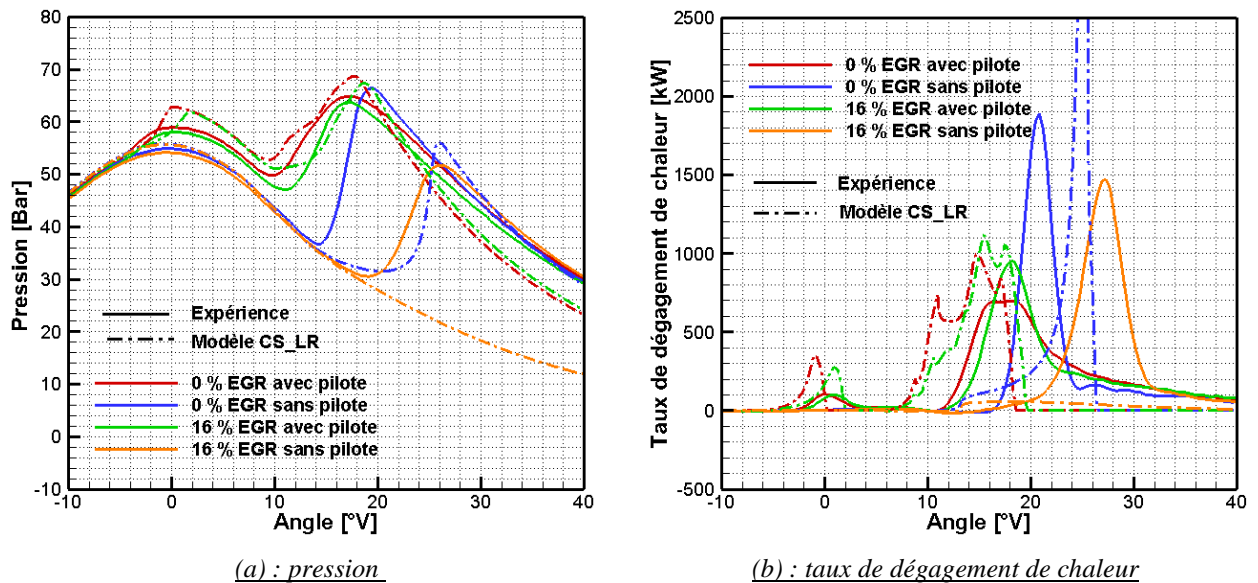


Figure 320 : Influence de l'EGR pour les points de fonctionnement 7 et 10 (Modèle CS_LR)

Le modèle retrouve bien l'évolution du dégagement de chaleur avec le taux d'EGR du point de vue qualitatif, avec une augmentation du délai d'inflammation, et une augmentation de la part de pré-mélange, pouvant se traduire par un pic de dégagement de chaleur global plus important. Comme expliqué dans le paragraphe précédent, le modèle retrouve également bien l'impact de la combustion pilote sur le délai de la combustion principale avec une combustion principale qui devient essentiellement diffusive.

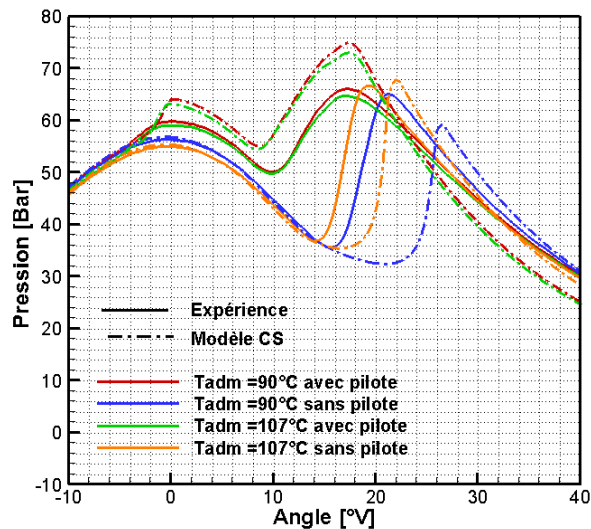
Des écarts quantitatifs sont néanmoins visibles.

Le modèle de combustion à limite de richesse conduit à un léger retardement de la combustion principale et semble dans ce cas en meilleur accord avec les relevés expérimentaux.

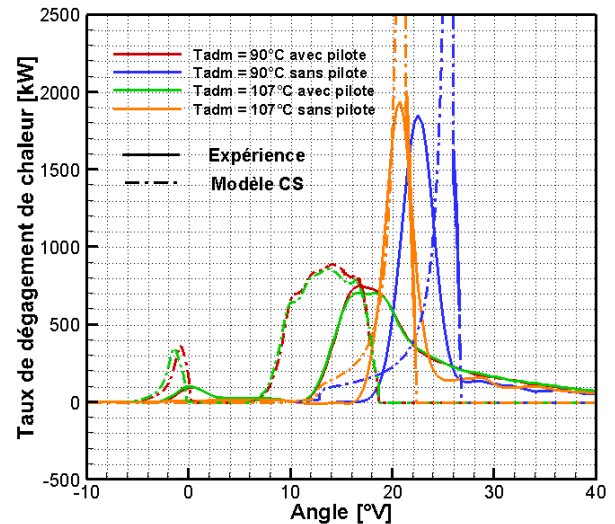
4.4.4.3 Influence de la température d'admission

On étudie maintenant l'influence de la température d'admission (23°C et 38°C) pour des points de fonctionnement sans EGR. Après calcul, les températures respectives des gaz en fin d'admission sont de 90 °C et 107 °C (réchauffement des gaz par échange avec les parois chaudes et mélange avec les gaz résiduels).

Sur les courbes suivantes, on donne également les cas sans injection pilote (mêmes paramètres pour l'injection principale).

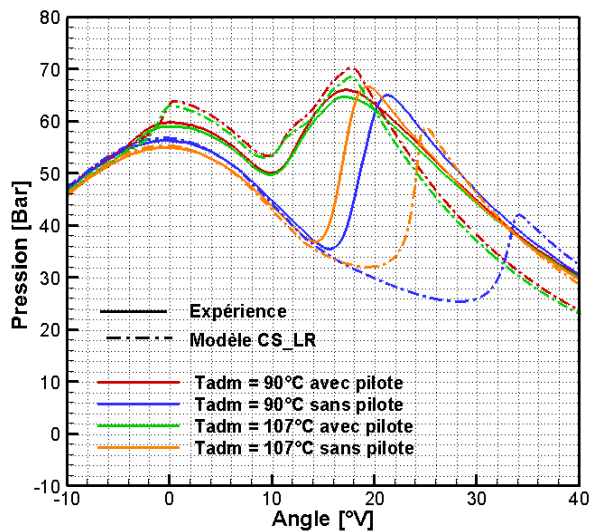


(a) : pression

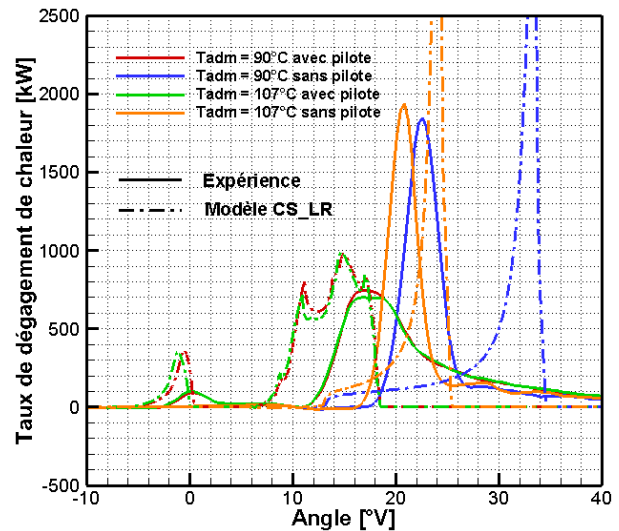


(b) : taux de dégagement de chaleur

Figure 321 : Influence de la température d'admission pour les points de fonctionnement 11 et 14 (Modèle CS)



(a) : pression



(b) : taux de dégagement de chaleur

Figure 322 : Influence de la température d'admission pour les points de fonctionnement 11 et 14 (Modèle CS_LR)

De même que pour l'influence du taux d'EGR, le modèle à chimie simplifiée est capable de retrouver l'influence de la température d'admission sur la combustion, avec notamment une très légère baisse du délai d'inflammation pour la combustion pilote. La combustion principale n'est pas affectée par la température d'admission, ce que retrouve bien le modèle.

Pour les cas sans pilote, le modèle retrouve bien la réduction du délai d'inflammation et donc l'avancement de la combustion dans le cas d'une injection simple. Le taux de dégagement de chaleur est par contre très largement surestimé pour les deux modèles CS et CS_LR.

4.4.4.4 Influence du délai entre les injections

On étudie dans ce paragraphe l'impact de l'avancement de l'injection pilote, tous les autres paramètres étant maintenus constants. Le début d'injection principale est à 0.8°V avant le PMH. Deux avances de l'injection pilote sont testées : 12.8°V et 24.8°V avant le PMH (délai entre les débuts d'injection pilote et principale de 12 et 24

degrés respectivement). On donne les résultats pour le modèle CS sur les figures suivantes. Le cas sans pilote est également représenté pour comparaison.

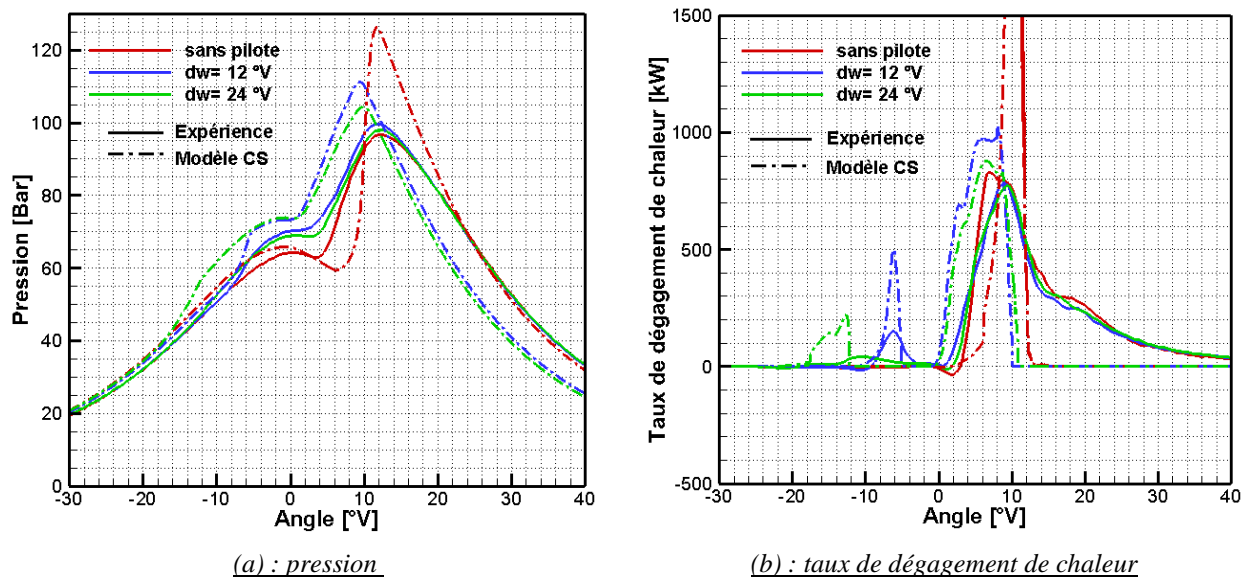


Figure 323 : Influence du délai entre l'injection pilote et l'injection principale : points de fonctionnement 15, 16, 17 (Modèle CS)

Expérimentalement, on constate que l'avancement de l'injection pilote se traduit par un léger avancement de la combustion pilote. En revanche, l'impact sur la combustion principale est négligeable. Ceci est retrouvé par le modèle CS. Là-encore le taux de dégagement de chaleur en début de combustion principale est surestimé.

4.4.5 Modèle sans chimie (Multi Injections)

L'étude de sensibilité aux paramètres physiques des cas de multi injections pour le modèle sans chimie est également effectuée en simulant les points de fonctionnement no.7 à 17. Parmi eux, le point no.16 est de nouveau choisi comme un point représentatif. L'évolution de combustion sera analysée en détail pour ce point. Le Tableau 33 montre le délai pour chaque point de fonctionnement en multi injections.

	Délai d'inflammation pilote		Délai d'inflammation pilote	
	[°V après SOI]	[°V après PMH]	[°V après SOI]	[°V après PMH]
Point no.7	3.7	-4.4	2.9	8.7
Point no.8	-	-	8.6	14.4
Point no.9	4.9	-3.2	3.8	9.6
Point no.10	-	-	11.2	17
Point no.11	4.8	-3.3	4.3	10.1
Point no.12	-	-	11.5	17.3
Point no.13	4.3	-3.8	4.2	10
Point no.14	-	-	10.0	15.8
Point no.15	-	-	3.0	2.2
Point no.16	2.8	-10.0	0.8	0
Point no.17	6.0	-18.8	0.4	-0.4

Tableau 33 : Délai d'inflammation pour les modèles sans chimie (Multi injections)

4.4.5.1 Analyse d'un point représentatif

La Figure 324 montre la comparaison entre le coefficient de réaction r_{reac} du modèle SC et la fréquence de mélange f_{mix} du modèle SC_MM pour le point 16.

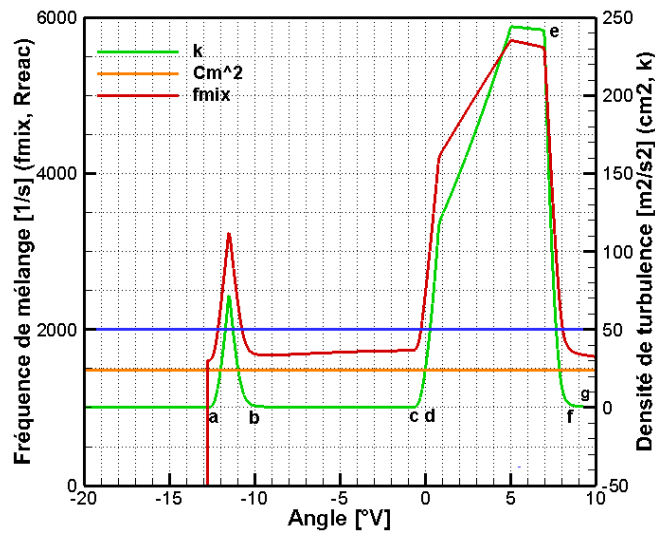


Figure 324 : Fréquence de mélange et coefficient de réaction (point 16)

On peut distinguer plusieurs phases :

- Phase ab : Cette phase correspond au délai d'inflammation de la combustion pilote. Les valeurs des deux sources de turbulence sont voisines et la fréquence de mélange f_{mix} est aussi comparable avec la valeur de r_{reac} fixée à 2000 (ligne bleue).
- Phase bc : Combustion pilote. $r_{\text{reac}} > f_{\text{mix}}$
- Phase cd : Délai d'inflammation de la combustion principale. La fréquence de mélange devient supérieure au coefficient de réaction juste après le début d'injection principale.
- Phase de : Combustion principale. Dans cette phase, $k > c_m^2$, la fréquence de mélange est contrôlée par la turbulence liée à l'injection. La valeur de f_{mix} est de 2 à 3 fois plus grande que celle de r_{reac} .
- Phase ef : Fin de l'injection. La turbulence liée à l'injection décroît rapidement pendant cette phase jusqu'à devenir nulle. A la fin de l'injection, $r_{\text{reac}} > f_{\text{mix}}$.
- Phase fg : Fin de combustion. $r_{\text{reac}} > f_{\text{mix}}$ dans cette phase, la valeur de f_{mix} continue à baisser.

Cette analyse permet d'expliquer les positions relatives des modèles SC et SC_MM.

Les figures suivantes montrent les résultats des simulations.

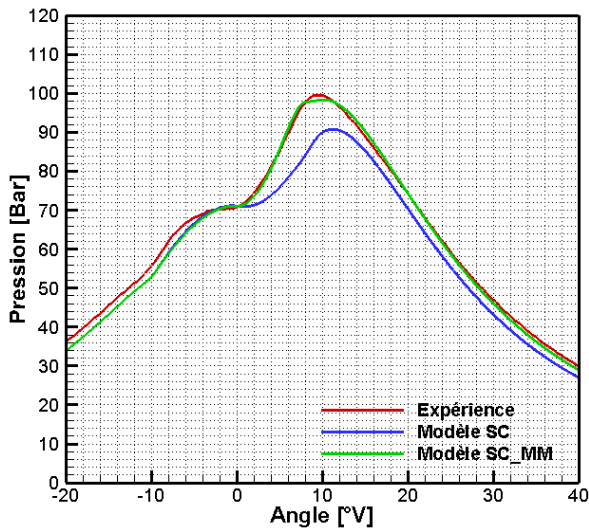


Figure 325: Comparaison des pressions

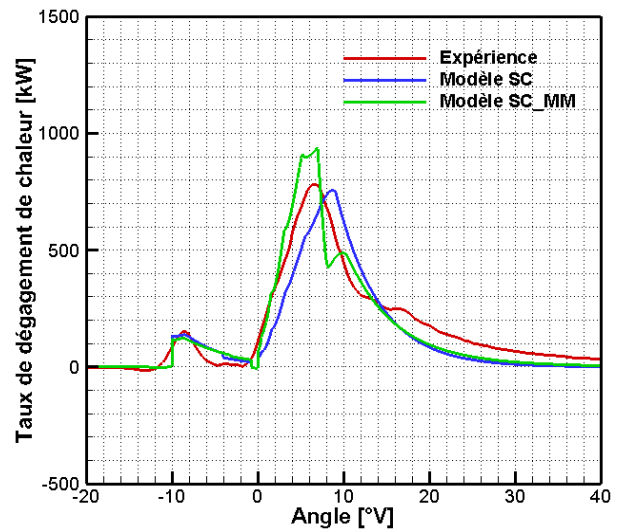


Figure 326: Taux de dégagement de chaleur total

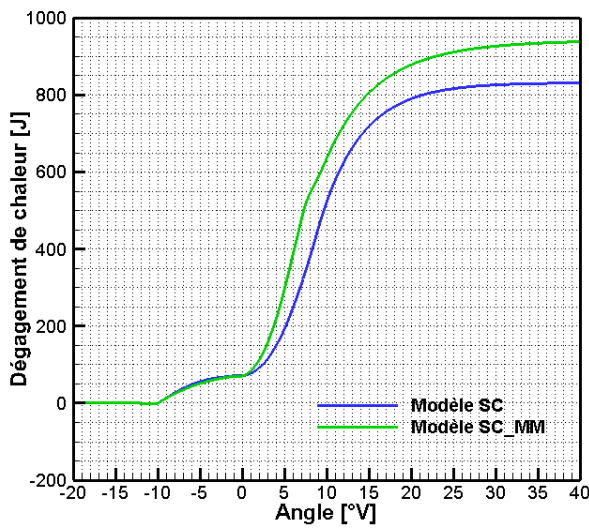


Figure 327 : Dégagement de chaleur total

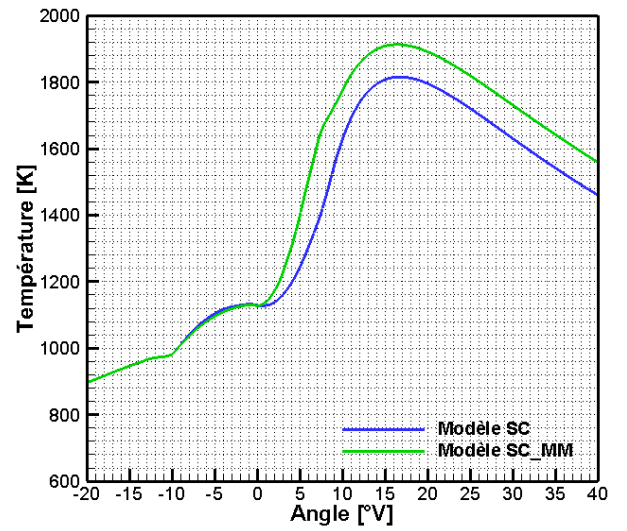


Figure 328: Température moyenne du cylindre

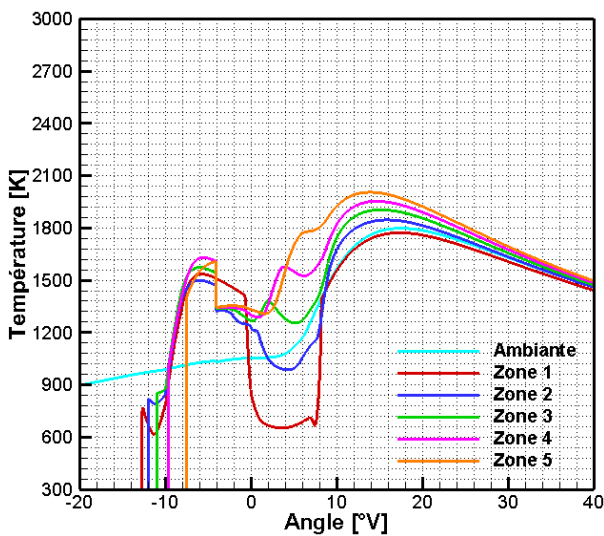


Figure 329 : Températures des zones de spray (Modèle SC)

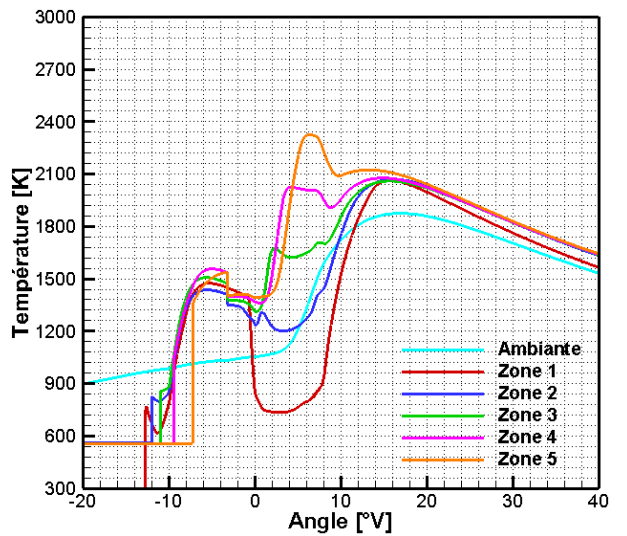


Figure 330: Températures des zones du spray (Modèle SC_MM)

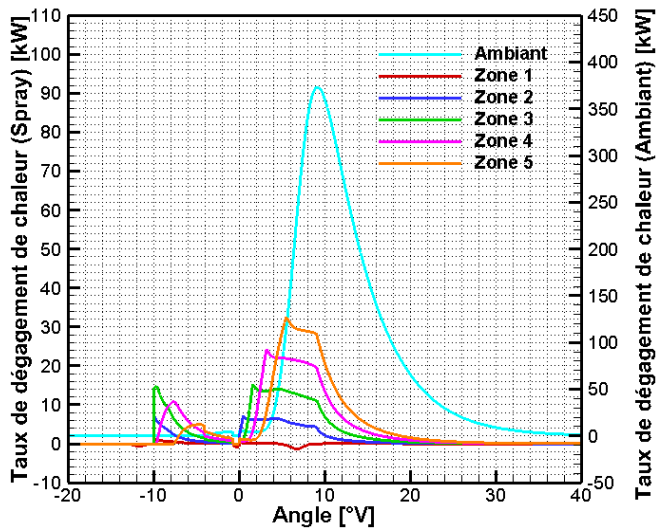


Figure 331: Taux de dégagement de chaleur dans les zones
(Modèle SC)

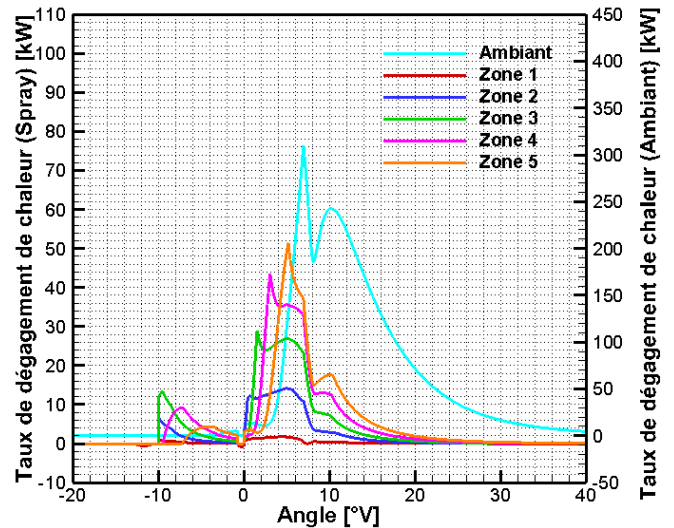


Figure 332: Taux de dégagement de chaleur dans les zones
(Modèle SC MM)

D'une manière générale, les modèles sans chimie suivent les mêmes étapes de combustion que les modèles à chimie simplifiée. La comparaison des résultats simulés et expérimentaux fait ressortir deux points :

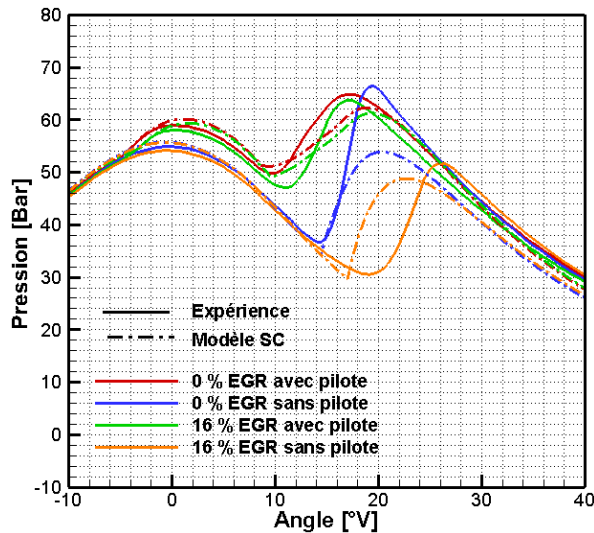
- Pendant la période de compression, la pression est un peu plus faible que l'expérience. Mais la combustion pilote simulée est un peu plus forte. En conséquence, la pression simulée rejoint la pression expérimentale au début de l'injection principale.
- Le modèle SC_MM donne une combustion très proche de l'expérience, les courbes de pression sont presque confondues. Le début de la combustion principale est plus lent avec le modèle SC, donc le pic de pression est moins élevé. Dans les deux cas, les pics de dégagement de chaleur simulés sont proches de l'expérience.

Par rapport aux modèles à chimie simplifiée, les modèles SC présentent les différences suivantes :

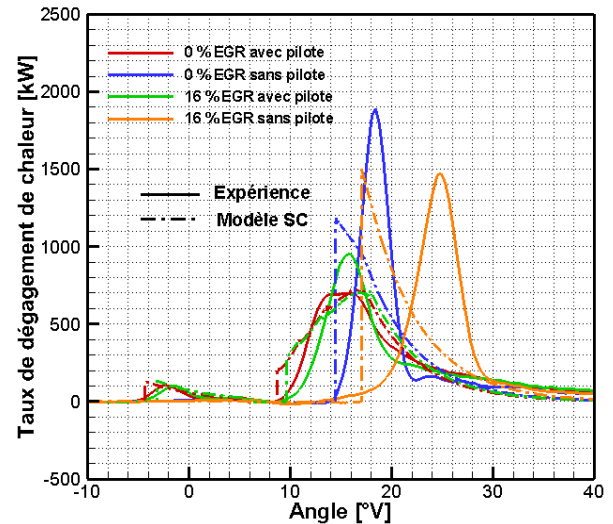
- comme le délai est une entrée du modèle le calcul du taux de dégagement de chaleur est plus proche de l'expérience.
- Les modèles sans chimie donnent des températures maximales plus faibles. La valeur maximum du modèle SC_MM est 2350 K, 150 K plus petite que celle des modèles à chimie simplifiée.
- Les modèles sans chimie consomment le carburant plus lentement à la fin de la combustion qui est de ce fait retardée.

4.4.5.2 Influence de l'EGR

Comme pour les modèles à chimie simplifiée, le point 7 (0 % EGR avec injection pilote), le point 8 (0 % EGR sans injection pilote), le point 9 (16 % EGR avec injection pilote) et le point 10 (16 % EGR sans injection pilote) sont étudiés. La Figure 333 et la Figure 334 montrent les résultats simulés et les comparaisons avec les résultats expérimentaux.

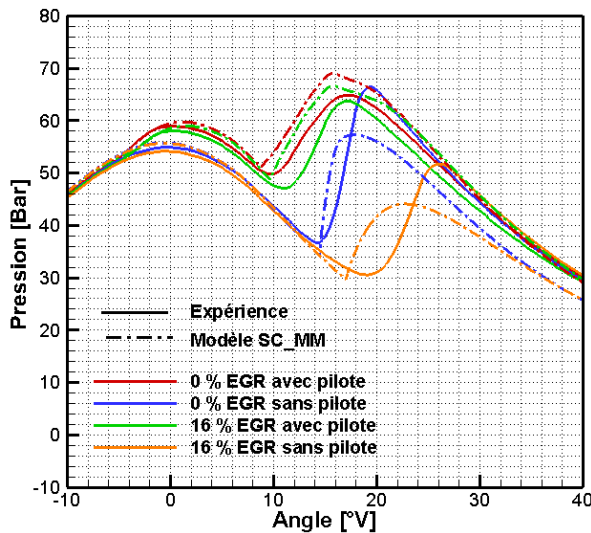


(a) : pression

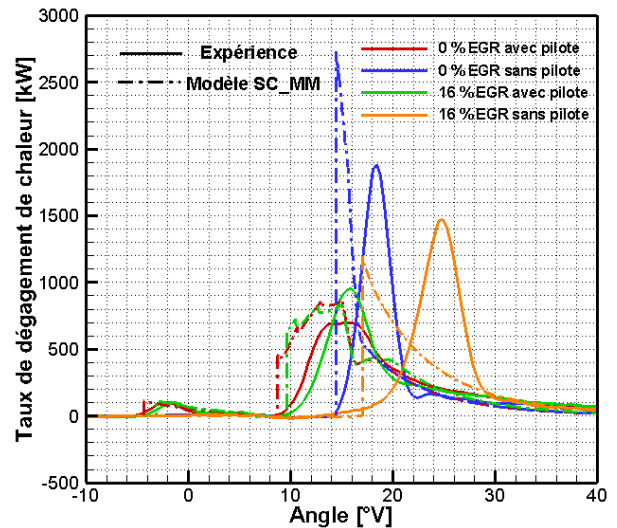


(b) : taux de dégagement de chaleur

Figure 333 : Influence de l'EGR pour les points de fonctionnement 7-10 (Modèle SC)



(a) : pression



(b) : taux de dégagement de chaleur

Figure 334 : Influence de l'EGR pour les points de fonctionnement 7-10 (Modèle SC_MM)

Qualitativement, l'influence de l'EGR est assez bien restituée par les modèles SC et SC_MM. Naturellement, l'augmentation du délai liée à l'EGR est ici une entrée du modèle. Mais les évolutions de pression sont ensuite assez proches des relevés expérimentaux, surtout pour les points avec injection pilote. Cependant, aucun des modèles ne retrouve la légère hausse du pic de taux de dégagement de chaleur de la combustion principale lorsque le taux d'EGR augmente, avec une injection pilote. Celle-ci est probablement due à une part de combustion de pré mélange majorée par l'allongement du délai. La valeur choisie pour ce dernier n'est peut être pas totalement judicieuse. La suppression de l'injection pilote conduit à un allongement sensible du délai, en particulier en présence d'EGR qui conduit à des combustions beaucoup plus largement pré mélangées, avec des taux de dégagement de chaleur bien plus élevés. Cette tendance est retrouvée par les deux modèles. Néanmoins, seul le modèle SC_MM prévoit que, en l'absence d'injection pilote, le taux de dégagement de chaleur diminue en présence d'EGR. Il est probable que cela soit dû à une cinétique chimique ralentie et il est donc normal que le modèle SC ne capture pas cette tendance. Ce ralentissement de la cinétique est peut être remplacé par une baisse de la fréquence de mélange dans le modèle

SC_MM. Quantitativement, les écarts entre les simulations et les mesures sont acceptables. Ils sont plus petits pour les cas avec pilote (combustion diffusive) et avec le modèle SC_MM, le coefficient f_{mix} étant mieux adapté que $r_{\text{réac}}$.

4.4.5.3 Influence de la température d'admission

Sans EGR, deux niveaux de température d'admission sont testés avec les modèles sans chimie. Les températures d'admission de 29 °C et 38 °C dans le répartiteur correspondent à des températures moyennes dans le cylindre à la fin de l'admission de 90 °C et 107 °C. Les résultats simulés sont montrés sur la Figure 335 et la Figure 336.

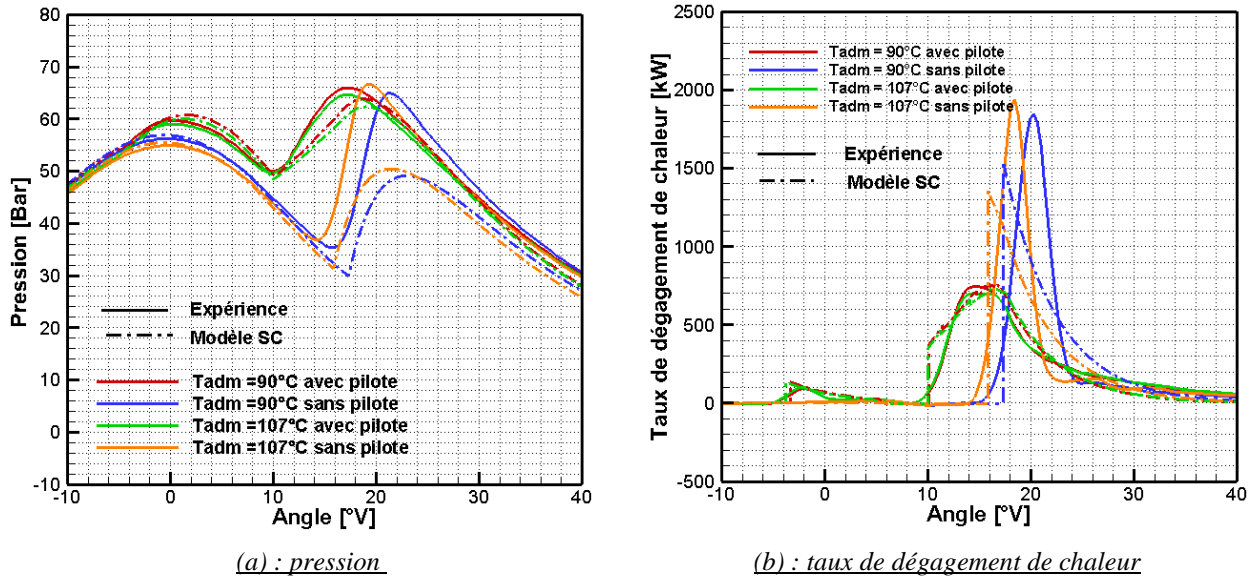


Figure 335 : Influence de la température d'admission pour les points de fonctionnement 11-14 (Modèle SC)

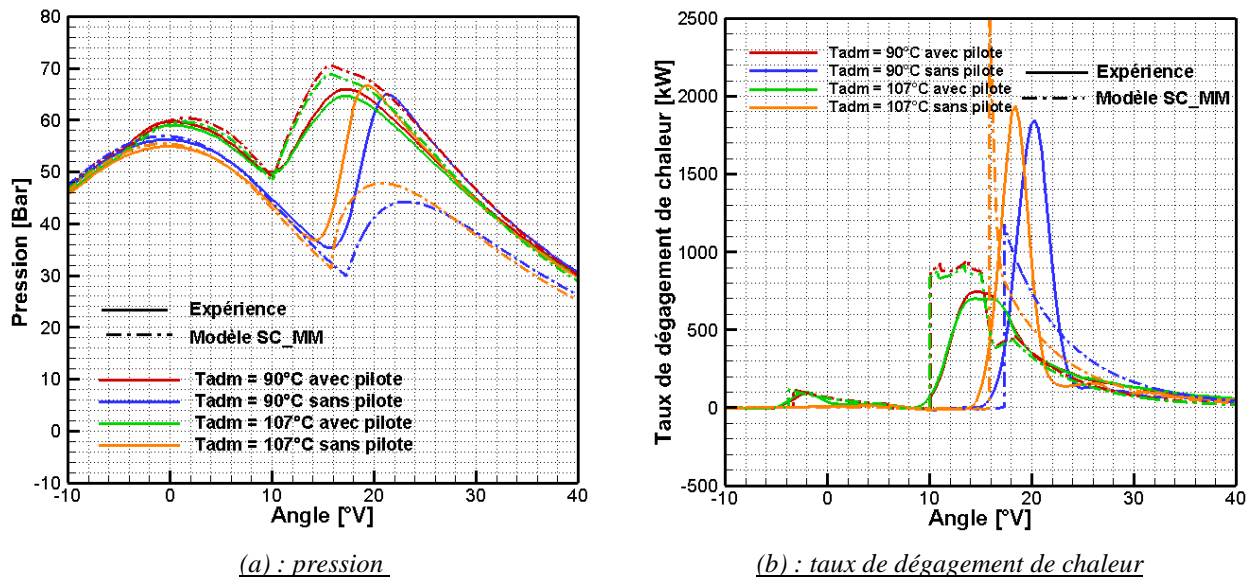


Figure 336 : Influence de la température d'admission pour les points de fonctionnement 11-14 (Modèle SC_MM)

Qualitativement, les deux modèles retrouvent l'absence d'effet significatif du changement de température d'admission lorsqu'une injection pilote est utilisée. En l'absence de pilote, l'effet principal d'une augmentation de la température d'admission est une réduction du délai d'inflammation qui est ici une entrée du modèle. Le taux de dégagement de chaleur est également très légèrement majoré. Le modèle SC_MM exagère cette majoration, tandis

que le modèle SC prévoit une tendance inverse. D'un point de vue quantitatif, les remarques déjà faites précédemment restent valables.

4.4.5.4 Influence du délai entre les injections

Avec une injection principale vers le point mort haut, qui conduit à une combustion expérimentale forte en mode diffusif, deux avances sont testées pour l'injection pilote, avec les modèles sans chimie. Le cas d'une injection sans pilote est également simulé. La Figure 337 et la Figure 338 montrent les comparaisons des pressions et des taux de dégagement de chaleur.

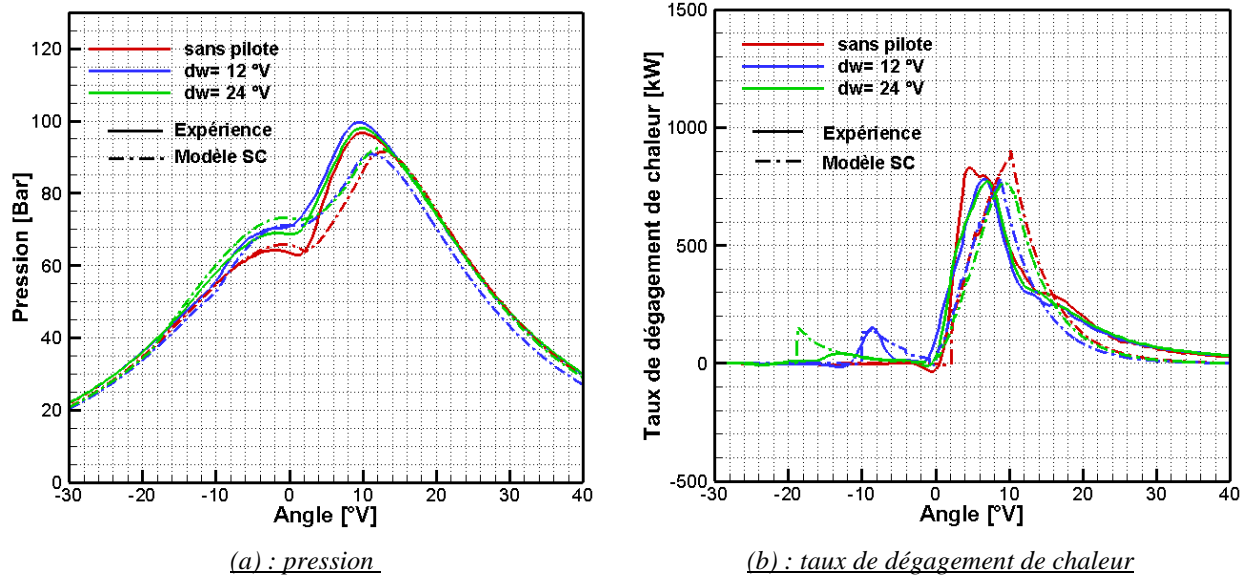


Figure 337 : Influence de l'intervalle entre les injections pour les points de fonctionnement 15, 16, 17 (Modèle SC)

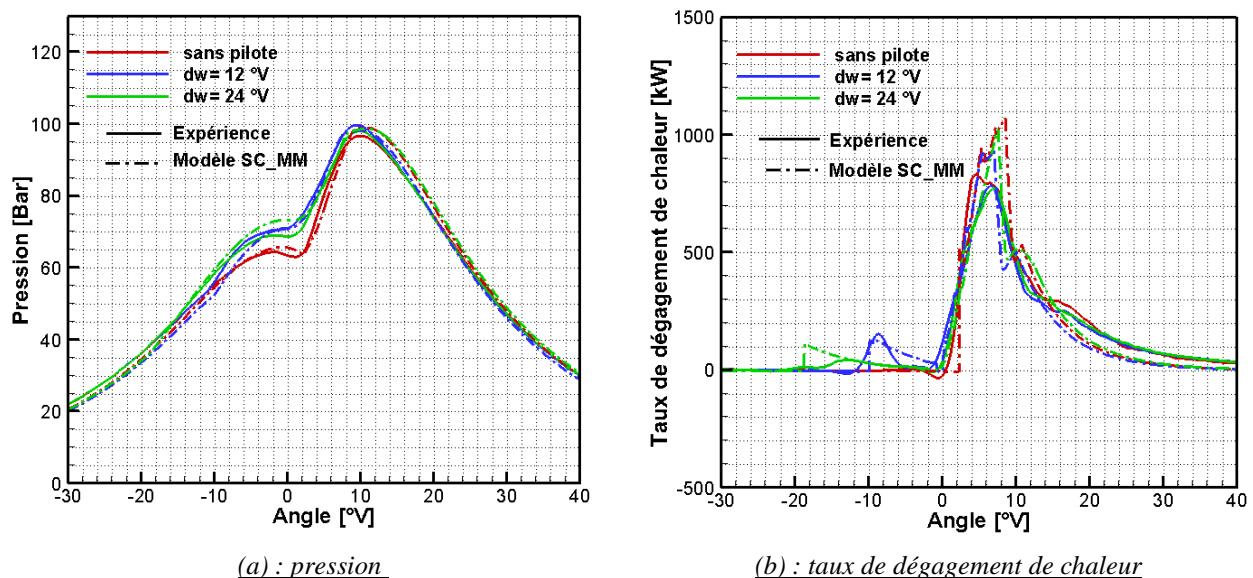


Figure 338 : Influence de l'intervalle entre les injections pour les points de fonctionnement 15, 16, 17 (Modèle SC MM)

Pour le point 15 (sans injection pilote), le délai d'inflammation court conduit à une combustion essentiellement diffusif. En conséquence, les modèles sans chimie fonctionnent bien pour ce point. Ils réussissent à capturer les évolutions de pression et les taux de dégagement de chaleur simulés sont comparables à l'expérience.

Les modèles retrouvent aussi l'absence d'influence de l'avance de l'injection pilote sur le déroulement de la combustion principale. En revanche, le taux de dégagement de chaleur inférieur pour la combustion pilote lorsque l'injection pilote est avancée n'est pas capturé par les modèles sans chimie. Cela semble normal, car cette tendance est probablement liée à des différences de cinétique chimique.

4.5 Synthèse

A la lumière des résultats obtenus dans des cas moteur avec les différentes versions du modèle développé, il est possible de tirer les conclusions suivantes :

- Le modèle à Chimie détaillée était, a priori, celui qui devait avoir les meilleures capacités prédictives. A posteriori, les tests menés n'ont pas réellement confirmé cela. En particulier, il semble que la prédiction du délai d'inflammation soit souvent prise en défaut, ce qui conduit inévitablement ensuite à des écarts sur l'évaluation de la combustion proprement dite. A ce stade, il est difficile d'indiquer avec précision le ou les éléments à l'origine de ces mauvaises prédictions. Il apparaît tout d'abord que les schémas cinétiques utilisés comportent une certaine incertitude : même dans des cas très simples de réacteurs homogènes ils ne conduisent pas tous à des résultats identiques, notamment pour des températures faibles et des combustions diluées. Il est également possible que la discrétisation du spray effectuée avec un faible nombre de zones soit insuffisante et que l'absence de discrétisation radiale soit préjudiciable. Cette version du modèle s'est révélée extrêmement sensible aux valeurs des autres paramètres, par exemple ceux déterminant les échanges thermiques aux parois. Or ces derniers comportent eux aussi une part d'incertitude inévitable. Enfin, le temps de calcul très élevé (plusieurs jours de calcul sur un PC récent pour un point de fonctionnement) constitue un handicap pour l'exploitation et le développement du modèle avec chimie détaillée. Il est lié à la nécessité d'utiliser des pas de temps très petits, qui semble découler du couplage entre les équations de transport du modèle de spray et les équations de cinétique chimique. En effet, en l'absence de transfert entre les zones, un modèle à chimie détaillée d'une dizaine de zones peut tourner en quelques minutes. Il est possible qu'un travail spécifique sur la résolution numérique puisse améliorer cet aspect.
- Le modèle à chimie simplifiée permet d'obtenir des résultats intéressants avec un temps de calcul convenable. Les tendances qualitatives sont globalement bien restituées, en particulier pour les combustions diffusives. L'influence d'une combustion pilote sur le déroulement de la combustion principale est également bien capturée. Cependant des écarts quantitatifs existent, notamment sur le délai d'inflammation et sur les combustions fortement pré mélangées pour lesquelles la cinétique joue un rôle important. La limitation de richesse permet dans une certaine mesure de compenser l'absence de discrétisation radiale du spray en excluant du processus de combustion la fraction de carburant trop riche ou trop pauvre. Si elle semble parfois améliorer les résultats, c'est aussi parfois l'inverse, si bien qu'il est difficile de conclure quant à son utilité.
- Enfin, le modèle sans chimie, a par essence une prédictivité plus limitée que les autres, puisque le délai d'inflammation est une entrée du modèle. Cependant, ses résultats sont intéressants car ils illustrent l'influence des mauvaises prédictions de délai des autres modèles sur leurs résultats finaux. En outre, une utilisation comme « outil de diagnostic » afin d'aider à interpréter des résultats expérimentaux est envisageable.

L'utilisation d'un sous modèles de micro-mélange n'a pas apporté d'amélioration claire des résultats. A posteriori, il semblerait judicieux de coupler le modèle de micro-mélange avec un calcul de chimie simplifiée pour que l'un ou l'autre des phénomènes puisse contrôler la combustion suivant les cas traités, ou suivant l'avancement de la combustion.

- Il convient de noter ici que, quelque soit la version du modèle, le nombre de paramètres de calage reste restreint, voire très restreint pour le modèle CD. Cela constitue un atout en terme « d'universalité » du modèle, en particulier pour le passage d'un moteur à l'autre ou pour la modélisation d'un moteur au cours de sa phase de conception, avant de disposer d'essais expérimentaux. En revanche, cela peut justifier, au moins partiellement, des écarts quantitatifs par rapport à l'expérience.

Plusieurs adaptations ont été nécessaires pour permettre au modèle développé de simuler la combustion dans un moteur Diesel. Le modèle de spray a été modifié pour prendre en compte les variations de volume liées au déplacement du piston. Un traitement particulier a également été proposé lorsque le spray impacte une paroi de la chambre de combustion. En outre, des sous modèles existant ont été implémentés pour décrire le taux d'introduction du carburant et les échanges thermiques à travers les parois.

Les différentes versions du code (CD, CS, CS_LR, SC et SC_MM) ont alors été testées, sur un point de fonctionnement représentatif de charge partielle, avec une injection simple et l'utilisation d'EGR qui conduisent à une combustion assez fortement pré mélangée. Une analyse détaillée du processus de combustion est menée avec la version CD, puis les autres versions sont comparées.

Une étude approfondie de l'influence des différents paramètres de la modélisation est ensuite proposée. Les coefficients des modèles d'évaporation, d'angle du spray ou la position de la paroi semblent avoir un impact relativement modéré. En revanche, une sensibilité très forte aux paramètres affectant les échanges thermiques aux parois, au schéma cinétique utilisé, ou au mode de discrétisation en zones est observée dans le cas du modèle CD. L'influence des paramètres spécifiques des autres modélisations CS, CS_LR, SC et SC_MM est également analysée.

Enfin, les cinq versions du modèle ont été confrontées à des relevés expérimentaux pour évaluer leur aptitude à retranscrire l'influence de paramètres physiques sur la combustion. Ces études de sensibilité concernent le taux d'EGR, la pression d'injection, la pression et la température d'admission. Elles impliquent des points de fonctionnement avec une injection simple mais aussi une injection pilote suivie d'une injection principale. Pour ces dernières conditions, un point représentatif est également analysé en détail, le mode de combustion ainsi obtenu étant sensiblement différent.

A la lumière des résultats ainsi obtenus, une synthèse est proposée en fin de chapitre. Elle tente de mettre en évidence les avantages et inconvénients respectifs des différentes versions du code.

Conclusions et perspectives

L'étude bibliographique réalisée au début de ce mémoire propose une synthèse des connaissances actuelles sur la combustion Diesel classique et sur les principaux modes de combustion à allumage par compression alternatifs. Elle fait également un point sur les modélisations phénoménologiques de la combustion Diesel et décrit en détail quelques sous modèles de spray et de cinétique chimique.

Le chapitre 2 décrit le modèle élaboré par la suite. Il est basé sur la modélisation de spray 1D transitoire de Musculus et al., à laquelle de nombreux développements et améliorations sont apportés, pour passer d'un spray inerte en milieu infini à un spray vaporisant puis brûlant en milieu confiné. Plusieurs approches du calcul de taux de réaction sont envisagées, allant jusqu'à la résolution d'un mécanisme chimique détaillé avec CHEMKIN.

Les différentes versions ainsi obtenues sont alors testées pour simuler des combustions dans une chambre à volume constant (Chapitre 3) puis dans un moteur Diesel (Chapitre 4). Les résultats de simulation sont d'abord donnés sur quelques cas représentatifs puis confrontés avec des relevés expérimentaux. Des études de sensibilité des résultats aux paramètres des modèles sont menées. Enfin, l'aptitude des modèles à retranscrire l'influence de certains paramètres physiques sur la combustion est évaluée.

Les principaux apports et points forts des modélisations développées sont les suivants :

- Le couplage d'un modèle de spray 1D transitoire avancé avec une description détaillée de la cinétique chimique et son application à des cas moteur n'avait semble-t-il pas été réalisé jusqu'ici.
- L'approche eulérienne tranche avec l'approche lagrangienne le plus souvent utilisée dans ce type de modèles phénoménologiques à la suite du modèle d'Hiroyasu. Cette approche est notamment plus propice à la simulation des injections multiples.
- Les modèles développés visent à simuler un large spectre de combustions Diesel, allant de combustions diffusives « classiques » à des combustions fortement pré mélangées.
- Le nombre de paramètres de calage a été réduit au maximum.
- Plusieurs voies de modélisation pour le taux de combustion ont été comparées.

Ces travaux ouvrent plusieurs perspectives d'amélioration et de développements :

- Le sous-modèle d'impact aux parois qui a été utilisé est très simple. Il pourrait être complexifié, en s'inspirant notamment du modèle de Bordet [133].
- Le modèle de dilatation de jet utilisé (consistant à supposer une masse enfermée dans le spray identique entre les cas inerte et brûlant) peut également être remis en question. D'autres approches pourraient être testées, afin notamment de retrouver une pénétration plus rapide en cas brûlant, ce que semble indiquer les expériences et ce que ne retrouve pas le modèle actuel (seule la dilation radiale est retrouvée).
- Une limite du modèle est de mal décrire la dispersion radiale du spray. Sans nécessairement discrétiser le spray radialement et résoudre l'ensemble des équations suivant r (ce qui conduirait à un modèle 2D qui risquerait d'augmenter encore les temps de calculs), un découpage radial en un nombre limité de zones et une description phénoménologiques des échanges entre ces zones pourrait être envisagée. Elle permettrait peut être de se rapprocher encore du modèle de Dec et al. dans les cas diffusifs avec une flamme de diffusion qui entoure le spray.

- La description des interactions spray-spray n'a pas été abordée dans cette étude. Ce point peut constituer également une perspective intéressante.
- De même, il conviendrait de décrire l'influence de l'aérodynamique interne (swirl en particulier) sur le développement des sprays et le déroulement de la combustion. Il conviendrait également de tenir compte de la forme de la chambre de combustion en distinguant en particulier la zone de squish de la zone du bol.
- Concernant la prise en compte de la chimie, le modèle à chimie simplifiée pourrait être amélioré en utilisant un facteur pré-exponentiel dépendant de la température et de la pression. Il serait également intéressant d'envisager une approche intermédiaire entre la chimie simplifiée et la chimie complexe, avec une approche semi globale à quelques réactions.
- Enfin, ce modèle (notamment la version à chimie détaillée) pourrait être complété par des calculs d'émission de polluants (CO, hydrocarbures imbrûlés, NOx, voire particules).
- Finalement, d'autres cas d'applications pourraient être testés, comme la combustion RCCI par exemple.

Annexes

Annexe 1 : Points de fonctionnement moteur

Les caractéristiques détaillées des points de fonctionnement moteur utilisés dans le chapitre 4 sont recensées dans les tableaux ci après. Pour l'injection, une avance positive signifie une injection avant le PMH, une valeur négative correspondant à une injection après le PMH. Le Tableau 34 montre la première série de conditions de fonctionnement avec des points à PME = 5 bars, avec une injection simple. Différents niveaux de taux d'EGR et de pression rail sont étudiés.

	Point no.1	Point no.2	Point no.3
<i><u>Paramètres généraux :</u></i>			
Régime [tr/min]	1453.2	1453.0	1454.5
Taux d'EGR [%]	2.9	40.2	40.9
Excès d'air moteur	2.142	1.211	1.200
Débit d'air [mg/cp]	566	320	318
Consommation de carburant [mg/str]	18.35	18.37	18.41
<i><u>Température-Pressions :</u></i>			
Température d'admission [°C]	36	36	36
Pression d'admission [mbar]	1201	1203	1205
<i><u>Injection :</u></i>			
Pression rail [bar]	897	897	1495
Quantité [mg/cp]	18.05	17.95	17.95
Avance [°V]	3.49	3.49	3.49
<i><u>Espèces :</u></i>			
[CO ₂] [%]	6.61	11.15	11.23
[O ₂] [%]	11.58	5.30	5.12

Tableau 34 : Conditions de fonctionnement pour l'analyse de l'influence du taux d'EGR et de la pression d'injection - Injection simple, PME 5 bar

Une autre série des conditions de fonctionnement avec différents niveaux de taux d'EGR et de pression d'admission à PME = 7 bars est décrite dans le Tableau 35.

	Point no.4	Point no.5	Point no.6
<u>Paramètres généraux :</u>			
Régime [tr/min]	1669.7	1669.7	1663.1
Taux d'EGR [%]	1.3	30.8	2.2
Excès d'air moteur	1.893	1.236	1.604
Débit d'air [mg/cp]	654	427	556
Consommation de carburant [mg/str]	24.00	23.96	24.07
<u>Température-Pressions :</u>			
Température d'admission [°C]	41	40	41
Pression d'admission [mbar]	1359	1357	1175
<u>Injection :</u>			
Pression rail [bar]	1098	1094	1099
Quantité [mg/cp]	25.10	25.15	24.95
Avance [°V]	3.49	3.49	3.49
<u>Espèces :</u>			
[CO ₂] [%]	7.80	11.69	8.99
[O ₂] [%]	10.07	4.75	8.17

Tableau 35 : Conditions de fonctionnement pour l'analyse de l'influence du taux d'EGR et de la pression d'admission - Injection simple, PME 7 bar

Pour l'étude d'une injection comprenant une injection pilote et une injection principale, deux avances différentes sont étudiées pour l'injection principale: avant et après le point mort haut. Pour l'injection principale après le point mort haut, le Tableau 36 et le Tableau 37 permettent d'analyser la sensibilité à l'EGR et à la température d'admission, respectivement. Le Tableau 38 illustre des conditions de fonctionnement avec l'injection principale avant le point mort haut, avec différents phasages de l'injection pilote.

	Point no.7	Point no.8	Point no.9	Point no.10
<i><u>Paramètres généraux :</u></i>				
Régime [tr/min]	1664	1664	1664	1664
Taux d'EGR [%]	0.0	0.0	16.23	16.45
Excès d'air moteur	1.572	1.670	1.332	1.403
Débit d'air [mg/cp]	546	546	461	461
Consommation de carburant [mg/str]	24.114	22.706	24.028	22.811
<i><u>Température-Pressions :</u></i>				
Température d'admission [°C]	38.5	38.5	38.5	38.5
Pression d'admission [mbar]	1176	1176	1176	1176
<i><u>Injection :</u></i>				
Pression rail [bar]	866	866	866	866
Quantité (pilote) [mg/cp]	1.5	0.0	1.5	0.0
Avance (pilote) [°V]	10.80	-	10.80	-
Quantité (principale) [mg/cp]	22.2	23.7	22.2	23.7
Avance (principale) [°V]	-3.12	-3.12	-3.12	-3.12
<i><u>Espèces :</u></i>				
[CO ₂] [%]	9.91	8.53	10.29	9.79
[O ₂] [%]	8.46	9.19	6.68	7.38

Tableau 36 : Conditions de fonctionnement pour l'analyse du taux d'EGR, avec et sans pilote

	Point no.11	Point no.12	Point no.13	Point no.14
<i><u>Paramètres généraux :</u></i>				
Régime [tr/min]	1664	1664	1664	1664
Taux d'EGR [%]	0.0	0.0	0.0	0.0
Excès d'air moteur	1.762	1.731	1.582	1.630
Débit d'air [mg/cp]	570	570	542	538
Consommation de carburant [mg/str]	22.471	22.867	23.798	22.917
<i><u>Température-Pressions :</u></i>				
Température d'admission [°C]	20	20	38	38
Pression d'admission [mbar]	1186	1186	1186	1187
<i><u>Injection :</u></i>				
Pression rail [bar]	866	866	866	866
Quantité (pilote) [mg/cp]	1.5	0.0	1.5	0.0
Avance (pilote) [°V]	10.80	-	10.80	-
Quantité (principale) [mg/cp]	22.1	23.7	22.21	23.7
Avance (principale) [°V]	- 3.12	- 3.12	- 3.12	- 3.12
<i><u>Espèces :</u></i>				
[CO ₂] [%]	8.29	8.03	8.71	8.43
[O ₂] [%]	9.28	9.61	8.76	9.11

Tableau 37 : Conditions de fonctionnement pour l'analyse de l'influence de la température d'admission, injection avec et sans pilote

	Point no.15	Point no.16	Point no.17
<i><u>Paramètres généraux :</u></i>			
Régime [tr/min]	1671	1671	1671
Taux d'EGR [%]	0.0	0.0	0.0
Excès d'air moteur	1.87	1.87	1.88
Débit d'air [mg/cp]	646	650	646
Consommation de carburant [mg/str]	23.96	24.05	23.92
<i><u>Température-Pressions :</u></i>			
Température d'admission [°C]	39	39	39
Pression d'admission [mbar]	1357	1363	1361
<i><u>Injection :</u></i>			
Pression rail [bar]	1097	1096	1098
Quantité (pilote) [mg/cp]	0	2.0	2.0
Avance (pilote) [°V]	-	15.5	27.5
Quantité (principale) [mg/cp]	25.15	20.50	22.21
Avance (principale) [°V]	3.5	3.5	3.5
<i><u>Espèces :</u></i>			
[CO ₂] [%]	7.78	7.76	7.72
[O ₂] [%]	10.01	10.06	10.08

Tableau 38 : Conditions de fonctionnement pour l'analyse de l'influence du phasage de l'injection pilote

Annexe 2 : Résultats détaillés sur l'influence du nombre de zones

Des résultats obtenus avec 7 et 9 zones sont présentés ici en complément des éléments déjà analysés au 4.3.3.2

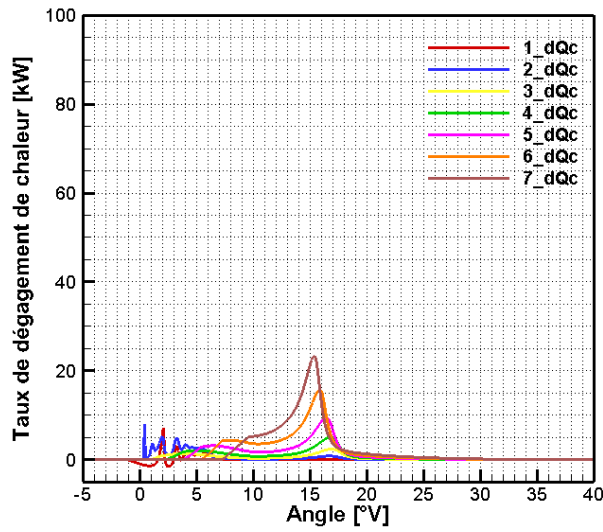


Figure 339 : Taux de dégagement de chaleur (7 Zones)

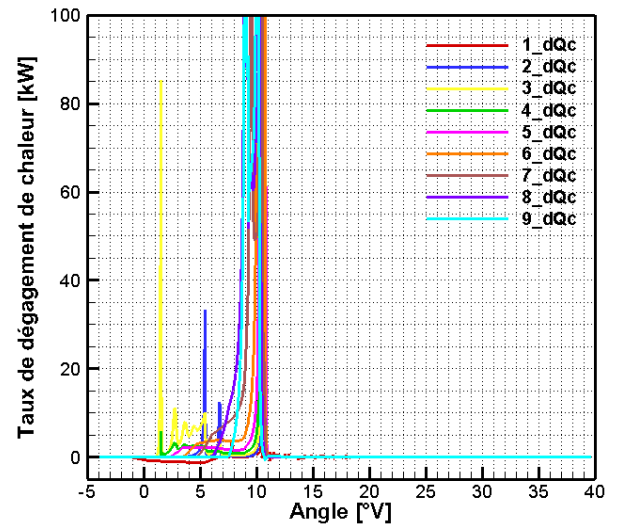


Figure 340 : Taux de dégagement de chaleur (9 Zones)

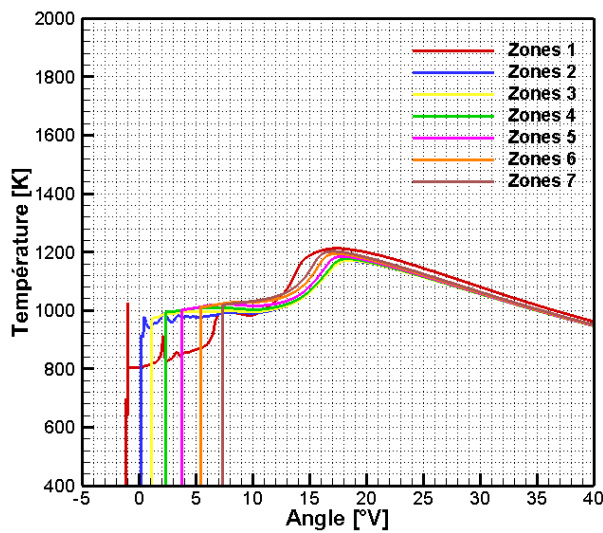


Figure 341 : Températures dans les zones (7 Zones)

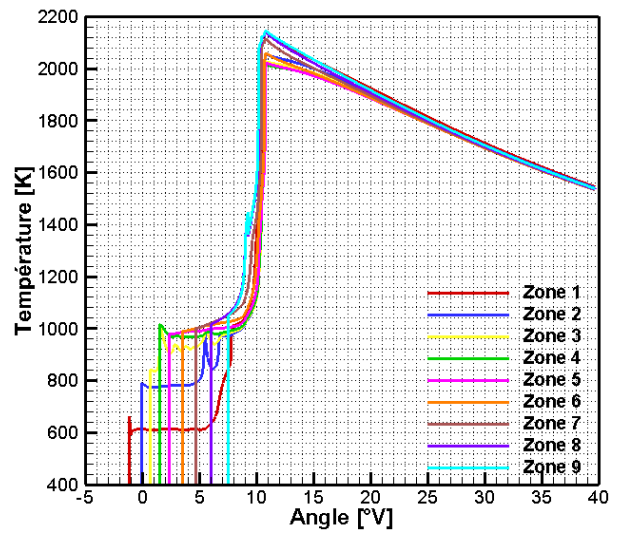


Figure 342 : Températures dans les zones (9 Zones)

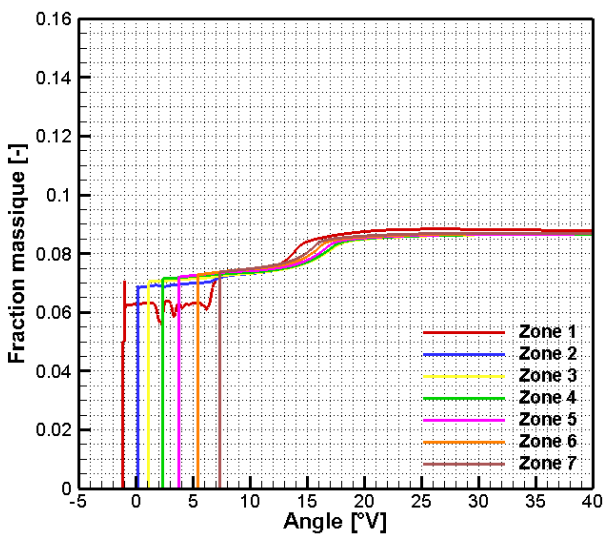


Figure 343 : Fractions massiques de CO₂ (7 Zones)

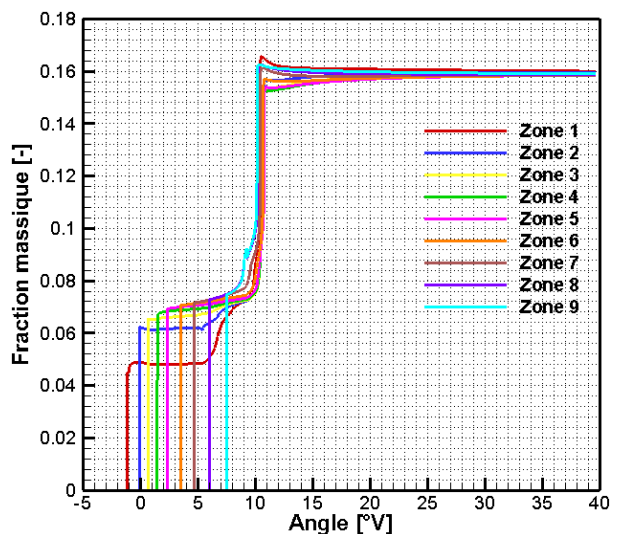


Figure 344 : Fractions massiques de CO₂ (9 Zones)

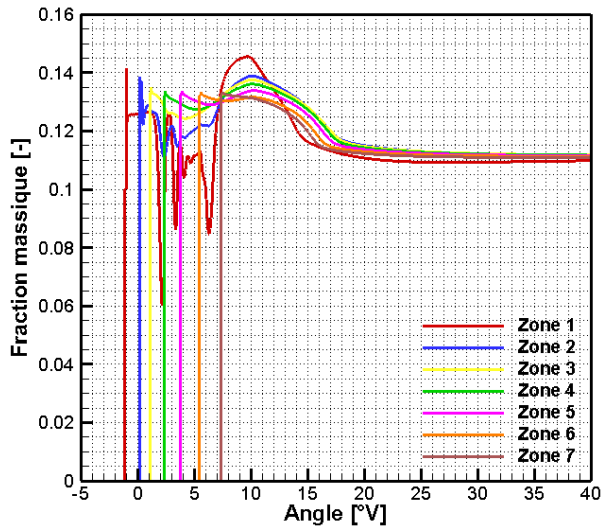


Figure 345 : Fractions massiques d'O₂ (7 Zones)

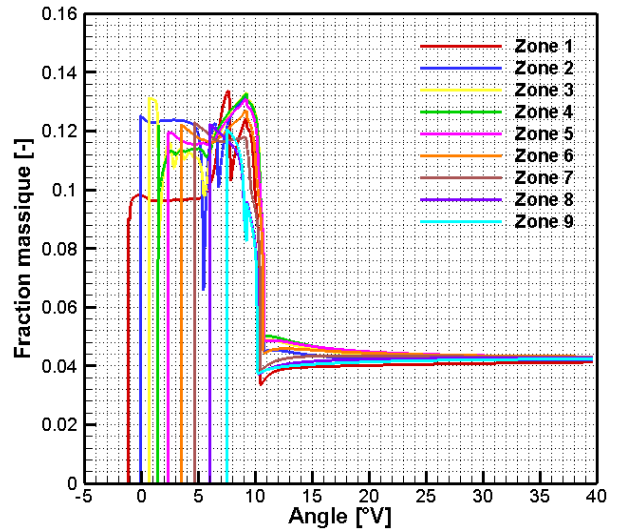


Figure 346 : Fractions massiques d'O₂ (9 Zones)

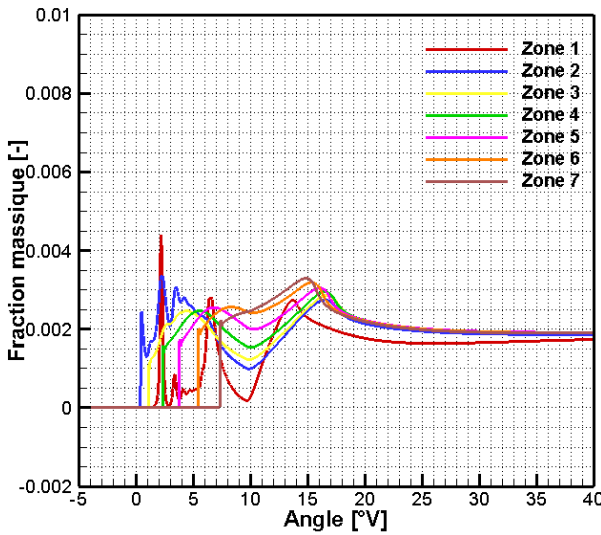


Figure 347 : Fractions massiques de C₃H₆ (7 Zones)

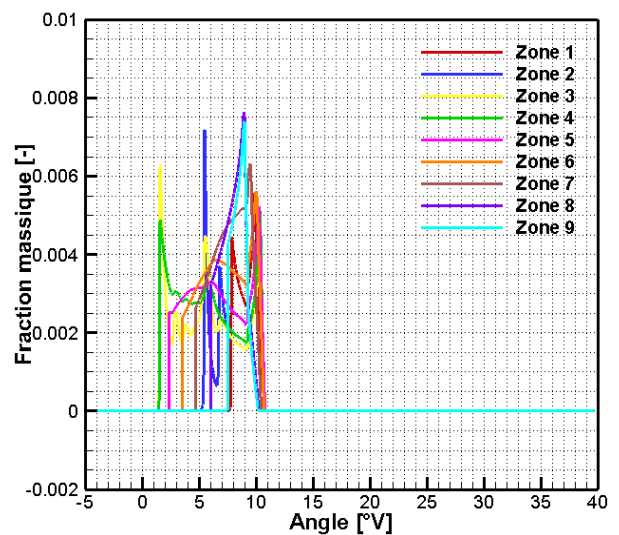


Figure 348 : Fractions massiques de C₃H₆ (9 Zones)

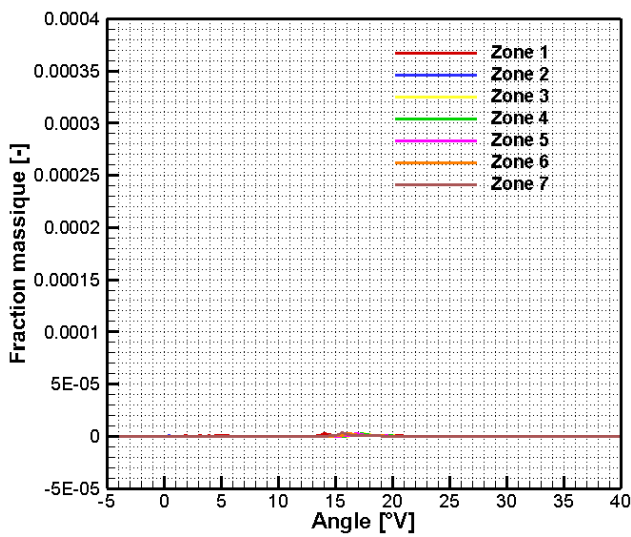


Figure 349 : Fractions massiques d'OH (7 Zones)

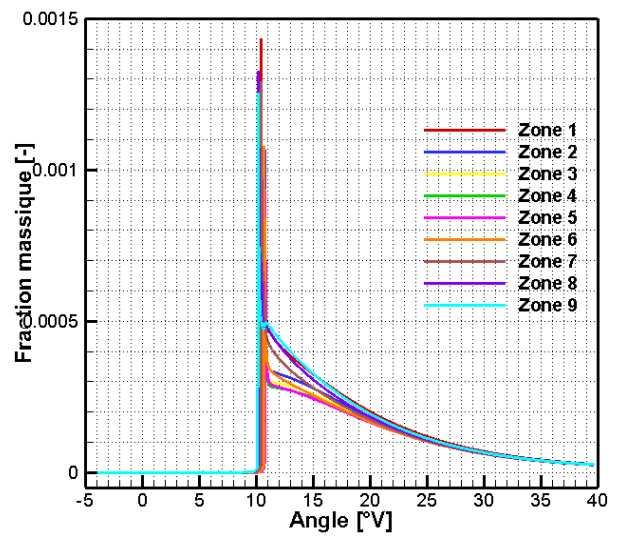


Figure 350 : Fractions massiques d'OH (9 Zones)

Références bibliographiques

- [1] **Heywood J.B.** *Internal Combustion Engine Fundamentals*. McGraw-Hill Book Company, 1988.
- [2] **Arcoumanis C., Kamimoto T.** *Flow and Combustion in Reciprocating Engines*. DOI: 10.1007/978-3-540-68901-06, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008.
- [3] **Tap F.** *Modélisation de l'auto inflammation et de la combustion dans les moteurs à injection directe Diesel*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 2004.
- [4] **Khair M. K., Jääskeläinen H.** *Combustion in Diesel Engines*. DieselNet Technology Guide Revision, 2010
- [5] **Kobori S., Kamimoto T., Aradi A. A.** *A study of ignition delay of Diesel fuel sprays*. Int. J. Engine Res., vol. 1, no. 1, pp 29–39, 2000.
- [6] **Merker G.P., Schwarz C., Stiesch G., Otto F.** *Simulating Combustion: Simulation of combustion and pollutant formation for engine development*. Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K, 2005.
- [7] **Reitz R. D., Diwakar R.** *Effect of Drop Breakup on Fuel Sprays*. SAE paper 860469, 1986.
- [8] **Wong C. L., Steere D. E.** *The Effects of Diesel Fuel Properties and Engine Operating Conditions on Ignition Delay*. SAE paper 821231, 1982.
- [9] **Maiboom A., Tauzia X., Hétet J.F., Cormerais M., Tounsi M., Jaine T., Blanchin S.** *Various Effects of EGR on Combustion and Emissions on an Automotive DI Diesel Engine: Numerical and Experimental Study*. SAE technical paper 2007-01-1834, 2007.
- [10] **Hiroyasu H., Kadota T., Arai M.** *Supplementary Comments: Fuel Spray Characterization in Diesel Engines*. Combustion Modeling in Reciprocating Engines, pp. 369-408, Plenum Press, 1980.
- [11] **Tonini, S. et al.** *The role of droplet fragmentation in high-pressure evaporating Diesel sprays*. International Journal of Thermal Sciences, 2008.
- [12] **Hiroyasu H., Arai M.** *Structures of fuel sprays in Diesel engines*. SAE Paper 900475, 1990.
- [13] **Naber J., Siebers D. L.** *Effects of gas density and vaporisation on penetration and dispersion of Diesel sprays*. SAE Paper 960034, 1996.
- [14] **Dos Santos F., Le Moyne L.,** *Spray Atomization Models in Engine Applications, from Correlations to Direct Numerical Simulations*. F. Oil Gas Sci. Technol. – Rev. IFP Energies nouvelles 66 (5) 801-822, 2011.
- [15] **Desantes J. M., Payri R., Salvador F. J., Soare V.** *Study of the influence of geometrical and injection parameters on Diesel sprays characteristics in isothermal condition*. SAE Paper 2005-01-0913, 2005.
- [16] **Payri F., Bermudez V., Payri R., Salvador F. J.** *The influence of cavitation on the internal flow and the Spray characteristics in Diesel injection nozzles*. Fuel 83:419–31, 2004.
- [17] **Desantes J. M., Payri R., Salvador F. J., Gimeno J.** *Measurements of spray momentum for the study of cavitation in Diesel injection nozzles*. SAE Paper 2003-01-0703, 2003.
- [18] **Payri R., Garcia J. M., Salvador F. J., Gimeno J.** *Using spray momentum flux measurements to understand the influence of Diesel nozzle geometry on spray characteristics*. Fuel 84:551–61, 2005.
- [19] **Desantes J. M., Payri R., García J. M., Salvador F.J.** *A contribution to the understanding of isothermal Diesel spray dynamics*. Fuel. 2007.
- [20] **Lefebvre A.H.** *Atomisation and Sprays*. Hemisphere Publishing Corporation, New York, 1989.
- [21] **Musculus M., Lachaux T., Pickett L. M., Idicheria C. A.** *End-of-Injection Over-mixing and Unburned Hydrocarbon Emissions in Low-Temperature-Combustion Diesel Engines*. SAE paper no. 2007-01-0907, 2007.
- [22] **Musculus M., Kattke K.** *Entrainment Waves in Diesel Jets*. SAE paper no. 2009-01-1355, 2009.
- [23] **Pastor J. V., Lopez, J. J., Garcia J. M., Pastor J. M.** *A 1D Model for the Description of mixing-controlled Inert Diesel Sprays*, Fuel, 87, no. 13-14, pp.2871-2885, 2008.

- [24] **Mollenhauer K., Tschoeke H.** *Handbook of Diesel Engines*. DOI 10.1007/978-3-540-89083-6, 2010.
- [25] **Merker G. P., Schwarz C., Teichmann R.** *Combustion Engines Development: Mixture Formation, Combustion, Emissions and Simulation*. ISBN: 978-3-642-02951-6, 2012.
- [26] **Hamid Md. A.,** *Fuel injection System*. Guide Book for Marine engineers, <http://www.marineengineering.org.uk/>
- [27] **Dec J. E.** *A conceptual model of DI combustion based on Laser-sheet Imaging*. SAE paper no.970873, 1997
- [28] **Chiu, W. S., Shahed, S. M., Lyn, W. T.** *A transient spray mixing model for Diesel combustion*. SAE Transaction, Vol. 85, pp.502-512, paper no.740948, 1974
- [29] **Kosaka H., Nishigaki T., Kamimoto T., Harada S.** *A Study on Soot Formation and Oxidation in an Unsteady Spray Flame via Laser-Induced Incandescence and Scattering Techniques*. SAE Transactions, Vol.104, Section 4, No. 952451, 1995
- [30] **Flynn P. F., Durrett R. P., Hunter G. L., Loye A. O., Akinyemi O. C., Dec J.E., Westbrook C. K.** *Diesel Combustion: An Integrated View Combining Laser Diagnostics, Chemical Kinetics, And Empirical Validation*. SAE paper no. 1999-01-0509, pp. 1-17, 1999
- [31] **Espey C., Dec J. E., Litzinger T. A.** *Quantitative 2-D Fuel Vapor Concentration Imaging in a Firing D.I. Diesel Engine Using Planar Laser-Induced Rayleigh Scattering*. SAE paper no. 940682, pp. 1145-1160, 1994
- [32] **Espey C., Dec J. E., Litzinger T. A. Santavicca D.A.** *Planar Laser Rayleigh Scattering for Quantitative Vapor-Fuel Imaging in a Diesel Jet*. Combustion and Flame, Vol. 109, pp. 65-86, 1997
- [33] **Bunker B.** *EPA 2007 Clean Diesel Program*. International Symposium of the Vehicle emission Regulations, 2004
- [34] *Le Diesel propre : une réalité pour PSA Peugeot Citroën*. Dossier de presse, 2012.
- [35] *Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Technology*. A Report to the U.S. Congress, April 2001.
- [36] **Dronniou N.** *Etude théorique et expérimentale des stratégies de combustion homogène*. Thèse de Doctorat, l'Université d'Orléans, 2008.
- [37] **Zhao F, Thomas W. A., Assanis D. N., Dec J. E., Eng J. A., Najt P. M.** *Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engines: Key Research and Development Issues*. Warrendale, PA, USA: Society of Automotive Engineers. pp. 11–12. ISBN 076801123X. 2003.
- [38] **Jürgen W., Maas U., Dibble R. W.** *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation (4th Edition ed.)*. Berlin, Germany: Springer. ISBN 3-540-25992-9. 2006.
- [39] **Dec, J. E., Kathy E., Salvador M. A., Richard L. B.** *The Potential of HCCI Combustion for High Efficiency and Low Emissions*. Society of Automotive Engineers. SAE paper no. 2002-01-1923, 2002.
- [40] **Baumgarten Carsten.** *Mixture Formation in Internal Combustion Engines: Mixture Formation in Internal Combustion Engines*. Birkhäuser. pp. 263–264. ISBN 3540308350, 2006.
- [41] **Rolf J., Blom D., Karlsson M., Ekholm K., Tunestal P.** *HCCI Engine Modeling and Control using Conservation Principles*. Society of Automotive Engineers. SAE paper no. 2008-01-0789, 2008.
- [42] **Rudolf S.** *Homogeneous Charge Compression Ignition (Hcci): Benefits, Compromises, and Future Engine Applications*. Society of Automotive Engineers. SAE paper no.1999-01-3682, 1999.
- [43] **Salvador A. M., Flowers D. L., Espinosa-Loza F., Martinez-Frias J., Dec J. E., Sjöberg M., Dibble R. W., Hessel R. P.** *Spatial Analysis of Emissions Sources for Hcci Combustion At Low Loads Using a Multi-Zone Model*. Society of Automotive Engineers. SAE paper no.2004-01-1910. 2004.
- [44] **Sasaki S, Ito T, Iguchi S.** *Smoke-less Rich Combustion by Low Temperature Oxidation in Diesel Engines*. Proceedings of the 9th Aachener Kolloquium Fahrzeug-und Motorentechnik. Aachen, 2000.
- [45] **Aceves S., Flowers D.** *A Detailed Chemical Kinetic analysis of Low Temperature Non-Sooting Diesel Combustion*. SAE Paper no. 2005-01-0923, 2005.

- [46] **Zheng M., Mulenga M, Reader G, et al.** *BioDiesel Engine Performance and Emissions in Low Temperature Combustion*, Fuel. DOI : 10.1016/j. 2007.
- [47] **Akihama K., Takatori Y., Inagaki K., Sasaki S., Dean A. M.** *Mechanism of the Smokeless Rich Diesel Combustion by Reducing Temperature*. SAE technical paper 2001-01-0655, 2001.
- [48] **Khalilarya Sh., Jafarmadar S., Khatamnezhad H., Javadirad Gh., Pourfallah M.** *Simultaneously Reduction of NOx and Soot Emissions in a DI Heavy Duty Diesel Engine Operating at High Cooled EGR Rates*. International Journal of Aerospace and Mechanical Engineering 6:1, 2012.
- [49] **Shoji A.** *An Improvement of Diesel PM and NOx Reduction System*, 2007.
- [50] **Kimura S, Aoki S, Ogawa H, et al.** *New Combustion Concept for Ultra-Clean and High-Efficiency Small DI Diesel Engines*. SAE Paper 1999-01-3681, 1999.
- [51] **Kimura S, Aoki O, Kitahara Y, et al.** *Ultra-Clean Combustion Technology Combining a Low-Temperature and Premixed Combustion Concept for Meeting Future Emission Standards*. SAE Paper 2001-01-0200, 2001.
- [52] **Yanagihara H, Sato Y, Mizuta J, et al.** *A study of DI Diesel combustion under uniform higher dispersed mixture formation*. JSAE Review, 1997(18) :247-254, 1997.
- [53] **Yanagihara H.** *Simultaneous reduction of NOx, and soot in Diesel engines using a new mixture preparation method*. JSME International Journal, Series B, 1997,40 (4) :592-602, 1997.
- [54] **Hasegawa R, Yanagihara H.** *HCCI combustion in DI Diesel engine*. SAE Paper no. 2003-01-0745, 2003.
- [55] **Hasegawa R, Sakata I, Koyama T, et al.** *Numerical Analysis of Ignition Control in HCCI Engine*. SAE Paper no. 2003-01-1817, 2003.
- [56] **Fang T, Coverdill R, Lee C, et al.** *Combustion and Soot Visualization of Low Temperature Combustion within an HSDI Diesel Engine Using Multiple Injection Strategy*. SAE Paper no. 2006-01-0078, 2006.
- [57] **Iwabuchi Y, Kawai K, Shoji T, et al.** *Trial of New Concept Diesel Combustion System-Premixed Compression-Ignited Combustion*. SAE Paper no. 1999-01-0185, 1999
- [58] **Simescu S, Ryan T. W.** *Partial Pre-Mixed Combustion with Cooled and Uncooled EGR in a Heavy-Duty Diesel Engine*. SAE Paper no. 2002-01-0963, 2002.
- [59] **Inagaki K, Fuyuto T, Nishikawa K, et al.** *Combustion System with Premixture-controlled Compression Ignition*. R&D Review of Toyota CRDL,2006, 41 (3) :35-46, 2006.
- [60] **Kuzuyama, H., Machida, M., Kawae, T., Tanaka, T. et al.** *High Efficiency and Clean Diesel Combustion Concept using Double Premixed Combustion: D-SPIA*. SAE Technical Paper 2012-01-0906, 2012.
- [61] **Alriksson M, Denbratt I.** *Low Temperature Combustion in a Heavy Duty Diesel Engine Using High Levels of EGR*. SAE Paper no. 2006-01-0075, 2006
- [62] **Musculus M.** *Multiple Simultaneous Optical Diagnostic Imaging of Early-Injection Low-Temperature Combustion in a Heavy-Duty Diesel Engine*. SAE Paper no. 2006-01-0079, 2006.
- [63] **Kook S, Bae C, Miles P, et al.** *The Influence of Charge dilution and Injection Timing on Low-Temperature Diesel Combustion and Emissions*. SAE Paper no. 2005-01-3837, 2005.
- [64] **Choi D, Miles P.** *A Parametric Study of Low-Temperature, Late-Injection Combustion in a HSDI Diesel Engine*. JSME International Journal, Series B, 2005,48(4):656-664, 2005.
- [65] **Noehre C, Andersson M, Johansson B, et al.** *Characterization of Partially Premixed Combustion*. SAE Paper no. 2006-01-3412, 2006.
- [66] **Yun H, Reitz R.** *Combustion optimization in the low temperature Diesel combustion regime*. International Journal of Engine Research, 2005(6) .513-524, 2005.
- [67] **Kong S, Reitz R.** *Use of Detailed Chemical Kinetics to Study HCCI Engine Combustion With Consideration of Turbulent Mixing Effects*. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2002.
- [68] **Kong S, Ra Y.** *Performance of multi-dimensional models for simulating Diesel premixed charge compression ignition engine combustion using low-and high- pressure injectors*. International Journal of Engine Research, 6(5), 2005.

- [69] **Singh S, Reitz R.** *Validation of engine combustion models against detailed in-cylinder optical diagnostics data for a heavy-duty compression-ignition engine.* International Journal of Engine Research, 2007(8) : 97-126, 2007.
- [70] **Pickett L. M., Siebers D. L.** *Non-Sooting, Low Flame Temperature Mixing-Controlled DI Diesel Combustion.* SAE paper no. 2004-01-1399, 2004.
- [71] **Siebers D. L., Pickett L. M.** *Aspects of Soot Formation in Diesel Fuel Jets.* THIESEL 2004 Conference - Valencia (Spain), 2004.
- [72] **Pickett L. M., Siebers D. L.** *Fuel Effects on Soot Processes of Fuel Jets At Di Diesel Conditions.* SAE paper no. 2003-01-3080, 2003.
- [73] **Pickett L. M., Siebers D. L., Ichideria C. A.** *Relationship Between Ignition Processes and the Lift-Off Length of Diesel Fuel Jets.* SAE paper no. 2005-01-3843, 2005.
- [74] **Pickett L. M.** *Low flame temperature limits for mixing-controlled Diesel combustion.* Proceedings of the Combustion Institute, 30, 2005.
- [75] **Musculus M., Pickett L., Miles P., Dec J., Oefelein J.** *A Conceptual Model for Partially Premixed Low-Temperature Diesel Combustion Based on In-Cylinder Laser Diagnostics and Chemical Kinetics Modeling,* Deer Conference 2012
- [76] **Musculus M., Miles P., Pickett L.** *Conceptual Model for Partially Premixed Low-Temperature Diesel Combustion,* Progress in energy and combustion science, Vol. 39, 2013
- [77] **Kumar S., Chauhan M. K., Varun.** *Numerical modeling of compression ignition engine: A review.* Renewable and Sustainable Energy Reviews, Volume 19, March 2013, Pages 517–530, 2013.
- [78] **Saeedi M.** *A Mean Value Internal Combustion Engine Model in MapleSim.* Master thesis of the University of Waterloo, Canada, 2010.
- [79] **Vibe I.** *Brennverlauf und kreisprozess von verbrennungsmotoren (Combustion and circular process of internal combustion engines).* VEB Verlag Technik, 1970.
- [80] **Jaïne T.** *Simulation zéro dimensionnelle de la combustion dans un moteur Diesel à injection directe.* Thèse de Doctorat, université d'Orléans, 2004.
- [81] **Gaudart L.** *Incidence des configurations de fonctionnement de navires militaires sur la suralimentation à deux étages de leurs moteurs Diesel de propulsion PA6 – BTC.* Thèse de Doctorat, ENSM, 1987.
- [82] **Whitehouse N. D., Way R.** *A Simple Method for the Calculation of Heat Release Rates in Diesel Engines Based on the Fuel Injection Rate.* SAE paper no. 710134, pp. 1-11, 1971.
- [83] **Arsie I., Di Genova F., Pianese C., Sorrentino M., Rizzo G., Caraceni A., Cioffi P., Flauti G.** *Development and Identification of Phenomenological Models for Combustion and Emissions of Common-Rail Multi-Jet Diesel Engines.* SAE paper no. 2004-01-1877, pp. 37-47, 2004.
- [84] **Tauzia X., Maiboom A., Chesse P., Thouvenel N.** *A new phenomenological heat release model for thermodynamical simulation of modern turbocharged heavy duty Diesel engines.* Applied Thermal Engineering, Vol. 26, pp. 1851-1857, 2006.
- [85] **Chmela F. G., Orthaber G. C.** *Rate of Heat Release Prediction for Direct Injection Diesel Engines Based on Purely Mixing Controlled Combustion.* SAE paper no. 1999-01-0186, 1999.
- [86] **Chemla F. et al.** *Prediction of Turbulence Controlled Combustion in Diesel Engines.* THIESEL Conference on Thermo- and Fluid Dynamic Processes in Diesel Engines, 2004
- [87] **Pirker G., Chmela F., Wimmer A.** *ROHR Simulation for DI Diesel Engines Based on Sequential Combustion Mechanisms.* SAE paper no. 2006-01-0654, 2006.
- [88] **Barba C., Burkhardt C., Boulouchos K., Bargende M.** *A Phenomenological Combustion Model for Heat Release Rate Prediction in High-Speed DI Diesel Engines with Common-Rail Injection.* SAE paper no. 2000-01-2933, 2000.
- [89] **Maiboom A.** *Etude expérimentale et modélisation phénoménologique de l'influence des caractéristiques thermodynamiques et de la composition des gaz d'admission sur la combustion et les émissions d'un moteur Diesel automobile.* Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Nantes (France), 2007.
- [90] **Hegarty, K., Favrot, R., Rollett, D., Rindone, G.** *Semi-Empiric Model Based Approach for Dynamic Prediction of NOx Engine Out Emissions on Diesel Engines.* SAE Technical Paper 2010-01-0155, 2010.

- [91] **Heider G., Zeilinger K., Woschni G.** *Two-Zone Calculation Model for the Prediction of NO Emissions from Diesel Engines*. CIMAC (Interlaken), pp. 1-17, 1995.
- [92] **Ishida M., Ueki H., Matsumura N., Yamaguchi M., Luo G. F.** *Diesel Combustion Analysis Based on Two-Zone Model (Comparison between Model Analysis and Experiment)*. JSME International Journal, Vol. 39, no.1, pp. 185-192, 1996.
- [93] **Rakopoulos C.D, Rakopoulos D.C, Giakoumis E.G., Kyritsis D.C.** *Validation and sensitivity analysis of a two zone Diesel engine model for combustion and emissions prediction*. Energy Conversion and Management 45 (2004) 1471–1495, 2004.
- [94] **Ericson, C., Westerberg, B., Andersson, M., Egnell, R.** *Modelling Diesel Engine Combustion and NOx Formation for Model Based Control and Simulation of Engine and Exhaust Aftertreatment Systems*. SAE Technical Paper 2006-01-0687, 2006.
- [95] **Kamimoto T., Minagawa T., Kobori S.** *A Two-Zone Model Analysis of Heat Release Rate in Diesel Engines*. SAE paper no. 972959, 1997.
- [96] **Finesso, R., Spessa, E.** *Real-Time Predictive Modeling of Combustion and NOx Formation in Diesel Engines Under Transient Conditions*. SAE Technical Paper 2012-01-0899, 2012.
- [97] **Chen, C., Bardsley, M., Johns, R.** *Two-Zone Flamelet Combustion Model*. SAE Technical Paper 2000-01-2810, 2000.
- [98] **Li X., Wallace J.S.** *A phenomenological model for soot formation and oxidation in direct-injection Diesel engines*. SAE paper no. 952428, 1995.
- [99] **Baratta M., Catania A. E., Ferrari A., Finesso R., Spessa E.** *Premixed-Diffusive Multizone Model for Combustion Diagnostics in Conventional and PCCI Diesel Engines*. J. Eng. Gas Turbines Power, October 2011.
- [100] **Lutz A. E., Kee R. J., Miller J. A.** *SENKIN: a FORTRAN program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis*. Sandia National Laboratories. Livermore, CA 94551-0969, 1988.
- [101] **Rajkumar S, Mehta P. S., Bakshi S.** *Phenomenological modeling of combustion and emissions for multiple-injection common rail direct injection engines*. International Journal of Engine Research, August vol. 13, 2012.
- [102] **Magnussen B.F., Hjertager B.H.** *On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion*. Symposium (International) on Combustion, pp 719-729, 1977.
- [103] **Arsie I., Di Genova F., Pianese C., Rizzo G. et al.** *Thermodynamic Modeling of Jet Formation and Combustion in Common Rail Multi-Jet Diesel Engines*," SAE Technical Paper 2005-01-1121, 2005.
- [104] **Ahmed A., Murat M.** *Modélisation thermodynamique de la loi de dégagement de chaleur des moteurs Diesel fortement suralimentés*. Entropie n°105, pp. 22-29, 1982.
- [105] **Yoshikawa S., Ogawa M., Inaba H., Fujita Y., Imamori T., Yasuma G.** *The Development of Low NOx Emission Diesel Engine*. CIMAC (Interlaken), pp.1-18, 1995.
- [106] **Abd Alla G., Soliman H., Badr O., Abd Rabbo, M.** *Using of Quasi-Two Zone Combustion Model to Predict the Performance of a Dual Fuel Engine*. SAE Technical Paper 2000-01-2936, 2000.
- [107] **Maiboom A., Tauzia X., Shah S. R., Hétet J. F.** *A new phenomenological six-zone combustion model for direct injection Diesel engines*. Energy and Fuels Volume 23(2), pp. 690-703, 2009.
- [108] **Maiboom A., Tauzia X., Hétet J. F., Cormerais M.** *A 5 zones phenomenological combustion model for DI Diesel Engine for a wide range of operating conditions*. Conférence FISITA 2006, Yokohama (Japon), 2006.
- [109] **Siebers D.L.** *Scaling Liquid-Phase Fuel Penetration in Diesel Sprays Based on Mixing-Limited Vaporization*. SAE paper no. 1999-01-0528, pp. 703-728, 1999.
- [110] **Xue X., Caton J. A.** *A Detailed Multi-Zone Thermodynamic Simulation for the Direct-Injection Diesel Engine Combustion*. International Journal of Engine Research, vol. 13, pp. 340–356, August 2012.
- [111] **Kuleshov A.** *Model for predicting air-fuel mixing, combustion and emissions in DI Diesel engines over whole operating range*. SAE Technical Paper 2005-01-2119, 2005.
- [112] **Kuleshov A.** *Use of Multi-Zone DI Diesel Spray Combustion Model for Simulation and Optimization of Performance and Emissions of Engines with Multiple Injection*. SAE Technical Paper 2006-01-1385, 2006.

- [113] **Hiroyasu H.** *Development and use of a spray combustion modelling to predict Diesel engine efficiency and pollutants emissions.* Bulletin of the JSME Vol.26, No. 214, April 1983.
- [114] **Dan T.** *The Turbulent Mechanism and Structure of Diesel Spray.* Ph. D. Thesis, Toshiya University, 1996.
- [115] **Jung D., Assanis D. N.** *Multi-zone DI Diesel Spray Combustion Model for Cycle Simulation Studies of Engine Performance and Emissions.* SAE paper no. 2001-01-1246, 2001.
- [116] **Reitz R. D., Bracco F. B.** *On the Dependence of Spray Angle and Other Spray Parameters on Nozzle Design and Operating Conditions.* SAE paper no. 790494, 1979.
- [117] **Sayem Abu S. M.** *Study on Simple and High-Speed Diesel Combustion Model of Premixed Compression Ignition Engines for Driving Mode.* 2010.
- [118] **Tsurushima T.** *A new skeletal PRF kinetic model for HCCI combustion.* Proceedings of the Combustion Institute 32 (2009) 2835–2841, 2009.
- [119] **Kazushige K. et al.** *High-Speed Diesel Combustion Model for Transient Simulation of After-Treatment Systems.* The Seventh International Conference on Modeling and Diagnostics for Advanced Engine Systems (COMODIA 2008), pp.695-702 July 28-31, 2008, Sapporo, Japan
- [120] **Jung D., Assanis D.N.** *Quasidimensional Modeling of Direct Injection Diesel Engine Nitric Oxide, Soot, and Unburned Hydrocarbon Emissions.* Journal of engineering for gas turbines and power, vol. 128, no.2, pp. 388-396, 2006.
- [121] **Cerri T., Onorati A., Mattarelli E.** *1D Engine Simulation of a Small HSDI Diesel Engine Applying a Predictive Combustion Model.* J. Eng. Gas Turbines Power, Vol. 130, 2008.
- [122] **Timoney, D. J., McNally, C. P., Doyle, C. T.** *A Three-Zone Heat Release Model Injection Diesel Engines.* THIESEL Conference, Valencia (Spain), 2000.
- [123] **Yoshizaki T., Nishida K., Hiroyasu H.** *Approach to Low NO_x and Smoke Emission Engines by Using Phenomenological Simulation.* SAE Paper No. 930612, 1993.
- [124] **Erickson W. D., Probst R. K.** *Rapid Computation of Chemical Equilibrium Composition: An Application to Hydrocarbon Combustion.* AIChE J., pp. 1079-1087, 1986.
- [125] **D’Errico G., Ferrari G., Onorati A., Cerri T.** *Modeling the Pollutant Emissions From a S.I. Engine,* SAE Paper No. 2002-01-0006, 2002.
- [126] **Hiroyasu H., Kadota T.** *Models for Combustion and Formation of Nitric Oxide and Soot in Direct Injection Diesel Engines,* SAE Paper No.760129, 1976.
- [127] **Perini F., Mattarelli E., Paltrinieri F.** *Development and Validation of Predictive Emissions Schemes for Quasi-Dimensional Combustion Models.* SAE Technical Paper 2010-01-0148, 2010.
- [128] **Perini F., Mattarelli E.** *Development and calibration of an enhanced quasi-dimensional combustion model for HSDI Diesel engines.* International Journal of Engine Research, vol. 12, 4: pp. 311-335, August 2011.
- [129] **Zhou P., Zhou S., Clelland D.** *A modified quasi-dimensional multi-zone combustion model for direct injection Diesels.* International Journal of Engine Research, vol. 7, 4: pp. 335-345 August 1, 2006.
- [130] **Andersson M., Johansson B., Hultqvist A., Noehre C.** *A Predictive Real Time NO_x Model for Conventional and Partially Premixed Diesel Combustion.* SAE Technical Paper 2006-01-3329, 2006.
- [131] **Seykens X., Baert R., Somers L., Willems F.** *Experimental Validation of Extended NO and Soot Model for Advanced HD Diesel Engine Combustion.* SAE Int. J. Engines 2(1):606-619, 2009.
- [132] **Poetsch C., Ofner H., Cartellieri W.** *Analysis of Thermodynamic Characteristics of Diesel Engine Emission Control Strategies Using a Multi-Zone Combustion Model.* SAE Int. J. Engines 5(3):1498-1523, 2012.
- [133] **Bordet N.** *Modélisation 0D/1D de la Combustion Diesel : du Mode Conventionnel au Mode Homogène.* Thèse de doctorant, Université d’Orléans, 2008.
- [134] **Sazhin.** *Modelling of heating, evaporation and ignition of fuel droplets: combined analytical, asymptotic and numerical analysis.* Journal of Physics: Conference Series 22 (2005) 174–193, 2005.
- [135] **Desantes J. M., Pastor J.V., García-Oliver J.M., Pastor J.M.** *A 1D Model for the description of mixing-controlled reacting Diesel sprays.* Combustion and Flames 156 (2009) pp.234-249, 2009.

- [136] **Pastor J. V., Encabo E, Ruíz S.** *New modelling approach for fast online calculations in sprays*, SAE Paper 2000-01-0287, 2000.
- [137] **Pires da Cruz A., Baritaud T.A., Poinot T.J.** *Self-ignition and combustion modeling of initially nonpremixed turbulent systems*. *Combustion and Flame* 124 (2001) 65–81, 2001.
- [138] **Bruneaux G.** *Mixing Process in High Pressure Diesel Jets by Normalized Laser Induced Exiplex Fluorescence. Part II: Wall Impinging Versus Free Jet*. SAE Technical Paper 2005-01-2097, 2005.
- [139] **Li Z., Kokkolaras M., Jung D., Papalambros P. et al.** *An Optimization Study of Manufacturing Variation Effects on Diesel Injector Design with Emphasis on Emissions*. SAE Technical Paper 2004-01-1560, 2004.
- [140] **Finesso R., Spessa E.** *Analysis of Combustion and Emissions in a EURO V Diesel Engine by Means of a Refined Quasi-Dimensional Multizone Diagnostic Model*. *SAE Int. J. Engines* 5(3):886-908, 2012.
- [141] **Kraft M., Maigaard P., Mauss F., Christensen M., Johansson B.** *Investigation of combustion emissions in a homogeneous charge compression injection engine: Measurements and a new computational model*. *Proceedings of the Combustion Institute, Volume 28, Issue 1, 2000*<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0082078400803306> - aff3
- [142] **Coble A., Smallbone A., Bhave A., Mosbach S. et al.** *Implementing Detailed Chemistry and In-Cylinder Stratification into 0/1-D IC Engine Cycle Simulation Tools*. SAE Technical Paper 2011-01-0849, 2011.
- [143] **Smallbone A., Bhave A., Coble A., Mosbach S. et al.** *Simulating PM Emissions and Combustion Stability in Gasoline/Diesel Fuelled Engines*. SAE Technical Paper 2011-01-1184, 2011.
- [144] **Smallbone A., Bhave A., Coble A., Mosbach S. et al.** *Identifying Optimal Operating Points in Terms of Engineering Constraints and Regulated Emissions in Modern Diesel Engines*. SAE Technical Paper 2011-01-1388, 2011.
- [145] **Mauviot G., Albrecht A., Poinot T.** *A New 0D Approach for Diesel Combustion Modelling Coupling Probability Density Function with Complex Chemistry*. SAE technical paper 2006-01-3332, 2006.
- [146] **Mauviot G.** *Développement d'une modélisation phénoménologique de chambres de combustion de moteurs à piston par réduction de modèle physique 3D dans la perspective d'une intégration dans un outil de simulation système*. Thèse de doctorat, Université Paris VI (France), 2007.
- [147] **Ribert G., Gicquel O., Darabiha N.** *Flame Prolongation of ILDM kinetics reduction technique applied to kerosene reaction mechanism*, Laboratoire Energétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion (EM2C), 2003.
- [148] **Bordet N., Caillol C., Higelin P.** *A Physical 0D Diesel Combustion Model Using Tabulated Chemistry with Presumed Probability Density Function Approach: For engine pre-Mapping*. FISITA2010-SC-O-26, 2010.
- [149] **Inagaki K., Ueda M., Mizuta J., Nakakita K. et al.** *Universal Diesel Engine Simulator (UniDES): 1st Report: Phenomenological Multi-Zone PDF Model for Predicting the Transient Behavior of Diesel Engine Combustion*. SAE Technical Paper 2008-01-0843, 2008.
- [150] **Kong, S., Han, Z., Reitz, R.** *The Development and Application of a Diesel Ignition and Combustion Model for Multidimensional Engine Simulation*. SAE Technical Paper 950278, 1995.
- [151] **Kwon J., Seo J., Lee D., Huh K.** *Zero-Dimensional Simulation of Diesel Engine Combustion and Emissions Based on CMC Model and Skeletal Reaction Mechanism*. *SAE Int. J. Engines* 4(1):964-975, 2011.
- [152] **Klimenko A.Y., Bilger R.W.** *Conditional moment closure for turbulent combustion*. *Energy and Combustion Science*, Volume 25, Issue 6, Pages 595-687, 1999.
- [153] **Dulbecco A., Lafossas F. A., Poinot T. J.** *A 0D Phenomenological Approach to Model Diesel HCCI Combustion with Multi-Injection Strategies Using Probability Density Functions and Detailed Tabulated Chemistry*. *SAE International Journal of Engines*, vol. 2 no. 1 548-568, October 2009.
- [154] **Bernard, G., Lebas, R., Demoulin, F.,** *A 0D Phenomenological Model Using Detailed Tabulated Chemistry Methods to Predict Diesel Combustion Heat Release and Pollutant Emissions* SAE Technical Paper 2011-01-0847, 2011
- [155] **Hays N., Jones P. L.** *Comparison of the Various Correlations for Spray Penetration*. SAE Paper No. 720776, 1972.
- [156] **Desantes J. M., Arrègle J., López J. J., Cronhjort A.** *Scaling Laws for Free Turbulent Gas Jets and Diesel-Like Sprays*. *Atomization and Sprays*, vol.16, pp.443-473, 2006.

- [157] **Petersen U., MacGregor S. A.** *Jet mixing in a model direct injection Diesel engine with swirl.* J Mech Eng Sci 1996;210:69–78, 1996.
- [158] **Hinze J.O.** *Turbulence.* McGraw-Hill. ISBN 0-07-029037-7, 1975.
- [159] **Prasad C. M. V., Kar S.** *An investigation on the diffusion of momentum and mass of fuel in a Diesel fuel spray.* ASME J Eng Power 1976:1–11. 76-DGP-1.
- [160] **Gasnot L.** *Flammes Plates Laminaires et Pré-mélangées : Codes de Calcul CHEMKIN II / Pré-mix,* Septième Ecole de Combustion, 2000.
- [161] **Battin-Leclerc F.** *Detailed chemical kinetic models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and Diesel fuel surrogates.* Energy and Combustion Science 34, pp. 440–498, 2008.
- [162] **Simmie J. M.** *Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbon fuels.* Energy and Combustion Science 29, pp. 599–634, 2003.
- [163] **Baulch D. L., Cobos C. J., Cox R. A., Frank P., Hayman G., Just Th., Kerr J. A., Murrells T., Pilling M. J., Troe J., Walker R. W., Warnatz J.** *Evaluated Kinetic Data for Combustion Modelling: Supplement I.* Journal of Physical and Chemical Reference Data 23(6) pp. 847-1033, 1994.
- [164] **Baulch D. L., Bowman C. T., Cobos C. J., Cox R. A., Just Th., Kerr J. A., Pilling M. J., Stocker D., Troe J., Tsang W., Walker R. W., Warnatz J.** *Evaluated Kinetic Data for Combustion Modeling: Supplement II.* Journal of Physical and Chemical Reference Data 34(3) pp. 757-1397, 2005.
- [165] **NIST (National Institute of Standard and Technology).** *Chemical Kinetics Database.* Journal of Physical and Chemical Reference Data, 21(3), 1992.
- [166] *JANAF, Thermochemical tables,* National Standard Reference Data Service, NSRDS-NBS 37, 1971.
- [167] **Kee R.J., Rupley F.M., Miller J.A.** *The Chemkin Thermodynamic Data Base.* SANDIA National Laboratories Report, SAND87-8215, UC-4, (1987), Reprinted October 1992
- [168] **Kee R.J., Rupley F.M., Miller J.A.** *Chemkin II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics.* SANDIA National Laboratories Report, SAND89-8009B, UC-706, (1989), Reprinted January 1993.
- [169] **Muller C., Warth V., Jacquemard E., Scacchi G., Côme G.M.** *THERGAS: a fortran computer code package for the evaluation of thermochemical data of molecules, free radicals and reactions in the gas phase, and A.S.T.M. CHETAH safety criteria.* DCPR, Nancy, 1996.
- [170] **Gordon S., McBride B.J.** *Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman-Jouguet Detonations.* NASA SP-273, 1971.
- [171] **Kee R.J., Dixon-Lewis G., Warnatz J., Coltrin M.E., Miller J.A.** *A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Multicomponent Transport Properties,* SANDIA National Laboratories Report, SAND86-8246, UC-401, (1986), Reprinted July 1992.
- [172] **Abramovich G.N.** *Chapter 5: Jet of an Incompressible Fluid in a Coflowing External Stream. The Theory of Turbulent Jets.* The MIT Press, Cambridge, MA, USA, 1963.
- [173] **Burcat A.** *Thermochemical Data for Combustion Calculations.* Combustion Chemistry, W.C. Gardiner, Ed., Springer-Verlag, New-York, 455., 1984.
- [174] *Data searching utility (Diesel spray)* <http://www.sandia.gov/ecn/index.php>
- [175] **Woschni G.** *A Universally Applicable Equation for the Instantaneous Heat Transfer Coefficient in the Internal Combustion Engine.* SAE technical paper 670931, 1967.
- [176] **Woschni G.** *Die Berechnung der Wandverluste und der Termischen Belastung der Bauteile von Dieselmotoren.* MTZ, 1970, 31 (12)
- [177] **Keenan J. H., Chao J., Kaye J.,** *Gas Table.,* 2ème edition, John Wiley, 2002.
- [178] **Farrell J., Cernansky N., Dryer F., Law C. et al.** *Development of an Experimental Database and Kinetic Models for Surrogate Diesel Fuels.* SAE Technical Paper 2007-01-0201, 2007.

Thèse de Doctorat

Guanqin MA

**Titre de thèse : Modélisation 1D de la combustion Diesel –
Application à un moteur automobile**

**Title of thesis : 1D Modeling of Diesel combustion with application to an
automotive engine**

Résumé

Dans le cadre de la réduction des émissions polluantes et de la consommation de carburant des moteurs à combustion interne, ces dernières années ont vu le développement de modes de combustion à allumage par compression partiellement prémélangés (LTC, PCCI,...) pour lesquels la cinétique chimique joue un rôle important. Dans ce contexte, le travail présenté dans ce mémoire vise à développer un modèle phénoménologique 1D multizone de combustion Diesel, basé sur un modèle de spray évolué et intégrant différents niveaux de description de la cinétique chimique.

L'étude bibliographique réalise un aperçu sur la physique de combustion Diesel et sa modélisation, où l'accent est mis sur les modèles phénoménologiques existants à ce jour.

Le modèle élaboré est basé sur la modélisation de spray 1D transitoire de Musculus et al., à laquelle de nombreux développements et améliorations sont apportés, pour passer d'un spray inerte en milieu infini à un spray vaporisant puis brûlant en milieu confiné. Plusieurs approches du calcul de taux de réaction sont envisagées, allant jusqu'à la résolution d'un mécanisme chimique détaillé avec CHEMKIN. Le modèle permet d'analyser l'évolution d'un spray Diesel pendant toute la durée du processus de combustion, de calculer non seulement les paramètres globaux comme la pénétration, l'angle de spray, le délai d'inflammation, la pression et le taux de dégagement de chaleur, mais aussi les paramètres locaux, comme la température et la composition de chaque zone.

Ce modèle est tout d'abord confronté à des résultats expérimentaux obtenus dans un réacteur à volume constant (base de données «Engine Combustion Network»). Il permet de retrouver qualitativement les différentes phases de la combustion (délai, combustion de pré mélange puis établissement d'une flamme de diffusion). L'influence des paramètres du modèle est analysée puis il est confronté à des résultats expérimentaux de sensibilité à la fraction d'O₂ et à la température ambiante.

Le modèle est ensuite utilisé pour simuler le déroulement de la combustion dans le cas d'un moteur Diesel automobile, avec une chambre à volume variable et des interactions spray / paroi. Là encore, l'influence des quelques paramètres du modèle est étudiée, puis les résultats sont comparés avec des données expérimentales dans de nombreuses configurations impliquant les principaux paramètres de réglage : injection simple ou utilisation d'une injection pilote, pression d'injection, pression de suralimentation, taux d'EGR...

Finalement, le modèle développé permet de retrouver des tendances qualitatives, avec un accord quantitatif plus ou moins correct selon les cas et un nombre de paramètres de réglage très restreint.

Mots clés

Modélisation phénoménologique, combustion Diesel, spray transitoire, cinétique chimique, délai d'inflammation, taux de dégagement de chaleur, étude de sensibilité, moteur

Abstract

Simultaneous reduction of pollutant emissions and fuel consumption of internal combustion engines could be achieved with partially premixed compression ignition combustion concepts, for which chemical kinetics are playing an increasingly important role. In this context, the objective of this work is to develop a one-dimensional phenomenological multi-zone model of diesel combustion. It is based on a sophisticated, recently developed spray model, coupled with various level of chemical kinetics description.

The bibliographic review gives an overview of Diesel combustion and its modeling, with a focus on existing phenomenological models.

The model developed here is based on 1D transient spray modeling from Musculus et al. which is significantly modified and improved in order to extend it from free inert sprays to vaporizing, reacting confined sprays. Several approaches are tested for reacting rate calculations, including detailed chemistry solved with CHEMKIN. The model describes the Diesel spray during the whole combustion process and predicts global parameters such as spray penetration, spray angle, ignition delay or heat release rate, as well as local parameters such as temperature or equivalence ratio in the various zones.

The model is firstly validated in the case of a constant volume reactor, against experimental data from "Engine Combustion Network" database. The model qualitatively captures the various combustion phases (ignition delay, transient premixed combustion, quasi-steady diffusive combustion). The influence of model parameters and their explanations are presented; then the effects of ambient O₂ fraction and initial temperature are also analyzed.

After that, the model is used to simulate combustion in an automotive Diesel engine, involving a variable volume combustion chamber and spray/wall interactions. Again, the influence of model parameters is checked, then model results are compared with experimental data for a wide range of engine configurations: with and without pilot injection, various injection pressure, boost pressure, EGR rate,...

Finally, the model agreement is qualitatively correct, with quantitative discrepancies more or less acceptable, while tuning parameters are very limited.

Key Words

Phenomenological modeling, Diesel combustion, transient spray, chemical kinetics, ignition delay, heat release rate, sensitivity analysis, engine