

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEURE
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

UNIVERSITE MENTOURI – CONSTANTINE

**FACULTE DES SCIENCES DE L'INGENIEUR
DEPARTEMENT DE GENIE MECANIQUE**

N° d'ordre :
Série :

MEMOIRE

Présenté en vue d'obtenir le diplôme de
MAGISTER en Génie Mécanique

Option : ENERGETIQUE

***ETUDE DU SPRAY LORS DES PHASES D'INJECTION ET DE
COMBUSTION DANS LA CHAMBRE DE COMBUSTION D'UN MOTEUR
DIESEL***

PAR

HADDAD FATIMA

Soutenu le :
Devant le jury :

Président	Mr M.KADJA	Professeur	Université de Constantine
Rapporteur	Mr S.BOUDEBOUS	M.C	Université de Constantine
Examineur	Mr Z. NEMOUCHI	Professeur	Université de Constantine
Examineur	Mr K.TALBI	M.C	Université de Constantine
Invité	Mr M.S.Boulahlib	C.C	Université de Constantine

Dédicace

A ma mère

A mon père

A toute ma famille

A tous ceux qui me sont chers

Remerciements :

Je remercie sincèrement **Mr Z. NEMOUCHI**, Professeur à l'Université Mentouri Constantine pour avoir dirigé ce travail avec une si grande rigueur scientifique sans égale, pour ses précieux conseils et pour ses encouragements qui m'ont permis d'avancer ce modeste travail.

Je tiens à exprimer mes vifs remerciements à **Mr M. S. BOULAHLIB** qui m'a aidé en matière de documentation.

Mes remerciements sont aussi adressés à **Mr S. BOUDEBOUS** Maître de Conférence à l'Université Mentouri Constantine qui m'a donné la chance de m'introduire dans cet axe de recherche en acceptant de m'encadrer.

Je remercie aussi **Mr M. KADJA**, Professeur et Directeur du Laboratoire de l'Energétique Appliquée et de pollution à l'Université Mentouri Constantine qui m'a fait l'honneur d'en assurer la présidence du jury.

J'exprime mes remerciements les plus sincères à **Mr K. TALBI** Maître de Conférence à l'Université Mentouri Constantine qui a accepté à participer à mon jury.

Enfin je remercie toute personne ayant pu, de près ou de loin, apporter une aide ou une contribution pour la réalisation de ce travail.

SOMMAIRE**Chapitre I****INTRODUCTION ET ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE**

I.1 Introduction.....	1
I.2 Etude bibliographique.....	2
I.3 Objectif du travail.....	4
I.4 Contenu du mémoire.....	4

Chapitre II**FORMULATION MATHEMATIQUE**

II.1 Introduction.....	5
II.2 Les équations régissantes.....	6
II.2.1 La phase gazeuse.....	6
II.2.1.1 Equations d'état.....	6
II.2.1.2 Equation de continuité pour l'espèce m.....	7
II.2.1.3 Equation de continuité pour le mélange.....	8
II.2.1.4 Equations de conservation de quantité de mouvement.....	8
II.2.1.5 Equation de conservation de l'énergie.....	9
II.2.1.6 Equation de transport de l'énergie cinétique turbulente.....	9
II.2.1.7 Equation de transport du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente.....	10
II.2.1.8 Réactions chimiques.....	11
II.2.1.9 Les réactions d'équilibre.....	13
II.2.1.10 Les réactions cinétiques.....	13
II.2.2 La phase liquide.....	15
II.2.2.1 Introduction.....	15

II.2.2.2 Equation d'évolution du spray.....	15
II.2.2.3 Evaporation de la goutte.....	20

Chapitre III

METHODE NUMERIQUE DE RESOLUTION

III.1 Introduction.....	23
III.2 Maillage et topologie.....	24
III.2.1 Cellule de base.....	24
III.2.2 Cellules auxiliaires.....	27
III.3 La phase lagrangienne (phase A et B).....	28
III.3.1 Phase A (explicite).....	28
III.3.1.1 Technique Stochastique de partidule (Méthode de résolution de l'équation de conservation de la phase liquide).....	30
III.3.1.1.1 Méthode de Monté Carlo.....	31
III.3.1.2 Choix du rayon des particules à l'injection.....	34
III.3.1.3 Calcul de dispersion turbulente de gouttelette.....	35
III.3.1.4 Calcul de l'oscillation et le fractionnement de la gouttelette.....	37
III.2.1.5 Calcul de la collision des gouttelettes.....	39
III.2.1.6 Calcul de l'évaporation de la gouttelette.....	42
III.3.2 Phase B (Implicite).....	43
III.3.3 Algorithme SIMPLE	51
III.4 Phase C (Explicite).....	52
III.5 Conditions aux limites.....	52
III.6 Organigramme de calcul du code KIVA-II.....	54

Chapitre IV

RESULTATS ET DISCUSSION

IV.1 Définition du problème.....	57
IV.2 Génération de Maillage.....	60
IV.3 Discussion des résultats.....	62
IV.3.1 La phase gazeuse.....	62
IV.3.1.1 Champ d'écoulement et les contours des isobares.....	63
IV.3.1.2 Les isothermes.....	63
IV.3.1.3 Les contours des fractions massiques du combustible.....	64
IV.3.1.4 Les fractions massiques de l'oxygène et du dioxyde de carbone.....	64
IV.3.2 La phase liquide.....	65
IV.3.2.1 Evolution des positions des particules.....	65
IV.3.2.2 Effet de l'angle d'injection (cone)	67
IV.3.2.3 Effet de la vitesse d'injection	67
IV.3.2.4 Effet de l'épaisseur du jet (dcone)	68
Conclusion	106
Références	

Chapitre 1

ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE

I.1 Introduction :

Les sociétés modernes se construisent sur la base d'une grande mobilité économique et humaine. L'évolution fulgurante connue par les modes de transports depuis le 20^{ème} siècle est révélatrice d'une explosion économique pour les pays les plus industrialisés, l'automobile est devenue à la fois indispensable au déplacement quotidien des travailleurs, un objet de consommation « moteur » de l'économie, mais également la marque socioculturelle d'une réussite professionnelle.

Aujourd'hui, la voiture est devenue un outil de consommation pratiquement indispensable à la société industrialisée dite « développée ». Ce modèle se propage massivement sur toute la planète conduisant à un nombre extraordinaire d'automobiles : en 1997 l'Organisation de Coopération et de Développement Economique (OCDE) estimait que le nombre de véhicules personnels était passé de 193 à 477 millions entre 1970 et 1995 dans le monde. Ce développement rapide n'est pas sans causer de grave problèmes environnementaux : l'IPC (International programs Center) estime que 20% des émissions de gaz à effet de serre sur terre sont attribuables au secteur des transports.

Dans les moteurs Diesel d'injection directe le rendement de la combustion et la formation de polluants sont fortement influencés par les divers phénomènes qui régissent l'évolution du spray du carburant. En particulier, l'atomization du spray (jet) du liquide et le fractionnement des gouttelettes ou des morceaux (lumps) du fluide à des fragments plus petits, apportent une contribution fondamentale à une opération efficace et propre d'un moteur. En conséquence, il y a un grand intérêt à optimiser l'injection du carburant dans les moteurs Diesel.

Les outils de simulation numérique comme les codes de calcul tridimensionnels tentent de mettre en pratique les connaissances actuelles sur l'atomization du carburant dans le moteur diesel. Le principal intérêt de ces codes réside dans leur capacité à simuler l'injection du carburant pour un nombre de configurations d'injection qui ne peut pas être étudié

expérimentalement. De telles simulations sont indispensables au développement efficace de moteurs encore plus propre et rentable.

Parmi les codes utilisés on peut citer les codes qui sont développés par les laboratoires de Los Alamos (USA), et en particulier les différentes versions du code KIVA qui jouissent d'une bonne réputation et qui sont largement utilisées dans le monde.

I.2 Etude bibliographique :

Koo et Martin (1990) ont étudié les effets de l'injection dans le gaz ambiant à différentes pressions et densités pour un jet transitoire du carburant diesel, ils ont utilisé un analyseur de particule de phase/ Doppler (PDPA) pour mesurer les tailles et les vitesses simultanées des gouttelettes.

Les résultats montrent que les augmentations de r_g / r_l donnent comme résultats des jets de carburant ralentis et étendus à la position de mesure $x/D = 250$. Une augmentation de r_g / r_l a comme conséquence l'augmentation de la durée effective du jet à tous les points dans le champ lointain du jet. Ceci résulte, par exemple, la prolongation de la période au début du jet quand les premières gouttelettes injectées sont rattrapées par les gouttelettes qui sont injectées après elles. Les tailles de gouttelettes tendent à être relativement stable à la valeur typique de r_g / r_l de l'injection directe. Ce qui est le contraire dans le cas où on a des valeurs inférieures, où les nombres de Weber de gouttelettes sont suffisamment grands pour les positions $x/D = 250$, ce qui provoque le fractionnement des gouttelettes dans l'événement du spray.

Tanner (1998) a mené une étude où les méthodes numériques concernant le processus d'atomisation d'un jet de combustible liquide et le fractionnement secondaire (secondary breakup) des gouttelettes ont été développées et testées pour le cas de non-évaporation. Il a utilisé le code KIVA-3 pour simuler un jet de combustible diesel sous la forme d'un cône plein injecté dans une cellule cylindrique à volume constant. Il a calculé le fractionnement du combustible liquide en se basant sur le modèle de fractionnement d'analogie de Taylor qui a été amélioré (enhanced TAB (ETAB) model). Tanner a testé le modèle amélioré par des comparaisons avec des données de PDA (Phase Doppler Anemometry), Spécifiquement, les distributions de rayon et de vitesse des gouttelettes. D'autres comparaisons ont été conduites avec des données calculées en utilisant le modèle de fractionnement de vague de Reitz (Wave Breakup modèle) et avec des résultats expérimentaux de Hiroyasu et Kadota.

Les améliorations du modèle indiqué conformément bien à ces résultats numériques (Reitz) et expérimentaux (Hiroyasu.) Pour le comportement global du spray comme la pénétration, l'angle du cône, et le champ de SMR (Sauter Mean Radius).

Leborgne (1999) a mené une étude numérique de l'évaporation de gouttes multi-composants adapté à la haute pression. Il a remplacé le modèle d'évaporation original du code kiva II par un modèle d'évaporation haute pression, en modifiant le calcul des transferts de masse et de chaleur, en prenant en compte les effets de la pression et du mélange vapeur/gaz ambiant dans le calcul des propriétés physiques du film de diffusion, et en considérant un gaz réel dans le calcul de l'équilibre thermodynamique à l'interface liquide/vapeur. Les résultats montrent que la prise en compte de l'influence de la pression sur l'évaporation et d'une phase liquide à plusieurs constituants permet en effet d'améliorer la simulation de la combustion dans les moteurs à injection directe.

Nishimura et Assanis (2000) ont développé un modèle d'atomisation (CEB) d'un jet Diesel basé sur des concepts de conservation d'énergie, en utilisant le code KIVA-3V, ce modèle a été formulé et validé avec des résultats expérimentaux. Le modèle suit la dynamique des bulles à l'intérieur de l'injecteur et le noyau liquide, et transfère l'énergie d'effondrement de bulle de cavitation en énergie cinétique turbulente. Cette dernière provoque des forces de tension aérodynamique et superficielle pour déterminer le temps de fractionnement primaire et la masse totale des gouttes produites.

Par la suite, le modèle d'analogie de TAYLOR a été utilisé pour le fractionnement secondaire des gouttes.

Les comparaisons entre les prévisions et les résultats expérimentaux dans les conditions de non-évaporation ont prouvé que le modèle est sensible à la valeur choisie pour le rayon moyen de bulle de la distribution Gaussienne. Cependant, ils ont démontré que le rayon moyen de bulle de 25 microns a produit des prévisions satisfaisantes concernant la pénétration du spray, l'angle de cône, et le SMD global et local pour une gamme des pressions d'injection.

L'avantage du modèle CEB est que l'angle de cône peut être prévu, alors que d'autres modèles exigent une valeur prescrite.

De façon générale, ils ont démontré que la comptabilité pour le rôle de la cavitation dans le processus primaire d'atomisation augmente la capacité de prévoir des grandeurs expérimentales de jet.

Jarnicki et al (2000) ont mené une étude numérique sur la formation, l'allumage et la combustion du spray dans la chambre de combustion du moteur Volvo D12C. Le code de calcul qui a été utilisé est KIVA3 REL2, dans lequel ils ont implanté des schémas cinétiques détaillés de la combustion complète de l'heptane. Leurs résultats ont indiqué que le système d'injection à haute pression dans les moteurs Diesel donne la possibilité de réduction des émissions de la suie grâce à une meilleure pulvérisation du carburant et à la réduction du temps d'injection.

I.3 Objectif du travail :

Le présent travail est une contribution à l'étude de la dynamique et de l'énergétique des gouttelettes lors de l'injection du spray dans la chambre de combustion d'un moteur Diesel.

Le Code KIVA II a été utilisé pour simuler l'évaporation, le fractionnement et la coalescence des gouttes. Pour modéliser la combustion turbulente le modèle k- ϵ et le modèle de Magnussen ont été utilisés. Pour le modèle de fragmentation on a utilisé le modèle TAB (Taylor Analogy Breakup). la méthode numérique de résolution des équations régissant l'aérothermochimie est basée sur la méthode des volumes finis.

Dans cette étude, la technique stochastique a été utilisée pour faire la résolution de l'équation du spray. Les effets de la vitesse d'injection, l'angle d'injection, et l'épaisseur du jet ont été mis en évidence.

I.4 contenu du mémoire :

Le présent mémoire s'articule en quatre chapitres.

1. le premier chapitre présente l'introduction et l'étude bibliographique.
2. le deuxième a pour but de présenter la formulation mathématique des équations de l'aérothermochimie turbulente.
3. le troisième chapitre décrit la méthode numérique de résolution
4. le chapitre quatre présente l'ensemble des résultats obtenus et leurs discussions
5. ce mémoire s'achève sur une conclusion et perspectives de recherches.

Chapitre II

FORMULATION MATHEMATIQUE

II.1 Introduction :

Le programme KIVA II (1989) a été réalisé aux laboratoires de Los Alamos (USA) et est présenté comme le successeur et remplaçant de KIVA I (1985) qui est lui même une version modifiée de CONCHAS-SPRAY (1982). La philosophie générale et la structure sont restées les mêmes pour l'élaboration des différentes versions. C'est un code de calcul qui permet la simulation des écoulements réactifs turbulents, multidimensionnels et instationnaires. Il est particulièrement destiné à la simulation de la combustion dans les moteurs. Cependant, sa structure reste générale et peut être utilisée pour d'autres applications sans de lourdes modifications.

Les différentes équations ont, comme dans le code KIVA I, été discrétisées suivant un schéma aux différences finies utilisées sous forme intégrale (forme conservative) ce qui permet de raisonner essentiellement sur le volume des mailles et de transformer toutes les intégrales volumiques des termes en divergence en intégrales surfaciques. Le maillage utilisé, dit ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*) permet une représentation plus aisée de frontières courbées et mobiles. Ce qui est particulièrement important dans l'optique d'une application à la combustion dans les moteurs à piston où des parois sont susceptibles de bouger (piston, soupapes).

Le code KIVA II peut traiter un nombre arbitraire d'espèces et de réactions chimiques. Ces dernières sont décrites sous forme d'équilibres chimiques lorsqu'on les considère comme rapides vis-à-vis du pas de temps de calcul ou sous forme d'équations cinétiques lorsqu'elles sont considérées comme lentes.

Les conditions aux limites aux parois sont modélisées sous forme de lois de paroi dont la fonction est de reproduire au mieux la couche limite turbulente et son action sur les transferts thermiques aux parois. Ce code s'applique à un domaine tridimensionnel de section circulaire ou carrée, avec une restriction possible à un domaine bidimensionnel. Une autre possibilité,

particulièrement adaptée au moteur Diesel à injection directe multi-jets, permet une représentation sous la forme de secteurs cylindriques aux conditions limites périodiques.

Temporellement, KIVA II utilise une méthode dite sous-cycle qui permet d'effectuer le calcul de manière explicite dans la phase eulérienne et implicite dans la phase lagrangienne. Le pas de temps est choisi d'une manière systématique par le code sur le critère de précision et non pas de stabilité, ce pas de temps est choisi comme étant le minimum de différents temps qui caractérisent des phénomènes tels que la diffusion, la convection, la chimie...etc. Le modèle de turbulence utilisé est le modèle $k - \epsilon$ standard.

II.2 Les équations régissantes :

Dans cette section nous donnons les équations de mouvement pour la phase gazeuse, suivi de ceux pour les gouttelettes de spray.

II.2.1 La phase gazeuse :

La phase gazeuse se compose de plusieurs composants. Cette approche est nécessaire dans le cas où les réactions chimiques sont impliquées. Ceci exige l'utilisation des équations pour un mélange à plusieurs éléments, ainsi que des équations de conservation de masse, quantité de mouvement, énergie, aussi bien que les équations de transport de l'énergie cinétique turbulente et son taux de dissipation.

II.2.1.1 Equations d'état :

Les équations d'états sont décrites pour un mélange de gaz parfait, où chaque espèce est dénotée par l'indice m .

$$p = R_0 T \sum_m \frac{r_m}{W_m} \quad (\text{II.1})$$

$$I = I(T) = \sum_m \frac{r_m}{r} I_m(T) \quad (\text{II.2})$$

$$C_p = C_p(T) = \sum_m \frac{r_m}{r} C_{p_m}(T) \quad (\text{II.3})$$

$$h_m = h_m(T) = I_m(T) + R_0 \frac{T}{W_m} \quad (\text{II.4})$$

Où :

R_0 est la constante universelle des gaz parfaits.

W_m est la masse molaire de l'espèce m .

I_m est l'énergie interne de l'espèce m .

C_p est la chaleur spécifique du mélange à pression constante.

C_{pm} est la chaleur spécifique de l'espèce m à pression constante

h_m est l'enthalpie spécifique à la température T du gaz

II.2.1.2 Equation de continuité pour l'espèce m :

$$\frac{\partial r_m}{\partial t} + \underbrace{\text{div}(\mathbf{r}_m \mathbf{u})}_{\text{transport convectif}} = \underbrace{\text{div} \left[r D \nabla \left(\frac{r_m}{r} \right) \right]}_{\text{transport diffusif}} + \mathcal{S}_m^c + \mathcal{S}_m^s d_{m1} \quad (\text{II.5})$$

Où :

r_m est la masse volumique de l'espèce m .

r est la masse volumique du mélange.

\mathbf{u} est la vitesse du mélange.

D est le coefficient de diffusion (*loi de Fick*).

\mathcal{S}_m^c regroupe les termes sources d'origine chimique.

\mathcal{S}_m^s regroupe les termes sources provenant du spray.

d_{m1} vaut 1 si $m = 1$ et 0 sinon, l'espèce 1 correspondant au carburant.

Le terme source est donné par : f :

$$\mathcal{S}_m^s = - \int f r_d 4 \pi r^2 R d v d r d T_d d y d \mathcal{V} \quad (\text{II.6})$$

Où f , la fonction densité de probabilité est considérée plus loin.

II.2.1.3 Equation de continuité pour le mélange :

La somme des équations (II.5) sur toutes les espèces, $r = \sum_m r_m$ mène à une équation totale de conservation de masse du mélange. (La masse est conservée au cours des réactions chimiques.)

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \text{div}(ru) = \dot{m}^s \tag{II.7}$$

II.2.1.4 Equations de conservation de quantité de mouvement :

L'équation de quantité de mouvement est :

$$\frac{\partial(ru)}{\partial t} + \underbrace{\text{div}(ruu)}_{\text{transport convectif}} = -\underbrace{\frac{1}{2}\nabla p}_{\text{forces dues au pression}} - \underbrace{\nabla\left(\frac{2}{3}rk\right)}_{\text{forces générées par la turbulence}} + \underbrace{\text{div}S}_{\text{forces de viscosité}} + \dot{F}^s + rg \tag{II.8}$$

Avec

$$S = m[\nabla u + (\nabla u)^T] + I \text{div}u Id_3$$

Où

p est la pression du mélange.

a est une quantité sans dimension utilisée conjointement avec la méthode PGS (*Pressure Gradient Scaling*). Cette dernière permet d'améliorer la précision du calcul dans le cas des écoulements à faible nombre de Mach.

k est l'énergie cinétique turbulente.

S est le tenseur newtonien des contraintes visqueuses.

I, m sont les coefficients de viscosité.

Id_3 Représente la matrice identité.

g est l'accélération due à la gravité.

\dot{F}^s Représente le taux de gain ou de perte de quantité de mouvement du spray par unité de volume

$$\dot{F}^s = -\int fr_d \left(\frac{4}{3} pr^3 F' + 4pr^2 Rv \right) dv dr dT_d dy d\Omega \tag{II.9}$$

II.2.1.5 Equation de conservation de l'énergie :

L'équation de conservation de l'énergie interne spécifique I est :

$$\frac{\partial(rI)}{\partial t} + \underbrace{\text{div}(\mathbf{r}I)}_{\text{transport convectif}} = - \underbrace{\rho \text{div} \mathbf{u}}_{\text{effet de la pression}} + \underbrace{\rho e}_{\text{dissipation visqueuse}} - \underbrace{\text{div} \mathbf{J}}_{\text{transport diffusif}} + \mathcal{Q}^c + \mathcal{Q}^s \quad (\text{II.10})$$

Avec

$$\mathbf{J} = -K \nabla T - rD \sum_m h_m \nabla \left(\frac{r_m}{r} \right) \quad (\text{II.11})$$

Où

$$\mathcal{Q}^s = \int f r_d \left\{ 4pr^2 R \left[I_l(T_d) + \frac{1}{2}(v-u)^2 \right] + \frac{4}{3} pr^3 [c_l T_d + F' \cdot (v-u-u')] \right\} dv dr dT_d dy d\mathbf{x}$$

I est l'énergie interne spécifique du mélange.

\mathbf{J} est le vecteur flux de chaleur dû à la conduction et à la diffusion d'enthalpie (effet de Duffour).

e est le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente.

T est la température du mélange.

K est le coefficient de conduction de la chaleur.

h_m est l'enthalpie spécifique de l'espèce m .

\mathcal{Q}^c représente l'énergie produite ou consommée par les réactions chimiques.

\mathcal{Q}^s représente l'énergie fournie ou absorbée par le spray.

II.2.1.6 Equation de transport de l'énergie cinétique turbulente :

Le model de turbulence implémentée dans KIVA-II est le model $K - \epsilon$. Dans ce modèle, deux équations additionnelles de transports sont résolues, une pour l'énergie cinétique turbulente et une pour son taux de dissipation.

L'équation de l'énergie cinétique turbulente est :

$$\frac{\partial(rk)}{\partial t} + \underbrace{\text{div}(\mathbf{r}k)}_{\text{transport convectif}} = - \underbrace{\frac{2}{3} rk \text{div} \mathbf{u}}_{\text{terme source dû à la compressibilité}} + \underbrace{\rho \epsilon}_{\text{taux de production}} + \underbrace{\text{div} \left(\frac{m}{Pr_k} \nabla k \right)}_{\text{transport diffusif}} - \underbrace{\rho e}_{\text{taux de destruction}} + \mathcal{W}^s \quad (\text{II.12})$$

Où $\mathcal{W}^e = \int \rho \frac{4}{3} \nu \frac{d^2 u}{dx^2} dx$

\mathcal{W}^e représente le taux de dispersion des gouttelettes du spray dû au travail des tourbillons.

II.2.1.7 Equation de transport du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \underbrace{\text{div}(\rho \mathbf{u} e)}_{\text{transport convectif}} = & - \left(\frac{2}{3} C_{e1} - C_{e3} \right) \rho \text{div} \mathbf{u} + \text{div} \left(\frac{\rho}{Pr_e} \nabla e \right) \\ & + \underbrace{\frac{\rho}{Pr_e} (C_{e1} \mathbf{S} : \nabla \mathbf{u} - C_{e2} \rho e + C_s \mathcal{W}^e)}_{\text{terme source}} \end{aligned} \quad (\text{II.13})$$

Le terme source \mathcal{W}^e apparu dans les deux équations de transport (II.12), (II.13) représente l'effet de la turbulence sur les gouttes.

$C_{e1}, C_{e2}, C_{e3}, Pr_k, Pr_e$: sont les constantes usuelles du modèle de turbulence $k-e$, elles sont données à partir de l'expérience ou de la théorie :

$$\begin{aligned} C_{e1} &= 1.44 & Pr_k &= 1.0 \\ C_{e2} &= 1.92 & Pr_e &= 1.3 \\ C_{e3} &= -1.0 & C_s &= 1.5 \end{aligned}$$

Quand le modèle de turbulence SGS (*Sub Grid Scale*) est utilisé, la valeur de e doit satisfaire la condition :

$$e \geq \left[\frac{C_m}{Pr_e (C_{e2} - C_{e1})} \right]^{1/2} \frac{k^{3/2}}{L_{SGS}} \quad (\text{II.14})$$

Où L_{SGS} est une échelle de longueur donnée par le SGS et sa valeur est prise égale à $4\delta x$. δx est une dimension numérique représentative de la cellule.

Il est à noter que le modèle de turbulence SGS se réduit au modèle $k-e$ au niveau des parois où toutes les échelles de longueur de la turbulence sont suffisamment petites d'être résolues par le maillage.

Les coefficients de transport sont donnés par :

$$\left\{ \begin{array}{l} m = m_{air} + rC_m \frac{k^2}{e} \\ I = A_3 m \\ K = \frac{mC_p}{Pr} \\ D = \frac{m}{rSc} \end{array} \right. \quad (\text{II.15})$$

C_m est une constante empirique qui a une valeur standard égale à 0.09.

m_{air} est donnée par la formule de Sutherland :

$$m_{air} = \frac{A_1 T^{3/2}}{T + A_2} \quad (\text{II.16})$$

Où A_1 et A_2 sont des constantes valant respectivement 1.457×10^{-5} et 110 [16], et la constante A_3 est prise égale à $(-2/3)$.

Les nombres de Prandtl et Schmidt (Pr et Sc) sont des constantes données.

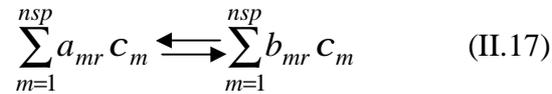
II.2.1.8 Réactions chimiques :

Le code KIVA II est doté de traitements permettant des réactions chimiques entre les divers constituants du mélange gazeux. On peut donc simuler la combustion, ainsi que les divers processus chimiques dans la mesure des possibilités offertes. Pour cela, l'utilisateur dispose d'une palette de constituants chimiques, de tableaux permettant de définir les réactions chimiques (coefficients stœchiométriques, cinétiques, constantes d'équilibre) et d'un choix de modèles à activer.

La palette des constituants chimiques disponibles dans le code est représentée par le tableau II.1.

On choisit un hydrocarbure (et un seul) parmi les 12 disponibles, et d'autres constituants nécessaires parmi ceux proposés (tableau *idsp* du fichier de données). L'ordre de déclaration des constituants est indifférent, sauf pour l'hydrocarbure qui est obligatoirement le premier.

Les réactions chimiques ayant lieu au cœur de l'écoulement sont symbolisées par les relations :



Où :

c_m représente une mole de l'espèce m .

a_{mr} , b_{mr} représentent les coefficients stœchiométriques de la réaction n° r .

nsp représente le nombre total de constituants dans le mélange gazeux.

Hydrocarbures		Autres constituants	
CH_4	<i>méthane</i>	O_2	<i>oxygène</i>
C_3H_8	<i>propane</i>	N_2	<i>azote</i>
C_7H_{16}	<i>heptane</i>	CO_2	<i>dioxyde de carbone.</i>
C_8H_{18}	<i>iso-octane</i>	H_2O	<i>eau</i>
$C_{12}H_{26}$	<i>dodécane</i>	CO	<i>monoxyde de carbone</i>
$C_{13}H_{28}$	<i>tridécane</i>	H_2	<i>hydrogène</i>
$C_{14}H_{30}$	<i>tetradécane</i>	NO	<i>monoxyde d'azote</i>
$C_{16}H_{34}$	<i>hexadécane</i>	H	<i>radical libre d'hydrogène</i>
C_2H_2	<i>acetylene</i>	O	<i>radical libre d'oxygène</i>
C_2H_4	<i>éthylène</i>	N	<i>radical libre d'azote</i>
C_6H_6	<i>benzène</i>	OH	<i>radical libre</i>
$Df2$	<i>diesel 2</i>	R	<i>radical libre d'hydrocarbure</i>

Tableau II.1 : Constituants chimiques disponibles dans le Code KIVA II

Les constituants stœchiométriques doivent respecter la condition de conservation de la masse :

$$\sum_{m=1}^{nsp} (a_{mr} - b_{mr}) W_m = 0 \quad (\text{II.18})$$

On distingue dans KIVA II deux types de réactions chimiques: les réactions dites « d'équilibre » et les réactions dites « cinétiques ».

III.2.3.1 Les réactions d'équilibre :

Pour ce type de réactions, on suppose que l'équilibre est atteint instantanément, sans tenir compte d'une cinétique. Dans ce cas, les masses volumiques de chaque constituant obéissent à la loi d'action de masse :

$$\prod_{m=1}^{nsp} \left(\frac{r_m}{W_m} \right)^{b_{mr} - a_{mr}} = K_r(T) \quad (\text{II.19})$$

Où $K_r(T)$ est la constante d'équilibre de la réaction n^or, supposée ne dépendre que de la température :

$$K_r = \exp \left(A_r \ln T_A + \frac{B_r}{T_A} + C_r + D_r T_A + E_r T_A^2 \right) \quad (\text{II.20})$$

Avec A_r, B_r, C_r et D_r sont des constantes, et $T_A = T/1000$.

III.2.3.2 Les réactions cinétiques :

Pour ce type de réactions, on prend en compte la cinétique de la réaction vers l'équilibre par un taux de réaction w_r qui est donné par la loi d'arrhénius (cinétique chimique pure) ou par le modèle de Magnussen.

- Pour la loi d'Arrhénius, w_r est de la forme :

$$\mathbf{v}_r = k_{fr} \prod_{m=1}^{nsp} \left(\frac{r_m}{W_m} \right)^{a_{mr}} - k_{br} \prod_{m=1}^{nsp} \left(\frac{r_m}{W_m} \right)^{b_{mr}} \quad (\text{II.21})$$

Avec

$$k_{fr} = A_{fr} T^{x_{fr}} \exp(-E_{fr}/T) \quad (\text{II.22})$$

$$k_{br} = A_{br} T^{x_{br}} \exp(-E_{br}/T) \quad (\text{II.23})$$

Où E_{fr} , E_{br} sont les températures d'activation.

Dans l'équation (II.20), les exposants a_{mr} et b_{mr} (ordres partiels de la réaction) ne sont pas forcément égaux aux coefficients stœchiométriques, de façon à pouvoir prendre en compte des ordres de réactions empiriques.

En pratique, pour appliquer ce modèle de cinétique chimique, la procédure est la suivante :

- Déclarer $modmh=0$.
 - Définir les réactions cinétiques par leurs coefficients stœchiométriques.
 - Définir les ordres partiels des réactions cinétiques.
 - Définir les constantes de la loi d'Arrhénius.
 - Ajuster la température de coupure $tcut$ en dessous de laquelle aucune cinétique chimique n'est calculée.
- Pour le modèle de Magnussen, le taux de réaction \mathbf{v}_r s'exprime par la relation :

$$\mathbf{v}_r = \frac{A_{mag}}{t_t} \frac{1}{a_{C_m H_n} W_{C_m H_n}} \min \left(\bar{r}_{C_m H_n}, \frac{\bar{r}_{O_2}}{s}, B_{mag} \frac{\bar{r}_{br}}{1+s} \right) \quad (\text{II.24})$$

Et pour appliquer ce modèle de combustion, la procédure est la suivante :

- Déclarer $modmh=1$.
- Ajuster les valeur de A_{mag} et B_{mag} .
- Ajuster la température de coupure $tcut$.

Les termes sources d'origine chimique des équations (II.1) et (II.5) sont exprimés par :

$$\dot{m}_m^c = W_m \sum_r (b_{mr} - a_{mr}) \dot{m}_r \quad (\text{II.25})$$

$$\dot{Q}^c = \sum_r Q_r \dot{m}_r \quad (\text{II.26})$$

Où Q_r est la chaleur de la réaction n° r . Celle-ci s'exprime par :

$$Q_r = \sum_{m=1}^{nsp} (a_{mr} - b_{mr}) (\Delta h_f^0)_m \quad (\text{II.27})$$

$(\Delta h_f^0)_m$ Étant l'enthalpie de formation de l'espèce m au zéro absolu.

Pour notre étude on a utilisé comme combustible le $DF_2(C_{12}H_{26})$, où on a une réaction chimique cinétique, unique et globale :



II.2.2 La phase liquide :

II.2.2.1 Introduction :

La solution de la dynamique de spray et son interaction avec un gaz est un problème extrêmement compliqué. Une méthode de suivi lagrangien de particules permet à KIVA II de traiter des sprays de gouttelettes de carburant. Ce type de méthode consiste à suivre des particules (liquides) sous forme d'une phase discrète dans une phase continue (gazeuse), qui seule est résolue par une méthode eulérienne.

Le couplage entre les deux phases est réalisé de la façon suivante :

- Vu le nombre immense de gouttelettes présentes en réalité dans le spray, il serait illusoire de vouloir suivre chacune d'entre elles dans le calcul. Aussi le suivi s'applique-t-il à des 'particules', considérées comme un ensemble de gouttelettes possédant toutes les mêmes caractéristiques (position, vitesses, tailles, température,...etc).

Les caractéristiques propres de chaque particule sont déduites de modèles physiques prenant en compte l'action locale de la phase gazeuse, comme la traînée dynamique, la turbulence, les transferts de chaleur et de masse, le fractionnement et la coalescence.

- Inversement, côté phase eulérienne, la présence des particules est modélisée par la prise en compte de divers termes sources dans les équations de transport. Cette démarche suppose que localement le volume du liquide reste petit devant celui de la phase continue, ce qui est en pratique bien respecté dans les simulations moteurs sauf tout près de la sortie des injecteurs où les taux de présence de liquide peuvent être élevés.

II.2.2.2 Equation d'évolution de spray :

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

Une formulation mathématique qui est capable de représenter ces processus physiques complexes est la formulation d'équation de spray :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f\mathbf{v}) + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (f\mathbf{F}) + \frac{\partial}{\partial r}(fR) + \frac{\partial}{\partial T_d}(fT_d) + \frac{\partial}{\partial y}(f\mathcal{Y}) + \frac{\partial}{\partial \mathcal{Y}}(f\mathcal{Y}) = J_{coll} + J_{bu} \quad (II.28)$$

Où f est une fonction de densité de probabilité telle que:

$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, r, T_d, y, \mathcal{Y}, t) d\mathbf{v} dr dT_d dy d\mathcal{Y}$ représente le nombre probable de gouttelettes par unité de

volume à la position \mathbf{x} et au temps t telles que:

- leur vitesse est comprise entre \mathbf{v} et $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$
- leur rayon est compris entre r et $r + dr$
- leur température est comprise entre T_d et $T_d + dT_d$
- la déformation de la sphéricité entre y et $y + dy$
- le taux de variation de y entre \mathcal{Y} et $\mathcal{Y} + d\mathcal{Y}$

\dot{F} , R , T_d , et $\dot{\theta}$ représentent les taux de variation par rapport au temps de la vitesse, du rayon, de la température, et de la vitesse d'oscillation $\dot{\theta}$ de chaque gouttelette.

\dot{J}_{coll} et \dot{J}_{bu} sont des termes sources dus aux collisions et aux fractionnements des gouttelettes.

Le terme source dû à la collision est donné par :

$$\begin{aligned} \dot{J}_{coll} = & \frac{1}{2} \iint f(x, v_1, r_1, T_{d_1}, y_1, \dot{\theta}_1, t) f(x, v_2, r_2, T_{d_2}, y_2, \dot{\theta}_2, t) p(r_1 + r_2)^2 |v_1 - v_2| \\ & \{ S(v, r, T_d, y, \dot{\theta}, v_1, r_1, T_{d_1}, y_1, \dot{\theta}_1, v_2, r_2, T_{d_2}, y_2, \dot{\theta}_2) - d(v - v_1) d(r - r_1) d(T_d - T_{d_1}) d(y - y_1) d(\dot{\theta} - \dot{\theta}_1) \\ & - d(v - v_2) d(r - r_2) d(T_d - T_{d_2}) d(y - y_2) d(\dot{\theta} - \dot{\theta}_2) \} dv_1 dr_1 dT_{d_1} dy_1 d\dot{\theta}_1 dv_2 dr_2 dT_{d_2} dy_2 d\dot{\theta}_2 \end{aligned} \quad (II.29)$$

la fonction de probabilité de transition de collision S est définie de sorte que $S dv_1 dr_1 dT_{d_1} dy_1 d\dot{\theta}_1$ soit le nombre probable de gouttes qui résultent d'une collision entre une gouttelette avec des propriétés de l'indice 1 et une autre avec des propriétés de l'indice 2.

Il existe deux types de collision : si le paramètre b d'impact de collision est inférieur à la valeur critique b_{cr} les gouttelettes coalescent et si b est supérieure à b_{cr} les gouttelettes maintiennent leurs tailles et températures mais elles subissent des changements de vitesses.

Le paramètre critique d'impact est donné par :

$$b_{cr} = (r_1 + r_2)^2 \min(1.0, 2.4 f(g) / W_{e_L}) \quad (II.30)$$

$$f(g) = g^3 - 2.4g^2 + 2.7g \quad (II.31)$$

$$g = \frac{r_2}{r_1} \quad \text{où} \quad r_1 \leq r_2 \quad (II.32)$$

$$W_{e_L} = r_d |v_1 - v_2| r_1 / a(\overline{T_d}) \quad (II.33)$$

Et

$$\overline{T_d} = \frac{r_1^3 T_{d_1} + r_2^3 T_{d_2}}{r_1^3 + r_2^3} \quad (II.34)$$

C'est la température de mélange des 2 gouttes

Où : a est le coefficient de la tension superficielle.

$$\begin{aligned}
\mathbf{s} &= \frac{b_{cr}^2}{(r_1 + r_2)^2} \mathbf{d} \left[r - (r_1^3 + r_2^3) \right] \mathbf{d} \left[v - \frac{r_1^3 v_1 + r_2^3 v_2}{r_1^3 + r_2^3} \right] \mathbf{d} \left[T_d - \frac{r_1^3 T_{d_1} + r_2^3 T_{d_2}}{r_1^3 + r_2^3} \right] \mathbf{d} (y - y_2) \mathbf{d} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) \\
&+ \frac{2}{(r_1 + r_2)^2} \int_{b_{cr}}^{r_1 + r_2} \left[\mathbf{d} (r - r_1) \mathbf{d} (v - v'_1) \mathbf{d} (T_d - T_{d_1}) \mathbf{d} (y - y_1) \mathbf{d} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) + \right. \\
&\quad \left. \mathbf{d} (r - r_2) \mathbf{d} (v - v'_2) \mathbf{d} (T_d - T_{d_2}) \mathbf{d} (y - y_2) \mathbf{d} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) \right] b db
\end{aligned}
\tag{II.35}$$

Où

$$v'_1 = \frac{r_1^3 v_1 + r_2^3 v_2 + r_2^3 (v_1 - v_2) \frac{b - b_{cr}}{r_1 + r_2 - b_{cr}}}{r_1^3 + r_2^3} \tag{II.36}$$

et

$$v'_2 = \frac{r_1^3 v_1 + r_2^3 v_2 + r_1^3 (v_2 - v_1) \frac{b - b_{cr}}{r_1 + r_2 - b_{cr}}}{r_1^3 + r_2^3} \tag{II.37}$$

Démonstration de ces équations se trouve dans la référence (20) qui se trouve dans le guide KIVA-II.

Le terme source du à la fragmentation est donné par :

$$\mathbf{f}_{bu}^{\mathbf{x}} = \int f(x, v_1, r_1, T_{d_1}, 1, \mathbf{x}, t) \mathbf{x} B(v, r, T_d, y, \mathbf{x}, v_1, r_1, T_{d_1}, \mathbf{x}, x, t) dv_1 dr_1 dT_{d_1} d\mathbf{x} \tag{II.38}$$

La fonction de probabilité de transition de fragmentation B est définie de sorte que $B dv_1 dr_1 dT_{d_1} dy d\mathbf{x}$ soit le nombre probable de gouttelettes qui sont produites par la fragmentation d'une goutte avec des propriétés de l'indice 1. Quand la distorsion y d'une goutte excède l'unité, elle se casse en une distribution de plus petites gouttes par la fonction B . les vitesses de gouttelettes produites diffèrent également de celle de la gouttelette parente par une vitesse avec la grandeur w et avec la direction aléatoirement distribuée dans un plan normal au vecteur de la vitesse relative entre la goutte et le gaz. La valeur de w est donnée par :

$$w = \frac{1}{2} r_1 \mathbf{x} \tag{II.39}$$

La forme précise de B est :

$$B = g(r) d(T_d - T_{d_1}) d(y) d\left(\frac{1}{2\rho} \int d[v - (v_1 + wn)] dn\right) \quad (\text{II.40})$$

L'équation qui régit le phénomène de distorsion de gouttelette est :

$$\frac{2}{3} \frac{r}{r_d} \frac{(u + u' - v)^2}{r^2} - \frac{8a(T_d)}{r_d r^3} y - \frac{5m_l(T_d)}{r_d r^2} \quad (\text{II.41})$$

Où $m_l(T_d)$ est la viscosité du liquide.

L'équation (II.41), qui est basée sur l'analogie entre une gouttelette oscillante et un système masse-ressort est l'équation d'un oscillateur harmonique amorti. La force externe est assurée par les forces aérodynamiques de gaz sur la gouttelette. La force de rappel est assurée par les forces de tension superficielle. L'amortissement est assuré par la viscosité du liquide. Compte tenu des très grandes populations de gouttes constituant les sprays, il est souvent commode d'utiliser des lois de distribution statistiques pour caractériser leurs tailles. On est ainsi amené à définir des rayons moyens dans un nuage de gouttes, selon divers critères. Dans Kiva, on utilise le rayon moyen de Sauter, qui est défini par

$$r_{32} = 3\bar{r} = \frac{r_1}{\frac{7}{3} + \frac{1}{8} \frac{r_d r_1^3}{a(T_{d_1})}} \quad (\text{II.42})$$

La distribution des tailles des gouttes autour de leur taille moyenne est généralement modélisée par des fonctions mathématiques statistiques. La distribution initiale de tailles dans Kiva est représentée par une loi statistique en x^2 centrée sur le rayon moyen de Sauter.

La probabilité pour qu'une particule ait un rayon compris r et $r + dr$ est $g(r)dr$, où g est la densité de probabilité exprimée par :

$$g(r) = \frac{r^3}{6\bar{r}^4} e^{-r/\bar{r}} \quad (\text{II.43})$$

On définit maintenant les fonctions \dot{F} , R , T_d , et ρ qui déterminent la trajectoire de la goutte.

L'accélération \dot{F} de gouttelettes a des contributions dues à la traînée et la force de gravité. Elle définie comme suit :

$$\frac{\mathbf{r}}{F} = \frac{3}{8} \left(\frac{r}{r_d} \right) \frac{|\mathbf{u} + \mathbf{u}' - \mathbf{v}|}{r} (\mathbf{u} + \mathbf{u}' - \mathbf{v}) C_D + \mathbf{g} \quad (\text{II.44})$$

Avec

\mathbf{r}_d est la masse volumique de la gouttelette.

C_D est le coefficient de traînée. Celui-ci s'exprime par une corrélation en fonction du nombre de Reynolds de la gouttelette :

$$Re_d = \frac{2rr|\mathbf{u} + \mathbf{u}' - \mathbf{v}|}{m} \quad (\text{II.45})$$

Où

m est la viscosité dynamique du gaz entourant la gouttelette.

\mathbf{u} est la vitesse moyenne du gaz.

\mathbf{u}' est la fluctuation turbulente de la vitesse du gaz.

\mathbf{v} est la vitesse de la gouttelette.

Dans l'approche retenue par KIVA II, le coefficient de traînée est déterminé par la formulation suivante :

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_d} \left(1 + \frac{1}{6} Re_d^{3/2} \right) & \text{si } Re_d < 1000 \\ 0.424 & \text{si } Re_d \geq 1000 \end{cases} \quad (\text{II.46})$$

II.2.2.3 Evaporation de la goutte :

La gouttelette liquide reçoit son énergie thermique du gaz Cette énergie est employée pour augmenter la température du liquide et pour surmonter la chaleur latente de l'évaporation afin d'évaporer le carburant. A moins que le gaz soit saturé du carburant de vapeur, l'évaporation toujours a lieu et réduit le rayon de gouttelette. Si la chaleur transférée fournie par le gaz est insuffisante, la température de gouttelette diminuera.

Le taux du changement de rayon R de gouttelette est donné par la corrélation de Frosseling (G.M Faeth 1977) :

$$R = - \frac{(rD)_{air}(\hat{T})}{2r_d r} \frac{y_1^* - y_1}{1 - y_1^*} Sh_d \quad (\text{II.47})$$

où $(rD)_{air}(\hat{T})$ dénote la diffusivité de la vapeur de carburant dans le gaz à la température de

$$\text{film } \hat{T} = \frac{T + 2T_d}{3}. \quad (\text{II.48})$$

T_d est la température de la gouttelette.

r_d est la densité de la gouttelette.

Le nombre de Sherwood pour le transfert de masse est donné par la corrélation suivante :

$$Sh_d = \left(2.0 + 0.6Re_d^{1/2}Sc_d^{1/3}\right) \frac{\ln(1 + B_d)}{B_d} \quad (\text{II.49})$$

Où le nombre de transfert de masse est :

$$B_d = \frac{y_1^* - y_1}{1 - y_1^*} \quad (\text{II.50})$$

$$y_1^*(T_d) = \frac{w_1}{w_1 + w_0 \left(\frac{p}{p_v(T_d)} - 1 \right)} \quad (\text{II.51})$$

y_1^* est la fraction massique de la vapeur du combustible à la surface de la gouttelette.

y_1 est la fraction massique du combustible loin de la gouttelette.

w_1 est la masse molaire du carburant

w_0 est la masse molaire moyenne locale de toutes les espèces sauf la vapeur de carburant.

$p_v(T_d)$ est la pression de vapeur saturante du carburant.

On a supposé que la température est uniforme et que la pression partielle de la vapeur de carburant à la surface de la gouttelette égale à la pression de vapeur saturante.

Le nombre de Schmidt est :

$$Sc_d = \frac{m_{air}(\hat{T})}{rD_{air}(\hat{T})} \quad (\text{II.52})$$

Le taux de variation de la température de la gouttelette \dot{T}_d est déterminé par l'équation de bilan d'énergie suivante :

$$r_d \frac{4}{3} \rho r^3 C_l \dot{T}_d - r_d 4 \rho r^2 RL(T_d) = 4 \rho r^2 Q_d \quad (\text{II.53})$$

Où :

C_l est la chaleur spécifique du combustible à l'état liquide.

$L(T_d)$ est la chaleur latente de vaporisation du combustible.

Q_d est le flux de chaleur fourni par le gaz à la gouttelette, et est donné par la corrélation de Ranz-Marshall :

$$Q_d = \frac{K_{air}(\hat{T})(T - T_d)}{2r} Nu_d \quad (\text{II.54})$$

Où :

$$Nu_d = \left(2.0 + 0.6 Re_d^{1/2} Pr_d^{1/3}\right) \frac{\ln(1 + B_d)}{B_d} \quad (\text{II.55})$$

$$Pr_d = \frac{m_{air}(\hat{T}) C_p(\hat{T})}{K_{air}(\hat{T})} \quad (\text{II.56})$$

$$K_{air}(\hat{T}) = \frac{K_1 \hat{T}^{3/2}}{\hat{T} + K_2} \quad (\text{II.57})$$

Avec

C_p est la chaleur spécifique du gaz à pression constante et à la température \hat{T} .

K_1 et K_2 sont des constantes, valant respectivement : 252 et 200.

La chaleur latente de l'évaporation L est une fonction de la température T_d de la gouttelette, elle définie comme suit :

$$L(T_d) = h_1(T_d) - h_l(T_d, p_v(T_d)) \quad (\text{II.58})$$

Chapitre III

METHODE NUMERIQUE DE RESOLUTION

III.1 Introduction :

La discrétisation des équations gouvernant l'écoulement diphasique dans le code Kiva-II est basé sur la méthode ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*). Le cycle de calcul est effectué en deux étapes :

- La phase lagrangienne : pendant laquelle, les nœuds du maillage se déplacent à la même vitesse que le fluide. Il n'y a donc aucune convection au travers des frontières des cellules du maillage. Ainsi, pendant cette première phase aucun des termes convectifs des équations de l'aérodynamique n'est pris en compte.

Dans le code KIVA II, l'étape lagrangienne est elle-même scindée en deux phases. La première, dite phase A, prend en compte de façon totalement explicite une partie des termes sources. La seconde, dite phase B, tient compte de façon plus ou moins implicite des termes sources restants (termes diffusifs).

- La phase Eulérienne : dans cette phase, l'écoulement est considéré « gelé » et les nœuds du maillage sont ramenés aux nouvelles positions prescrites par l'utilisateur (les anciennes positions si le domaine de calcul n'a pas changé ou de nouvelles positions si le maillage a suivi le déplacement de certaines parois). Ce remaillage est réalisé en transportant par convection les différentes quantités au travers des frontières des volumes de contrôle lorsque ceux-ci sont déplacés vers leurs nouvelles positions.

III.2 Maillage et topologie :

La méthode des volumes finis a été employée pour la discrétisation spatiales des différentes équations résolues dans KIVA. Pour se faire, le domaine de calcul est découpé en un certain nombre des cellules hexaédrales. L'ensemble de ces cellules constitue le maillage qui est supposé structuré. Les cellules sont repérées par les nombre entiers (i,j,k) , qui peut être considérés comme des coordonnées dans l'espace logique. Les index (i,j,k) marquent également les sommets avec la compréhension que le sommet (i,j,k) est le sommet 4 pour la cellule (i,j,k) .

Les inconnues de vitesses sont localisées aux sommets des cellules :

$$\mathbf{u}_{ijk} = \mathbf{u}(x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk}) \quad (\text{III.1})$$

Où $x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk}$ sont les coordonnées cartésiennes du sommet n°4

Les quantités thermodynamiques, ainsi que les variables k et e sont positionnées aux centres des cellules.

$$Q_{ijk} = Q(x_{ijk}^c, y_{ijk}^c, z_{ijk}^c) \quad (\text{III.2})$$

Où

$$Q = p, r, T, I, r_m, k, e$$

$x_{ijk}^c, y_{ijk}^c, z_{ijk}^c$ sont les coordonnées du centre de la cellule (i,j,k) .

III.2.1 Cellule de base :

La figure (III.1) représente une cellule de base du maillage. La numérotation des sommets étant celle réellement utilisée dans le code.

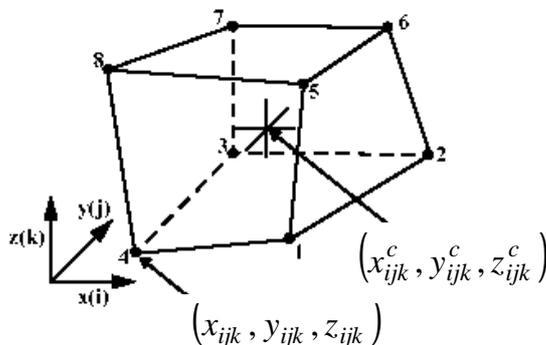


Figure III.1 : Cellule de base du maillage

Le centre de la cellule (i,j,k) est le point de coordonnées $x_{ijk}^c, y_{ijk}^c, z_{ijk}^c$.

Pour l'application de la méthode des volumes finis, il est également nécessaire de connaître les projections suivant x, y et z des aires des facettes de chaque cellule. Celles-ci intervenant dans le calcul des flux. Puisqu'une facette est commune à deux cellules adjacentes, il est par exemple suffisant de considérer les facettes « *LEFT* », « *FRONT* » et « *BOTTOM* ». Les vecteurs surfaces sont conventionnellement dirigés vers l'extérieur de la cellule, voir figure (III.2).

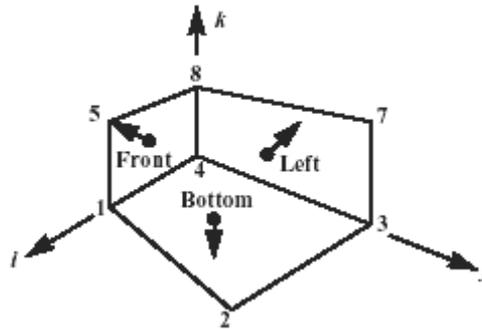


Figure III.2 : les faces de la cellule (i,j,k) .

En générale, on notera \vec{A}_a le vecteur surface de la face a , où :

$$a = \begin{cases} l & (\text{LEFT}) \\ r & (\text{RIGHT}) \\ f & (\text{FRONT}) \\ d & (\text{DERRIERE}) \\ b & (\text{BOTTOM}) \\ t & (\text{TOP}) \end{cases} \quad (\text{III.3})$$

Le calcul des flux diffusifs d'une variable centrée Q nécessite l'estimation de la quantité $(\nabla Q)_a \cdot \vec{A}_a$ sur n'importe quelle facette a . Pour cela, on fait intervenir les quatres points $\vec{x}_t, \vec{x}_b, \vec{x}_d, \vec{x}_f$, milieux des arêtes de la facette a et les deux points \vec{x}_l, \vec{x}_r , centres des deux cellules adjacentes à la facette a (voir figure III.3).

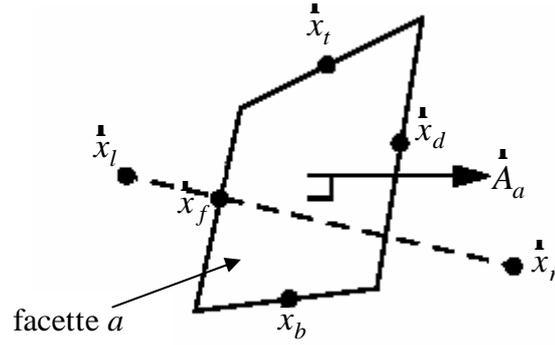


Figure III.3 : les six points utilisés pour le calcul du gradient d'une variable centrée

On cherche alors les coefficients a_{lr} , a_{tb} et a_{fd} vérifiant la relation:

$$a_{lr}(\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_r) + a_{tb}(\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_b) + a_{fd}(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_d) = \mathbf{A}_a \quad (\text{III.4})$$

Les coefficients a_{tb} et a_{fd} dans l'équation (III.4) étant nuls si le vecteur $(\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_r)$ est parallèle au vecteur surface \mathbf{A}_a .

La quantité $(\nabla Q)_a \cdot \mathbf{A}_a$ est alors estimée par:

$$a_{lr}(Q_l - Q_r) + a_{tb}(Q_t - Q_b) + a_{fd}(Q_f - Q_d) = (\nabla Q)_a \cdot \mathbf{A}_a \quad (\text{III.5})$$

Où Q_t , Q_b , Q_f , et Q_d sont obtenus en faisant la moyenne des valeurs de Q dans les quatre cellules entourant respectivement les arêtes t , b , f et d de la facette a .

La masse M_{ijk} contenue dans la cellule (i, j, k) est estimée par :

$$M_{ijk} = \mathbf{r}_{ijk} \cdot \mathbf{V}_{ijk} \quad (\text{III.6})$$

Il est également nécessaire de définir des cellules auxiliaires centrées sur les sommets du maillage. Ces cellules sont utilisées lors de la discrétisation de l'équation de conservation de la quantité de mouvement.

III.2.2 Cellules auxiliaires :

Une cellule auxiliaire centrée sur un sommet du maillage est faite de l'assemblage de huit petits hexaèdres. Chaque hexaèdre appartenant à l'une des huit cellules de base possédant le sommet en question (figure III.4). Cette cellule a pour but de calculer la vitesse au sommet de la cellule de base.

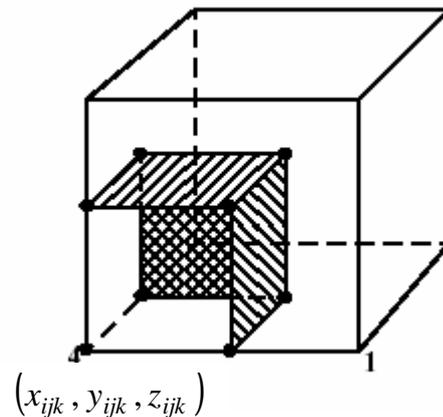


Figure III.4 : Partie de la cellule auxiliaire centrée au nœud $(x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk})$ appartenant à la cellule (i,j,k) . Les trois facettes hachurées font partie des 24 facettes constituant la cellule auxiliaire

Chaque petit hexaèdre est construit de telle façon que :

- son volume représente $1/8$ du volume de la cellule de base à laquelle il appartient.
- les aires des trois facettes reposant sur les faces de la cellule de base représentent respectivement $1/4$ des aires de ces faces.

En plus des inconnues de vitesses positionnées aux sommets du maillage, on introduit, au cours de la phase B, les vitesses normales des faces des cellules (vitesses définies aux centres des faces). Un volume de contrôle est alors associé à chacune de ces vitesses (figure III.5). Celui-ci est fait de l'assemblage de huit petits hexaèdres appartenant aux deux cellules situées de part et d'autre de la face où est positionnée l'inconnue de vitesse en question.

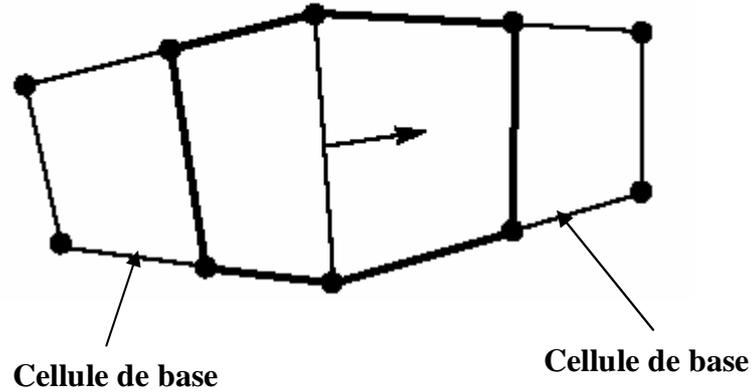


Figure III.5 : Volume de contrôle utilisé pour le calcul des vitesses normales des faces

Ces nouvelles cellules auxiliaires sont utilisées pour le calcul de l'accélération des vitesses normales des faces dues aux termes de pression p et $2rk/3$.

III.3 La phase lagrangienne (phase A et B) :

III.3.1 Phase A (explicite):

- *Equation de conservation de la masse*

On ne tient compte que des termes sources issus des réactions chimiques et de l'évaporation du spray. On cherche donc pour toutes les cellules (i,j,k) du maillage, la masse volumique $(r_m^A)_{ijk}$ solution explicite du système:

$$\frac{(r_m^A)_{ijk} - (r_m^n)_{ijk}}{\Delta t} = (\mathcal{R}_m^c)_{ijk} + \mathcal{R}_{ijk}^s \quad (\text{III.7})$$

Où \mathcal{R}_{ijk}^s est le terme source qui donne le taux de masse ajouté au gaz par unité de volume dû à l'évaporation du spray.

$$\mathcal{R}_{ijk}^s = -\frac{1}{V_{ijk}^n \Delta t} \sum_{pc(i,j,k)} N'_p r_d \frac{4}{3} p [(r_p^A)^3 - (r'_p)^3] \quad (\text{III.8})$$

r_d est la densité du liquide

N'_p et r'_p sont des valeurs provisoires du nombre et du rayon des gouttelettes de la particule p.

r_p^A est le rayon de la gouttelette calculé dans la phase A.

• **Equations de conservation de la quantité de mouvement**

On ne tient compte que des termes sources de quantité de mouvement apportée par le spray, des forces gravitationnelles et du coupleur de nœuds ANC_{ijk} « *Alternate node coupler* ». Cette dernière sert à amortir les vitesses transverses parasites dues à la discrétisation décalée (vitesses aux nœuds- pressions aux centres).

On cherche donc pour toutes les cellules (i,j,k) du maillage, la vitesse \mathbf{u}_{ijk}^A , solution explicite du système :

$$\frac{[(M')_{ijk}^A + S'_{ijk} \mathbf{r}_{ijk}^A - (M')_{ijk}^n \mathbf{u}_{ijk}^n]}{\Delta t} = -\frac{\mathbf{R}'_{ijk}}{\Delta t} + (M')_{ijk}^n \mathbf{g} - (M')_{ijk}^n \frac{ANC_{ijk}}{\Delta t} \quad (\text{III.9})$$

$$S'_{ijk} = \sum_{pc(ijk)} N'_p r_d \frac{4}{3} \rho (r_p^B)^3 \frac{\Delta t D_p}{1 + \Delta t D_p}$$

et

$$R' = \sum_{pc(ijk)} N'_p r_d \frac{4}{3} \rho \left[(r_p^B)^3 \frac{v'_p + \Delta t D_p u'_p}{1 + \Delta t D_p} - (r_p^B)^3 v'_p \right]$$

Où les quantités \mathbf{R}'_{ijk} et S'_{ijk} sont liées au couplage gaz/spray.

D_p est la fonction de la traînée elle est définie comme suit :

$$D_p = \frac{3}{8} \frac{r_{ijk}^n}{r_d} \frac{|u_{ijk}^n + u'_p - v'_p|}{r_p^A} C_D(R_{e_p}) \quad (\text{III.10})$$

• **Equation de conservation de l'énergie**

On ne tient compte que des termes sources \mathcal{Q}^e provenant des réactions chimiques et \mathcal{Q}^s provenant du spray. On cherche donc pour toutes les cellules (i,j,k) du maillage, l'énergie interne I_{ijk}^A , solution explicite du système :

$$\frac{M_{ijk}^A I_{ijk}^A - M_{ijk}^n I_{ijk}^n}{\Delta t} = V_{ijk}^n (\mathcal{Q}_{ijk}^e + \mathcal{Q}_{ijk}^s) \quad (\text{III.11})$$

Où \mathcal{Q}_{ijk}^e est le terme source de l'équation de l'énergie interne.

$$\mathcal{G}_{ijk}^s = -\frac{1}{V_{ijk}^n \Delta t} \sum_{pc(i,j,k)} N'_p r_d \frac{4}{3} \rho \left\{ \begin{aligned} & (r_p^A)^3 I_l(T_{d_p}^A) - (r_p')^3 I_l(T_{d_p}') + (r_p^A)^3 (v_p^t - v_p') \cdot (v_p^t - u_{lmn}^n - u_p') \\ & + \frac{1}{2} [(r_p^A)^3 - (r_p')^3] (v_p^t - u_{lmn}^n)^2 \end{aligned} \right\}$$

(III.12)

r_p' , T_{d_p}' et v_p' sont des rayons de gouttelette, des températures, et des vitesses qui ont été dues partiellement aux collisions et fragmentations de gouttelette.

$T_{d_p}^{A}$ est la température de la gouttelette calculée dans la phase A.

• Equations du modèle de turbulence k-e

On ne tient compte que des termes sources d'énergie cinétique turbulente issus de l'interaction gaz/spray. On cherche donc pour toutes les cellules (i,j,k) du maillage, l'énergie cinétique turbulente k_{ijk}^A et son taux de dissipation e_{ijk}^A , solutions explicites des systèmes :

$$\frac{M_{ijk}^A k_{ijk}^A - M_{ijk}^n k_{ijk}^n}{\Delta t} = \mathcal{W}_{ijk}^s V_{ijk}^n \quad (III.13)$$

$$\frac{M_{ijk}^A e_{ijk}^A - M_{ijk}^n e_{ijk}^n}{\Delta t} = C_s \mathcal{W}_{ijk}^s V_{ijk}^n \frac{e_{ijk}^A}{k_{ijk}^n} \quad (III.14)$$

Le terme source de l'équation de l'énergie cinétique turbulente est donné par :

$$\mathcal{W}_{ijk}^s = -\frac{1}{V_{ijk}^n \Delta t} \sum_{pc(i,j,k)} N'_p r_d \frac{4}{3} \rho (r_p^A)^3 (v_p^t - v_p') \cdot u_p' \quad (III.15)$$

Où v_p^t est obtenu de l'équation d'accélération de la particule:

$$\frac{v_p^t - v_p'}{\Delta t} = D_p (u_{lmn}^n + u_p' - v_p^t) \quad (III.16)$$

III.3.1.1 Technique Stochastique de particule (Méthode de résolution de l'équation de conservation de la phase liquide) :

Une méthode très efficace et précise pour résoudre la dynamique du spray est basée sur les idées de la méthode de Monte Carlo et la méthode discrète de particule.

Dans les méthodes discrètes de particule, la distribution continue f est rapprochée par une distribution discrète f' :

$$f' = \sum_{p=1}^{n_p} N_p d(x - x_p) d(v - v_p) d(r - r_p) d(T - T_{dp}) d(y - y_p) d(\xi - \xi_p). \quad (\text{III.17})$$

Où : d est la fonction de Dirac normalisée (Kronecker).

Le spray est modélisé par un ensemble de particules chacune d'elle se compose d'un certain nombre de gouttelettes N_p ayant les mêmes caractéristiques, c'est-à-dire, la position x_p , la vitesse v_p , la taille r_p , la température T_{dp} , et les paramètres d'oscillation y_p et ξ_p .

Les « lots » de gouttes sont injectés à chaque pas de calcul avec des conditions initiales portant sur la position, la vitesse, la température, et le nombre de gouttes représentées.

La méthode utilisée est la méthode de Monte Carlo dans le sens que nous prélevons aléatoirement des distributions assumées de probabilité qui régissent les propriétés de gouttelette à l'injection et au comportement de gouttelette après l'injection.

La fonction de distribution f est définie par $dN = f(x)dx$, où dN représente le nombre des gouttelettes dans l'intervalle dx .

On note que $dN = dy$, où $y = \int_{x_1}^x f(x')dx'$ est la variable aléatoire.

Après avoir obtenu y , et l'invertir on obtient x , qui va être distribué selon la fonction $f(x)$.

III.3.1.1.1 Méthode de Monté Carlo :

La méthode de Monte Carlo peut être considérée comme une simulation statistique se basant sur les données suivantes :

- L'utilisation de nombres aléatoires uniformément distribués entre 0 et 1, générés par une source (random number generator).
- Le système physique doit être décrit par un ensemble de pdf 's, (fonctions densité de probabilité).

L'interprétation de la pdf $f(x)$ est que $f(x)dx$ est la probabilité que la variable aléatoire est dans l'intervalle $(x, x + dx)$.

$$\text{On a } f(x) \geq 0, \quad -\infty < x < +\infty \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1$$

La cdf (cumulative distribution function) donne la probabilité que la variable aléatoire est inférieure ou égale à x :

$$cdf = \int_{-\infty}^x f(x)dx = F(x)$$

$$F(-\infty) = 0 \text{ et } F(+\infty) = 1$$

$F(x)$ croit d'une façon monotonique.

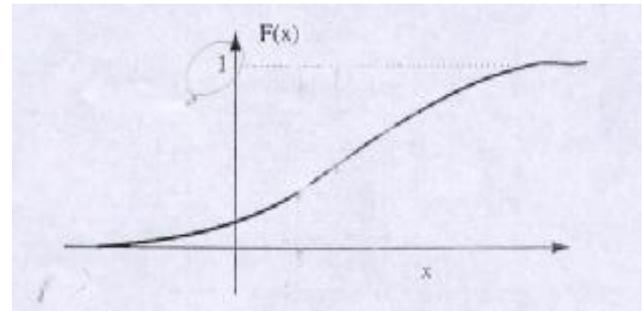
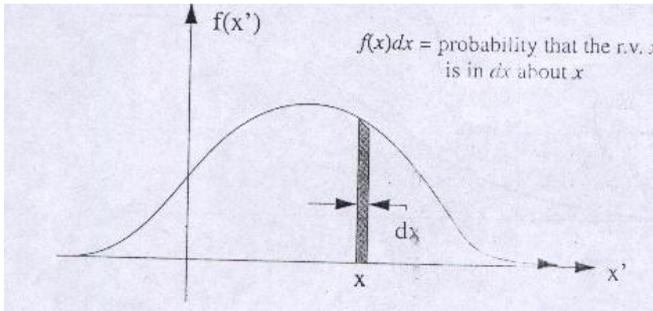


Figure III. 6: Fonction densité de probabilité typique (*pdf*)

Figure III.7 : fonction Cumulative de distribution (*cdf*)

• **Exemples de pdf's continues :**

✓ Distribution exponentielle : elle est caractérisée par un seul paramètre l

$$f(x) = l e^{-lx} , x \geq 0, l > 0$$

La moyenne est $m = \frac{1}{l}$

La variance est $s^2 = \left(\frac{1}{l}\right)^2$

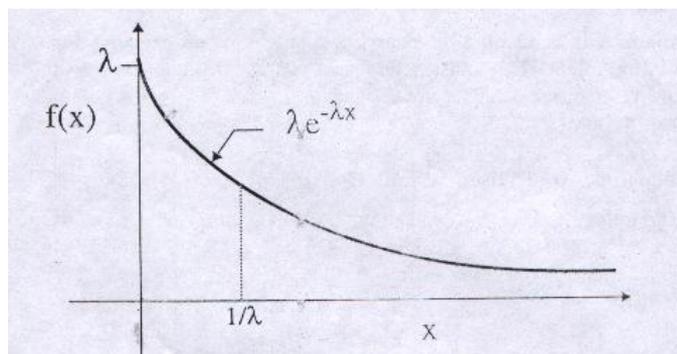


Figure III.8 : *pdf* exponentielle

- ▼ Distribution Gaussienne (Normale) : c'est la *pdf* la plus important dans la probabilité et la statistique.

$$f(x) = \frac{1}{(2ps)^{1/2}} e^{-\frac{(x-m)^2}{2s^2}} \quad -\infty < x < +\infty$$

Elle est caractérisée par deux paramètres m et s , où m est la moyenne et s^2 est la variance.

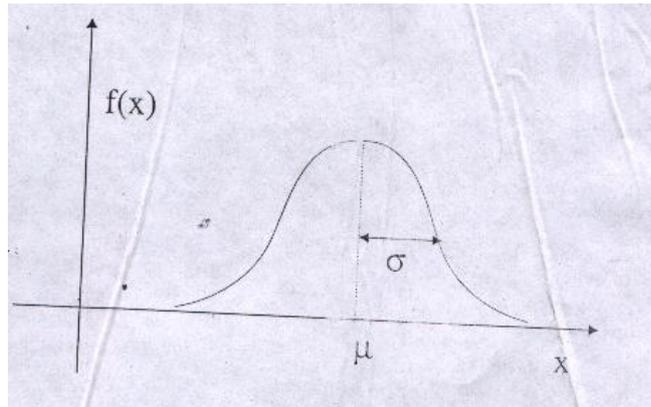


Figure III.9 : *pdf* Gaussienne (Normale)

- **L'échantillonnage par inversion de la cdf :**

Supposons que l'on veuille injecter des gouttelettes dans la chambre de combustion de sorte que la plupart des gouttes aient un rayon proche de SMR et très peu de gouttes aient un rayon dont la valeur est éloignée de SMR. L'utilisation directe du générateur de nombres aléatoire pour donner des valeurs de rayons de gouttes uniformément distribuées serait incorrecte.

L'échantillonnage par inversion de la *cdf* permet justement de fournir beaucoup plus de gouttes avec des rayons proches de SMR que de gouttes trop grandes ou trop petites. En fait, la distribution des tailles des gouttes sera selon la *pdf* donnée, qui décrit le système.

En se référant à la figure ci-contre, l'échantillonnage

se fera d'abord par rapport à $y = F(x)$ et donnera

des valeurs uniformément distribuées de la *cdf*

entre 0 et 1. Inverser la *cdf* et résoudre pour x .

Les valeurs obtenues de x ne seront pas uniformément distribuées de 0 à $+\infty$ mais la probabilité d'avoir une

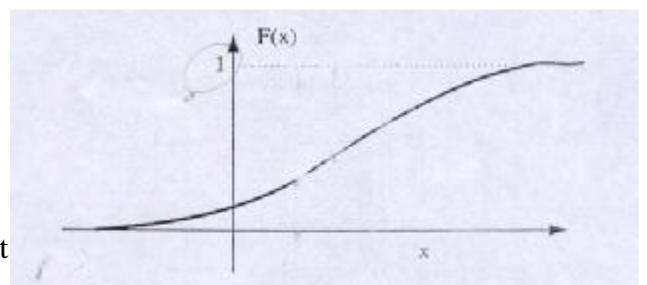


Figure III.10 : choix de la variable aléatoire x à partir de l'inverse de $F(x)$

valeur aux environs de x_1 est plus grande que d'avoir une valeur aux environs de x_2 .

La distribution de la probabilité satisfera, en fait, la pdf présumée.

III.3.1.2 Choix de rayon des particules à l'injection :

Si INJDIST=1, une distribution en x^2 est utilisée pour les tailles des gouttelettes injectées :

$$g(r) = \frac{r^3}{6\bar{r}^4} e^{-r/\bar{r}} \quad (\text{III.18})$$

$$\text{Où : } \bar{r} = \frac{1}{3} r_{32} \quad (\text{III.19})$$

r_{32} est le rayon moyen de Sauter

La quantité r_{32} est donné par le paramètre d'entrée SMR quand INJDIST=1. Il y a beaucoup de manière d'obtenir une distribution de tailles spécifiée en injectant des particules, parce qu'on a la liberté de choisir le nombre de gouttes par particule. La méthode que nous employons, qui est également employée dans le calcul de fractionnement de gouttelette, prélève le plus fréquemment ces portions de la distribution de taille où le maximum de masse se produit. Ces gouttes échangeront habituellement le maximum de masse, de quantité de mouvement, et d'énergie avec le gaz.

la masse totale de gouttelette liée à chaque particule devrait être constante. Cette constante est déterminée en divisant la masse totale du spray TSPMAS par le nombre total de lots TNPARG.

Selon notre procédure pour choisir aléatoirement des valeurs de rayons avec la distribution $g(r)$, nous devons trouver la distribution $h(r)$ (fonction cumulative) liée au $g(r)$ et nous appliquons l'inverse de $h(r)$ au nombre aléatoire uniformément distribué dans l'intervalle (0, 1).

La distribution $h(r)$ est définie comme suit :

$$h(r) = 1 - e^{-r/\bar{r}} \left[1 + r/\bar{r} + \frac{1}{2} (r/\bar{r})^2 + \frac{1}{6} (r/\bar{r})^3 \right] \quad (\text{III.21})$$

L'inversion du $h(r)$ est exécutée numériquement. Nous stockons les valeurs de $h(r)$ dans l'incrément de $0.12\bar{r}$ entre $r = 0$ and $r = 12\bar{r} = 4r_{32}$. La valeur de $h(12\bar{r})$ est prise pour être unité. Si XX est le nombre aléatoire dans l'intervalle (0, 1), nous trouvons la valeur de n pour laquelle :

$$h[0.12\bar{r}(n-1)] \leq XX < h[0.12\bar{r}n]. \quad (\text{III.22})$$

$$\text{Où } r = 0.12\bar{r}n = 0.04r_{32}n. \quad (\text{III.23})$$

III.3.1.3 Calcul de dispersion turbulente de gouttelette :

Des effets turbulents sur les particules du spray sont modélés en ajoutant à la vitesse moyenne u du gaz une vitesse fluctuante u'_p , où chaque composante de u'_p est choisie aléatoirement à partir d'une distribution Gaussian avec la déviation $\sqrt{\frac{2}{3}k}$.

$$G(u') = (4/3pk)^{-3/2} \exp\left\{-3|u'|^{2/4}k\right\} \quad (\text{III.24})$$

Où k est l'énergie cinétique spécifique turbulente du gaz dans la cellule où se trouve la particule.

La vitesse fluctuante u'_p varie d'une manière discontinue après un passage de temps de corrélation de turbulence t_{turb} .

Pour chaque particule, on choisit une de deux procédures numériques pour résoudre les équations de ce modèle. Le choix dépend des grandeurs de Δt (pas de temps de calcul) et t_{turb} .

- Si $\Delta t \ll t_{turb}$:

C'est le cas le plus souvent, La position x_p^B de la particule et sa vitesse v_p^B sont approximés en utilisant (straightforward difference approximations) :

$$\frac{x_p^B - x_p^n}{\Delta t} = v_p^n \quad (\text{III.25})$$

$$\frac{v_p^B - v_p^n}{\Delta t} = D_p(u_{ijk}^B + u'_p - v_p^B) + g \quad (\text{III.26})$$

Où D_p est la fonction de la traînée de la particule, et la particule est localisée dans la cellule de quantité de mouvement.

La vitesse fluctuante est maintenue constante pour un certains nombre de cycles k tels que :

$$t^{n+k-1} - t^n \ll t_{turb} \leq t^{n+k} - t^n \quad (\text{III.27})$$

a été pour la dernière fois choisi pour le cycle n t_{turb} est le temps de turbulence évalué à la position de la particule pour le cycle $n+k$.

- Si $\Delta t \mathbf{f} t_{turb}$:

Dans ce cas il n'est plus possible d'employer ces approximations de différence, parce que la particule « voit » plus d'une vitesse fluctuante u'_p dans le cycle courant.

Notre approche à ce problème abandonne une certaine précision pour obtenir l'efficacité de calcul. On choisit aléatoirement les variations de position et de vitesse à partir d'une distribution de probabilité. Donc notre méthode exige le choix de deux nombres aléatoire à chaque pas de temps, un pour déterminer la variation de la vitesse fluctuante (du') et l'autre pour déterminer la variation de la position turbulente (dx').

Cette approche utilisée est inexacte à plusieurs égards. D'abord, quand $\Delta t \mathbf{f} t_{turb}$ on ignore l'effet de la vitesse fluctuante u'_p (c'est à dire $u'_p=0$) sur l'échange de masse, d'énergie et sur le fractionnement de la goutte. En second lieu, dans le calcul de la distribution de probabilité de dx' et du' on a supposé que la fonction de la traînée D_p, k , et t_{turb} sont constant pour une particule donnée pendant le pas de temps courant.

En particulier, les effets d'une loi nonlineaire de la traînée ne sont pas inclus dans les distributions de probabilité. L'utilisation d'une loi nonlineaire rend le calcul des distributions de probabilité pour dx' et du' difficile à faire.

L'hypothèse de la linéarisation de la loi de la traînée nous permet de traiter chaque composante de dx' et du' indépendamment. Pour chaque composante on utilise la distribution Gaussian.

Donc, dans ce cas on a :

$$\frac{x_p^B - x_p^n}{\Delta t} = v_p^n + \frac{dx'}{\Delta t} \quad (III.28)$$

$$\frac{v_p^B - v_p^n}{\Delta t} = D_p (u_{ijk}^B - v_p^B) + g + \frac{du'}{\Delta t} \quad (III.29)$$

$$dx' = t_{per} du' + dx'_b \quad (III.30)$$

Où : t_{per} est le temps de persistance de la turbulence

Chaque composante de dx'_b est choisie à partir d'une distribution Gaussian.

III.3.1.4 Calcul de l'oscillation et le fractionnement de la gouttelette :

Le modèle de breakup d'origine KIVA est le modèle TAB (Taylor Analogy Breakup). Il s'agit d'un modèle de fractionnement secondaire, qu'on applique cependant dès la sortie de l'injecteur. Il n'est valable que pour les régimes de fractionnement de type « Bag » et « stripping ». son domaine de validité se situe donc vers les pressions d'injection modérées.

Dans ce modèle, la goutte est supposée se déformer par rapport à sa forme sphérique de référence de façon analogue à un oscillateur harmonique : les forces d'inertie dues au gaz environnant constituent l'excitation extérieure, la tension superficielle constitue la force de rappel et la viscosité joue le rôle des forces d'amortissement.

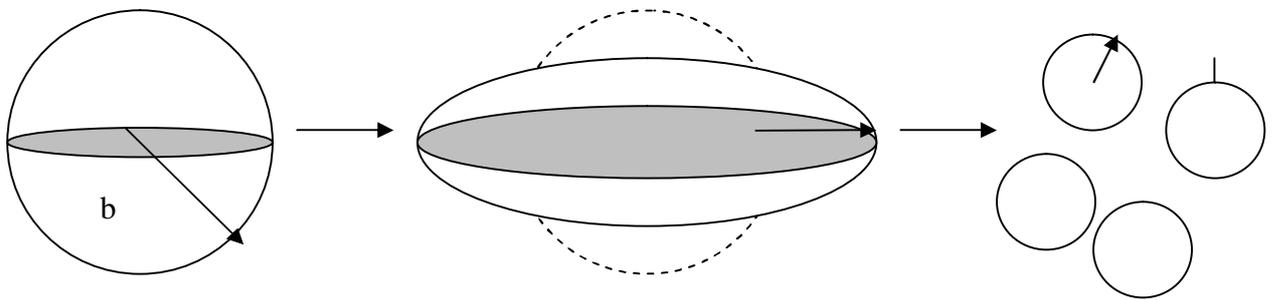


Figure .III.11 : Schéma de principe de fractionnement du modèle TAB

Pour calculer l'oscillation et le fractionnement d'une gouttelette, on exige deux rangées additionnelles y_p et \dot{y}_p de la particule. La quantité y_p est proportionnelle au déplacement de la surface de la gouttelette de sa position d'équilibre, divisé par le rayon de gouttelette ($y = \frac{x}{b}$).

Le fractionnement de gouttelette se produit si et seulement si y_p excède l'unité.

Pour mettre à jour les valeurs de y_p et \dot{y}_p à chaque cycle de calcul nous nous servons de la solution exacte de l'équation (II.40) en supposant les coefficients constants.

$$y(t) = \frac{W_e}{12} + \exp(-t/t_d) \left[\left(y(0) - \frac{W_e}{12} \right) \cos \omega t + \frac{1}{\omega} \left(\dot{y}(0) + \frac{y_0 - \frac{W_e}{12}}{t_d} \right) \sin \omega t \right] \quad (\text{III.31})$$

Où $W_e = \frac{ru^2r}{a}$ est le nombre de Weber

r est la masse volumique du mélange gazeux

u est la vitesse relative entre le gaz et la gouttelette.

a est le coefficient de tension superficielle du liquide.

$t_d = \frac{2 r_d r^2}{5 m_l}$ est le temps d'amortissement visqueux des oscillations

m_l est la viscosité du liquide.

$w^2 = 8 \frac{a}{r_d r^3} - \frac{1}{t_d^2}$ où w est la fréquence des oscillations de la gouttelette.

Pour chaque particule nous calculons d'abord W_e, t_d et w^2 .

La valeur de $w^2 \leq 0$ se produit seulement pour les petites gouttelettes pour lesquelles les distorsions et les oscillations sont négligeables. Donc on peut dire :

Si $w^2 \leq 0 \Rightarrow y_p^{n+1} = \mathcal{Y}_p^{n+1} = 0$

Si $w^2 > 0$, nous calculons l'amplitude A des oscillations non amortis :

$$A = \left(y_p^n - \frac{W_e}{12} \right)^2 + \left(\frac{\mathcal{Y}_p^n}{w} \right)^2 \quad (\text{III.32})$$

Si $W_e/12 + A \leq 1.0$, la valeur de y n'excédera jamais l'unité et le fractionnement ne se produira pas. La plupart des particules passeront par la condition $W_e/12 + A \leq 1.0$, et pour cela nous mettons à jour y et \mathcal{Y}_p en utilisant l'équation (III.31).

$$y_p^{n+1} = \frac{W_e}{12} + \exp(-\Delta t/t_d) \left[\left(y_p^n - \frac{W_e}{12} \right) \cos w\Delta t + \frac{1}{w} \left(\mathcal{Y}_p^n + \frac{y_p^n - \frac{W_e}{12}}{t_d} \right) \sin w\Delta t \right] \quad (\text{III.33})$$

et

$$\mathcal{Y}_p^{n+1} = \left(\frac{W_e}{12} - y_p^{n+1} \right) / t_d + \exp(-\Delta t/t_d) \left[\left(\mathcal{Y}_p^n + \frac{y_p^n - \frac{W_e}{12}}{t_d} \right) \cos w\Delta t - w \left(y_p^n - \frac{W_e}{12} \right) \sin w\Delta t \right] \quad (\text{III.34})$$

Si $W_e/12 + A > 1.0$, le fractionnement est possible lors du pas de temps courant. Nous calculons le temps de fractionnement t_{bu} en supposant que l'oscillation de goutte est non

amortie pour sa première période. Ce-ci est vrai pour toutes les gouttelettes sauf les petites gouttelettes.

t_{bu} est la plus petite racine supérieure à t^n de l'équation suivante :

$$\frac{W_e}{12} + A \cos[w(t - t^n) + \Phi] = 1 \quad (\text{III.35})$$

Où :

$$\cos \Phi = \frac{y_p^n - \frac{W_e}{12}}{A} \quad \text{et} \quad \sin \Phi = -\frac{y_p^n}{Aw}$$

Ces deux paramètres conditionnent le fractionnement : la particule se fractionne dès que les deux conditions $W_e/12 + A \geq 1.0$ (déformation adimensionnée $y \leq 1$) et $t^{n+1} \geq t_{bu}$ sont réunies.

La vitesse normale des gouttes issues du fractionnement par rapport à la trajectoire de la goutte mère est proportionnelle à la vitesse de déformation à l'instant t_{bu} :

$$V_1 = C_v b \dot{\gamma}(t_{bu}) \quad \text{où} \quad C_v = 0.5$$

C'est cette vitesse qui crée l'ouverture du cône de jet.

Le rayon r des gouttes de la particule issue du fractionnement est tiré aléatoirement suivant une loi statistique en x^2 centré sur r_{32}

Il à noter que le modèle TAB ne crée pas de nouvelle particule lors du fractionnement. C'est simplement le rayon des gouttes contenues dans la particule qui diminue, et par conséquent leur nombre qui augmente de façon à conserver la masse :

$$N_p^{n+1} = N_p^n \left(\frac{b}{r} \right)^3 \quad (\text{III.36})$$

où : b est le rayon de la goutte avant le fractionnement

r est le rayon de la goutte après le fractionnement

III.3.1.5 Calcul de la collision des gouttelettes:

Il est à noter que les gouttelettes sont regroupées dans des particules, dans lesquelles elles ont toutes les mêmes propriétés.

Le modèle suppose que des gouttes ne peuvent entrer en collision que si les particules qui les contiennent se trouvent dans la même maille de calcul. De plus, on exclue des calculs de collision les particules collées aux parois.

Considérons 2 particules situées dans la même maille, donc susceptible d'entrer en collision. Pour faciliter la compréhension, on appelle "gouttes collectrices" (indice c) les gouttes dont la taille est la plus grande, et "gouttes satellites" (indice s) celles dont la taille est la plus petite.

On suppose que toutes les gouttes sont uniformément réparties dans le volume n de la maille contenant les 2 particules considérées. Le nombre moyen de collisions entre une goutte collectrice et toutes les gouttes satellites pendant le pas de temps Δt vaut alors :

$$\bar{n} = N_s \frac{\rho(r_c + r_s)^2 |V_c - V_s| \Delta t}{n} \quad (\text{III.37})$$

Où N_s est le nombre de gouttes dans la particule satellite, r_c le rayon des gouttes collectrices, r_s le rayon des gouttes satellites, V_c la vitesse des gouttes collectrices et V_s la vitesse des gouttes satellites.

On suppose que la probabilité p_n pour qu'une goutte collectrice entre en collision avec n gouttes satellites suit une distribution statistique de poisson, de valeur moyenne \bar{n} :

$$p_n = e^{-\bar{n}} \frac{\bar{n}^n}{n!} \quad (\text{III.38})$$

La probabilité pour qu'il n'y ait aucune collision entre les 2 particules est donc $p_0 = e^{-\bar{n}}$.

Un nombre aléatoire n_1 est tiré entre 0 et 1.

Si $n_1 \geq p_0$, aucune collision n'est calculée entre les 2 particules.

Dans le cas contraire, on continue le calcul de collision. Il faut maintenant savoir si les gouttes satellites vont coalescer avec la goutte collectrice ou bien impacter avec rebond. Ce choix s'effectue grâce à un critère basé sur la valeur de l'efficacité de collision exprimé par :

$$e = \left(\frac{b_{cr}}{r_c + r_s} \right)^2 \quad (\text{III.39})$$

Où b_{cr} est le facteur de décentrage critique.

e Représente la probabilité de coalescence. Elle est modélisée par :

$$e = \min \left(1.0, 2.4 \frac{f(g)}{W_{eL}} \right) \quad (\text{III.40})$$

Où :

$$f(g) = g^3 - 2.4g^2 + 2.7g \quad (\text{III.41})$$

avec
$$g = \frac{r_c}{r_s} \quad (\text{III.42})$$

et :
$$W_{e_L} = \frac{r_d |V_c - V_s|^2 r_s}{S} \quad (\text{III.43})$$

Dans cette expression du nombre de Weber, la tension superficielle S est évaluée à la température \bar{T} de mélange des 2 gouttes :

$$\bar{T} = \frac{r_c^3 T_c + r_s^3 T_s}{r_c^3 + r_s^3} \quad (\text{III.44})$$

Où T_c et T_s sont respectivement la température des gouttes collectrices et satellites.

Une fois l'efficacité de collision déterminée, on tire un nouveau nombre aléatoire n_2 entre 0 et 1.

La coalescence a lieu si $n_2 \leq e$.

On détermine alors le nombre n de gouttes satellites qui sont absorbées par une goutte collectrice en encadrant le nombre aléatoire n_1 tiré plus haut par deux intégrales de la distribution de poisson eq (III.38):

$$\sum_{i=0}^{n-1} p_i \leq n_1 \leq \sum_{i=0}^n p_i \quad (\text{III.45})$$

Comme on suppose que les N_c gouttes de la particule collectrice se comportent toutes de la même façon, le nombre total de gouttes satellites absorbées est $N_c n$. Il faut bien entendu que ce nombre n'excède pas N_s , auquel cas on limite la valeur de n à $\frac{N_s}{N_c}$.

Après coalescence, le nouveau nombre de gouttes dans la particule satellite a donc diminué de $N_c n$ et leur taille reste inchangée.

Inversement, dans la particule collectrice, le nombre de gouttes reste inchangé mais leur taille a augmenté. Leur nouveau rayon r'_c est issu d'un bilan massique simple :

$$r'_c = \sqrt[3]{r_c^3 + nr_s^3} \quad (\text{III.46})$$

Quant aux nouvelles vitesses et températures des gouttes de la particule collectrice, elles sont calculées par une moyenne pondérée par les masses. Par exemple, la nouvelle vitesse V'_c s'exprime par :

$$V'_c = \frac{r_c^3 u_c + nr_s^3 u_s}{r'^3_c} \quad (\text{III.47})$$

Dans le cas contraire ($n_2 \mathbf{f} e$), la collision se réduit à un rebond se traduisant pour chaque particule par un changement de direction de vitesse, en supposant que la masse, la quantité de mouvement et l'énergie se conservent. Les calculs de collision sont calculés pour ($N = \min(N_c, N_s)$). La modification des trajectoires est fonction du facteur de décentrage b par le rapport f_e suivant :

$$f_e = \frac{b - b_{cr}}{r_c + r_s - b_{cr}} \quad (\text{III.48})$$

Où :

$$b = \sqrt{n_2} (r_c + r_s) \quad (\text{III.49})$$

Où n_2 est le deuxième nombre aléatoire tiré plus haut.

Le paramètre b exprime le décentrage de la collision. Il varie entre 0, pour un choc frontal, à 1 quand les gouttes se frôlent.

La nouvelle vitesse de la particule ayant le plus petit nombre de gouttes (indice c par exemple) s'exprime alors par :

$$V'_c = \frac{m_c V_c + m_s V_s + m_s (V_c - V_s) f_e}{m_c + m_s} \quad (\text{III.50})$$

la nouvelle vitesse ayant le plus grand nombre de gouttes est calculée de façon analogue, mais on la pondère par le nombre de gouttes supplémentaires qui n'ont pas été appariées et dont la vitesse reste inchangée :

$$V'_s = \frac{N_c}{N_s} \frac{m_c V_c + m_s V_s + m_c (V_c - V_s) f_e}{m_c + m_s} + \left(1 - \frac{N_c}{N_s}\right) V_s \quad (\text{III.51})$$

III.3.1.6 Calcul de l'évaporation de la gouttelette:

Les changements de température et de rayon d'une particule sont obtenus en évaporant la particule séquentiellement à une pression constante. Les approximations de différence du calcul sont implicites dans la température de gouttelette mais explicites dans la fraction de masse de la vapeur et la température du gaz. Quoique les particules soient évaporées séquentiellement, cette explicité peut produire des changements non physiques de la fraction de masse de la vapeur et la température du gaz quand les taux de transfert de la chaleur et de la masse à une particule sont grands. Pour empêcher ceci, on calcule pour chaque particule le pas du temps d'évaporation basé sur des taux de transfert de la chaleur et de la masse.

Le calcul d'évaporation est exécuté dans le sous programme EVAP. L'équation que nous rapprochons est obtenue de l'équation (41) en éliminant R et Q_d :

$$r_d \frac{2}{3} r^2 c_l T_d^{\frac{2}{3}} = k_{air} (T - T_d) N_{u_d} - L(T_d) (rD)_{air} B_d(T_d) Sh_d \quad (III.52)$$

Où

$$B_d(T_d) = \frac{Y_1^*(T_d) - Y_1}{1 - Y_1^*(T_d)} \quad (III.53)$$

L'approximation de l'équation (III.52) est donnée par :

$$r_d \frac{2}{3} (r_p^v)^2 c_l (T_{d_p}^v) \frac{T_{d_p}^{v+1} - T_p^v}{dt_{ev}} = k_{air} (\hat{T}_{ijk} - T_{d_p}^{v+1}) V_{Nu}^v \frac{\ln[1 + B_d(T_{d_p}^{v+1})]}{B_d(T_{d_p}^{v+1})} - L(T_{d_p}^v) (rD)_{air}^v V_{sh}^v \ln[1 + B_d(T_{d_p}^{v+1})] \quad (III.53)$$

d'où on peut calculer la température de la gouttelette T_{dp}^A en tenant compte du phénomène d'évaporation.

$$B_d(T_{d_p}^{v+1}) = \frac{Y_1^*(T_{d_p}^{v+1}) - (\hat{Y}_1)_{ijk}}{1 - Y_1^*(T_{d_p}^{v+1})} \quad (III.54)$$

Le rayon de la goutte est obtenu de la formule suivante :

$$(r_p^{v+1})^2 = \max \left\{ (r_p^v)^2 - dt_{ev} \frac{(rD)_{air}^v V_{sh}^v}{r_d} \frac{\ln[1 + B_d(T_{d_p}^v)] + \ln[1 + B_d(T_{d_p}^{v+1})]}{2} \right\} \quad (III.55)$$

qui rapproche l'équation (II.46) qui représente le taux du changement de rayon R de gouttelette.

III.3.2 Phase B (implicite):

Dans cette phase on tient compte des termes qui n'ont pas été résolus au cours de la phase A c'est-à-dire les termes diffusifs.

Les équations fournissant Y_m^B, k^B et e^B étant faiblement couplées aux équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie. Celles-ci sont traitées à part. En effet, l'équation de conservation de la masse est résolue en premier, puis suivent les équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie. Celles-ci sont traitées de façon couplée à l'aide d'un algorithme itératif prédicteur- correcteur de type *SIMPLE*. On traite en dernier les équations de transport du modèle de turbulence $k-e$.

- **Equation de conservation de la masse**

On tient compte des termes de diffusion et on cherche donc pour toutes les cellules

(i,j,k) du maillage, la fraction massique $(Y_m^B)_{ijk}$, solution implicite du système :

$$M_{ijk}^B \frac{(Y_m^B)_{ijk} - (Y_m^A)_{ijk}}{\Delta t} = \sum_{\text{faces } a} (rD)_a^n \nabla [f_D Y_m^B + (1 - f_D) Y_m^A]_a \cdot \mathbf{r}_a \quad (\text{III.55})$$

Où

$$\begin{cases} (Y_m^A)_{ijk} = (r_m^A)_{ijk} / (r^A)_{ijk} \\ (Y_m^B)_{ijk} = (r_m^B)_{ijk} / (r^B)_{ijk} \end{cases} \quad (\text{III.56})$$

On note dans l'équation (III.55) la présence du paramètre d'implication f_D au niveau du terme diffusif. Ce paramètre, défini aux centres des cellules, varie dans le temps et dans l'espace. La valeur prise par f_D dans une cellule est donnée par :

$$f_D = \begin{cases} 1 - \frac{1}{4FC_d} & \text{si } C_d > 1/4 \\ 0 & \text{si } C_d \leq 1/4 \end{cases} \quad (\text{III.57})$$

Où C_d est le coefficient local de diffusion de la cellule considérée. Ce coefficient est du style :

$$C_d = \frac{m}{r} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (\text{III.58})$$

Δx représentant la taille caractéristique de la cellule.

Lorsque le coefficient C_d est petit devant 1, f_D est proche de 0 et le système (III.55) devient quasiment explicite. En revanche, lorsque C_d est grand devant 1, f_D est proche de 1 et le système (III.55) devient fortement implicite. On note aussi que le paramètre f_D tel qu'il a été défini reste toujours compris entre 0 et 1.

Le coefficient F apparaissant dans la formule (III.57) est un facteur de sécurité réglable dans le jeu de données. Celui-ci permet de jouer sur le degré d'implication de la résolution des

termes diffusifs apparaissant dans les divers systèmes dans le but d'en renforcer la stabilité. Sa valeur par défaut est 1.0.

• **Equation de conservation de la quantité de mouvement**

On cherche pour toutes les cellules (i,j,k) du maillage, la vitesse $\mathbf{u}_{ijk}^{\mathbf{r}_B}$, solution implicite du système:

$$\begin{aligned} \frac{(M')_{ijk}^B \mathbf{u}_{ijk}^{\mathbf{r}_B} - (M')_{ijk}^n \mathbf{u}_{ijk}^{\mathbf{r}_n}}{\Delta t} = & -\frac{1}{(a^n)^2} \sum_{facesb} [f_p p^B + (1-f_p) p^n]_b \cdot (\mathbf{A}')_b^n - \sum_{facesb} \frac{2}{3} r_b^A k_b^A \cdot (\mathbf{A}')_b^n \\ & + \sum_{facesb} [f_D \mathcal{S}(\mathbf{u}^B) + (1-f_D) \mathcal{S}(\mathbf{u}^n)]_b \cdot (\mathbf{A}')_b^n \\ & - \frac{\mathbf{R}'_{ijk} + S'_{ijk} \mathbf{u}_{ijk}^{\mathbf{r}_B}}{\Delta t} + (M')_{ijk}^n \mathbf{g} - (M')_{ijk}^n \frac{ANC_{ijk}}{\Delta t} \end{aligned}$$

(III.59)

Où les indices b font références aux faces des cellules auxiliaires de quantité de mouvement.

Le calcul de la vitesse $\mathbf{u}_{ijk}^{\mathbf{r}_B}$ est assuré par le sous programme *VSOLVE*.

On note dans l'équation (III.32) la présence du paramètre d'implicitation f_p dans le terme de gradient de pression. Celui-ci est calculé pour chaque cellule (i,j,k) du maillage par la relation :

$$f_p = \begin{cases} 0 & si \quad (C_s)_{ijk}^n \leq \frac{1}{f} \\ 1 - \frac{1}{f(C_s)_{ijk}^n} & si \quad (C_s)_{ijk}^n > \frac{1}{f} \end{cases} \quad (III.60)$$

Où

$$(C_s)_{ijk}^n = \sqrt{\frac{Y_{ijk}^n P_{ijk}^n}{(a^n)^2 r_{ijk}^n} \frac{\Delta t}{\Delta x}} \quad (III.61)$$

Et où f est un coefficient empirique de sécurité réglable dans le jeu de données (l'analyse sur un modèle simplifié mono- dimensionnel impose $f \geq 1$ comme condition suffisante de stabilité). Sa valeur par défaut est 2.5.

• *Calcul des vitesses normales des faces des cellules de base*

Par définition, on a :

$$(uA)_a = \mathbf{u}_a \cdot \mathbf{A}_a \quad (\text{III.62})$$

Où \mathbf{u}_a est la vitesse normale de la face a .

Considérons le bilan de quantité de mouvement d'un volume de contrôle V'' qui se déplace avec le fluide :

$$\frac{D}{Dt} \int_{V''} \mathbf{r} \mathbf{u} dV'' = \mathbf{F} \quad (\text{III.63})$$

Où \mathbf{F} est la somme de toutes les forces appliquées sur le volume V'' .

En multipliant l'équation (III.63) par \mathbf{A} , on obtient:

$$\frac{D}{Dt} \int \mathbf{r} \mathbf{u} \cdot \mathbf{A} dV'' = \mathbf{F} \cdot \mathbf{A} + \frac{D\mathbf{A}}{Dt} \cdot \int \mathbf{r} \mathbf{u} dV'' \quad (\text{III.67})$$

Où le dernier terme de cette équation représente les forces de Coriolis et centrifuges dans le cas du maillage courbé.

La discrétisation de l'équation (III.67) nous donne :

$$\begin{aligned} \left[(M'')_a^B + S_a'' \right] \frac{(uA)_a^B - (uA)_a^t}{\Delta t} = & - \sum_{\text{faces } g} \left\{ [f_p p^B + (1-f_p) p^n] / (a^n)^2 + \frac{2}{3} \mathbf{r}^A k^A \right\} (\mathbf{A}'')_g^n \cdot \mathbf{A}_a \\ & + \frac{\mathbf{A}_a^t - \mathbf{A}_a^n}{\Delta t} \cdot \frac{\mathbf{u}_a^n + \mathbf{u}_b^n + \mathbf{u}_c^n + \mathbf{u}_d^n}{4} \left[(M'')_a^B + S_a'' \right] \end{aligned} \quad (\text{III.68})$$

Où les indices g font références aux faces du volume de contrôle entourant la face a de la cellule de base.

a, b, c et d désignent les quatre sommets de la face a .

La quantité $(uA)_a^t$ est déterminée par la relation :

$$(uA)_a^t = \frac{1}{4} (\mathbf{u}_a^n + \mathbf{u}_b^n + \mathbf{u}_c^n + \mathbf{u}_d^n) \cdot \mathbf{A}_a^n \quad (\text{III.69})$$

Et la vitesse \mathbf{u}^t peut être obtenue par l'équation (III.59) en considérant seulement les termes de la pression :

$$\left[(M')_{ijk}^n + S'_{ijk} \right] \frac{\mathbf{u}_{ijk}^B - \mathbf{u}_{ijk}^t}{\Delta t} = - \frac{1}{(a^n)^2} \sum_{\text{faces } b} \left[f_p P^B + (1-f_p) P^n \right]_b \cdot (\mathbf{A}')_b^n - \sum_{\text{faces } b} \frac{2}{3} r_b^A k_b^A \cdot (\mathbf{A}')_b^n \quad (\text{III.70})$$

Ou bien :

$$\left[(M')_{ijk}^n + S'_{ijk} \right] \frac{\mathbf{u}_{ijk}^t - \mathbf{u}_{ijk}^A}{\Delta t} = \sum_{\text{faces } b} \left[f_D \mathbf{S}(\mathbf{u}^B) + (1-f_D) \mathbf{S}(\mathbf{u}^n) \right]_b \cdot (\mathbf{A}')_b^n \quad (\text{III.71})$$

Le vecteur surface \mathbf{A}_a^t est donné par :

$$\mathbf{A}_a^t = \mathbf{A}_a (\mathbf{x}^n + \mathbf{u}^n \Delta t) \quad (\text{III.72})$$

La masse ajoutée par le spray (S''_{ijk}) dans le volume de contrôle associé à la face a est donnée par la relation :

$$S''_{ijk} = \frac{S'_a + S'_b + S'_c + S'_d}{(M')_a^B + (M')_b^B + (M')_c^B + (M')_d^B} (M'')_a^B \quad (\text{III.73})$$

- **Equation de changement de volume**

Le changement de volume de la cellule de calcul dans la phase lagrangienne est donné par la relation:

$$V_{ijk}^B = V_{ijk}^n + \Delta t \sum_{\text{faces } a} (uA)_a^B \quad (\text{III.74})$$

- **Equation de conservation de l'énergie**

La discrétisation de l'équation d'énergie dans la phase lagrangienne nous donne :

$$\begin{aligned} \frac{M_{ijk}^B I_{ijk}^B - M_{ijk}^n I_{ijk}^n}{\Delta t} = & -\frac{p_{ijk}^n + p_{ijk}^B}{2} \frac{V_{ijk}^B - V_{ijk}^n}{\Delta t} + \sum_{faces a} K_a^n \nabla [f_D T^B + (1-f_D)T^A]_a \cdot (\mathbf{r}^A)_a^n \\ & + \sum_{faces a} (rD)_a^n \left\{ \sum_m h_m(T_a^n) \nabla [f_D Y_m^B + (1-f_D)Y_m^A]_a \right\} \cdot (\mathbf{r}^A)_a^n \\ & + M_{ijk}^B \mathbf{e}_{ijk}^A + V_{ijk}^n (\mathcal{E}_{ijk}^e + \mathcal{E}_{ijk}^s) \end{aligned}$$

(III.75)

- **Détermination de T^A :**

a)- On détermine l'énergie interne (I^t) due à la diffusion d'enthalpie et à la dissipation turbulente :

$$M_{ijk}^B \frac{I_{ijk}^t - I_{ijk}^A}{\Delta t} = M_{ijk}^B \mathbf{e}_{ijk}^B + \sum_{faces a} (rD)_a^n \left\{ \sum_m h_m(T_a^n) \nabla [f_D Y_m^B + (1-f_D)Y_m^A]_a \right\} \cdot (\mathbf{r}^A)_a^n$$

(III.76)

b)- A pression constante, on peut écrire :

$$\Delta h = (C_p)_{ijk}^n (T_{ijk}^A - T_{ijk}^n) \quad (III.77)$$

Où

$$\Delta h = h_{ijk}^t - h_{ijk}^n \quad (III.78)$$

c)- Par définition, on a :

$$h_{ijk}^n = I_{ijk}^n + \frac{p_{ijk}^n}{r_{ijk}^n} \quad (III.79)$$

d)- En faisant la combinaison des équations (III.77)- (III.79), on obtient :

$$T_{ijk}^A = T_{ijk}^n + \frac{1}{(C_p)_{ijk}^n} \left[I_{ijk}^t - I_{ijk}^n + p_{ijk}^n \left(\frac{1}{r_{ijk}^A} - \frac{1}{r_{ijk}^n} \right) \right] \quad (III.80)$$

Le calcul de T^A est assuré par le sous-programme *EXDIF*.

La forme finale de l'équation d'énergie utilisée dans la phase B est obtenue en utilisant les équations (III.25),(III.76) et (III.80) :

$$M_{ijk}^B \frac{I_{ijk}^B - I_{ijk}^t}{\Delta t} = -\frac{p_{ijk}^n + p_{ijk}^B}{2} \frac{V_{ijk}^B - V_{ijk}^n}{\Delta t} + \sum_{faces a} K_a^n \nabla [f_D T^B + (1-f_D) T^t]_a \cdot (\mathbf{A}^n)_a \quad (III.81)$$

• *Equations du modèle de turbulence k-e*

On cherche pour chaque cellule (i,j,k) du maillage, l'énergie cinétique turbulente k_{ijk}^B et son taux de dissipation e_{ijk}^B , solutions implicites des systèmes :

$$\begin{aligned} \frac{M_{ijk}^B k_{ijk}^B - M_{ijk}^A k_{ijk}^A}{\Delta t} = & -\frac{2}{3} \mathbf{r}_{ijk}^B \frac{V_{ijk}^B - V_{ijk}^n}{\Delta t} \left[(1-f_{ijk}) k_{ijk}^n + f_{ijk} k_{ijk}^B \right] \\ & + V_{ijk}^n \left[f_D \mathbf{S}(\mathbf{u}^B) : \nabla \mathbf{u}^B + (1-f_D) \mathbf{S}(\mathbf{u}^n) : \nabla \mathbf{u}^n \right]_{ijk} \\ & + \sum_{faces a} \frac{m_a^n}{Pr_k} \nabla [f_D k^B + (1-f_D) k^A]_a \cdot \mathbf{A}_a - M_{ijk}^B \frac{e_{ijk}^n}{k_{ijk}^n} k_{ijk}^B \end{aligned} \quad (III.82)$$

Et

$$\begin{aligned} \frac{M_{ijk}^B e_{ijk}^B - M_{ijk}^A e_{ijk}^A}{\Delta t} = & -\left(\frac{2}{3} C_{e1} - C_{e1} \right) \mathbf{r}_{ijk}^B \frac{V_{ijk}^B - V_{ijk}^n}{\Delta t} \left[(1-f_{ijk}) e_{ijk}^n + f_{ijk} e_{ijk}^B \right] \\ & + \sum_{faces a} \frac{m_a^n}{Pr_e} \nabla [f_D e^B + (1-f_D) e^A]_a \cdot \mathbf{A}_a \\ & + C_{e1} \frac{e_{ijk}^n}{k_{ijk}^n} V_{ijk}^n \left[f_D \mathbf{S}(\mathbf{u}^B) : \nabla \mathbf{u}^B + (1-f_D) \mathbf{S}(\mathbf{u}^n) : \nabla \mathbf{u}^n \right]_{ijk} \\ & - C_{e2} M_{ijk}^B \frac{e_{ijk}^n}{k_{ijk}^n} e_{ijk}^B \end{aligned} \quad (III.83)$$

Où le paramètre f_{ijk} , donné par :

$$f_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{si } V_{ijk}^B - V_{ijk}^n > 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{III.84})$$

permet d'éviter l'apparition de valeurs négatives pour k et e lors de fortes variations de volume au cours de la phase lagrangienne.

- **Equations d'état**

Les équations d'état (II.1) et (II.2) sont approximées par les relations suivantes :

$$P_{ijk}^B = \frac{M_{ijk}^B}{V_{ijk}^B} R_0 \left[\sum_m (Y_m)_{ijk}^B / W_m \right] T_{ijk}^B \quad (\text{III.85})$$

$$I_{ijk}^B = I_{ijk}^t + (C_v)_{ijk}^t [T_{ijk}^B - T_{ijk}^t] \quad (\text{III.86})$$

Où : I_{ijk}^t est déterminée par l'équation (III.76).

T_{ijk}^t et $(C_v)_{ijk}^t$ doivent satisfaire les relations suivantes :

$$I_{ijk}^t = \sum_m (Y_m)_{ijk}^B I_m(T_{ijk}^t) \quad (\text{III.87})$$

$$(C_v)_{ijk}^t = \sum_m (Y_m)_{ijk}^B C_{vm}(T_{ijk}^t) \quad (\text{III.88})$$

- **Calcul de la vitesse de la gouttelette**

Quand la vitesse de gaz de la phase B est connue, la vitesse de la gouttelette de la phase B est alors calculé dans le subroutine PACCEL de l'équation suivante :

$$\frac{v_p^B - v_p'}{\Delta t} = D_p (u_{ijk}^B + u_p' - v_p^B) \quad (\text{III.89})$$

III.3.3 Algorithme *SIMPLE* :

Un algorithme itératif de type *SIMPLE* est utilisé pour la résolution du système couplé associant vitesse, pression et température dans les équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie.

- Phase d'initialisation :

On commence par prédire la pression P_{ijk}^p dans chaque cellule (i,j,k) à l'aide d'une extrapolation linéaire utilisant les pressions $(P_{ijk}^B)^{n-1}$ et $(P_{ijk}^B)^{n-2}$ des deux pas de temps précédents :

$$P_{ijk}^p = (P_{ijk}^B)^{n-1} + \frac{\Delta t^n}{\Delta t^{n-1}} \left[(P_{ijk}^B)^{n-1} - (P_{ijk}^B)^{n-2} \right] \quad (\text{III.90})$$

Le calcul de P_{ijk}^p est assuré par le sous-programme *PINIT*.

- Phase itérative :

1) La pression P_{ijk}^p est fixée et on calcule la vitesse \mathbf{u}_{ijk}^p à l'aide de l'équation (III.59). Le calcul de la vitesse \mathbf{u}_{ijk}^p est assuré par le sous programme *VSOLVE*.

2) On calcule la température T_{ijk}^p qui peut être obtenue en faisant la combinaison des équations

(III.81), (III.85) et (III.86). Celle-ci est déterminée dans le sous-programme *TSOLVE*.

$$T_{ijk}^p = \left\{ T_{ijk}^t + \frac{P_{ijk}^n + P_{ijk}^p}{2(C_v)_{ijk}^t} \frac{V^n}{M_{ijk}^B} + \frac{\Delta t}{M_{ijk}^B (C_v)_{ijk}^t} \left[\sum_{\text{faces}} K_a^n \nabla [f_D T^B + (1-f_D) T]_a \cdot (\mathbf{A})_a^n \right] \right\} \\ / \left\{ 1.0 + \frac{P_{ijk}^n + P_{ijk}^p}{2(C_v)_{ijk}^t P_{ijk}^p} R_0 \left[\sum_m (Y_m)_{ijk}^B / W_m \right] \right\} \quad (\text{III.91})$$

3) On calcule les volumes V_{ijk}^p des cellules à l'aide de l'équation :

$$V_{ijk}^p = \frac{M_{ijk}^B}{P_{ijk}^p} R_0 \left[\sum_m (Y_m)^B / W_m \right] T_{ijk}^p \quad (\text{III.92})$$

4) On calcule une pression corrigée P_{ijk}^{cor} , tenant compte des nouvelles valeurs \mathbf{u}_{ijk}^p , T_{ijk}^p et V_{ijk}^p . Le calcul de P_{ijk}^{cor} est assuré par le sous programme *PSOLVE*.

5) On revient à l'étape 1 tant que la pression n'a pas convergé.

Les résolutions des systèmes implicites rencontrés tout au long de la phase B sont effectuées à l'aide d'une méthode itérative du type 'résidus conjugués'.

III.4 Phase C (explicite) :

On tient compte dans cette phase de tous les termes convectifs qui n'ont pas été résolus au cours de la phase lagrangienne.

III.5 Conditions aux limites :

Etant donné que c'est la méthode des volumes finis qui est utilisée, les conditions aux limites des variables dépendantes sont prescrites sous forme de flux à travers la face de la cellule qui est située sur la frontière.

Considérons une cellule adjacente à la paroi (voir figure III.12). Les points e , f , g et h sont situés sur la paroi, et les points a , b , c et d sont situés dans le fluide.

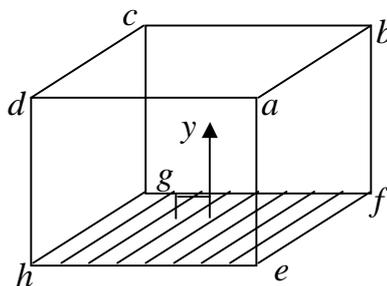


Figure III.12 : Cellule adjacente à la paroi

La distance y de la paroi est donnée par :

$$y = \left\{ \frac{1}{4} \left[(\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_e) + (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_f) + (\mathbf{x}_c - \mathbf{x}_g) + (\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_h) \right] \cdot \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{A}_a|} \right\} \quad (\text{III.93})$$

- *Condition pour la vitesse :*

La condition pour la vitesse est imposée sous forme d'un flux de quantité de mouvement à travers la face durant un temps $\Delta t : t_{paroi} \times \text{surface} \times \text{l'incrément de temps}$.

Où

$$t_{paroi} = r_w (u^*)^2 \quad (\text{III.94})$$

u^* est la vitesse de cisaillement qui peut être déterminée par la relation :

$$\frac{u}{u^*} = \begin{cases} \frac{1}{k} \ln \left[C_{lw} \left(\frac{yu}{n_l} \right)^{7/8} \right] + B & \frac{yu}{n_l} \geq R_c \\ \left(\frac{yu}{n_l} \right)^{1/2} & \frac{yu}{n_l} \leq R_c \end{cases} \quad (\text{III.95})$$

Avec

$$C_{lw} = 0.15, k = 0.4327, B = 5.5 \text{ et } R_c = 114.$$

n_l est la viscosité cinématique laminaire.

u est la vitesse tangentielle à la paroi, donnée par:

$$u = \left[\frac{1}{4} (u_a + u_b + u_c + u_d) \right] \quad (\text{III.96})$$

- *Condition pour la température:*

Là aussi, la condition pour la température est imposée sous forme d'un flux de chaleur durant un temps $\Delta t : J_w \times \text{surface} \times \text{l'incrément de temps}$.

Où J_w peut être déterminé par la relation:

$$\begin{cases} \frac{T}{T_w} = 1 + \frac{J_w Pr u^*}{C_p t_w T_w} \left[\frac{u}{u^*} + R_c^{1/2} \left(\frac{Pr_l}{Pr} - 1 \right) \right] & \frac{yu}{n_l} > R_c \\ \frac{T}{T_w} = 1 + \frac{J_w}{K_l T_w} y = 1 + \frac{J_w Pr u^*}{C_p t_w T_w} \frac{u}{u^*} & \frac{yu}{n_l} \leq R_c \end{cases} \quad (\text{III.97})$$

Avec

K_l et Pr_l sont respectivement le coefficient de diffusion de la chaleur et le nombre de Prandtl laminaire.

- *Condition pour k:*

$$\frac{\partial k}{\partial y} = 0 \quad (\text{III.98})$$

- *Condition pour e :*

$$e = \frac{1}{k} \frac{(u^*)^3}{y} = \frac{C_m^{3/4}}{k} \frac{k^{3/2}}{y} \quad (\text{III.99})$$

III.6 Organigramme de calcul du code KIVA-II :

Le code KIVA-II est constitué d'un ensemble de sous-routines contrôlées par un petit programme principal appelé KIVA. On propose ci-après [fig.III.13] l'organigramme du code KIVA-II. On trouvera dans l'ordre de gauche à droite : les différentes tâches effectuées, les sous-programmes qui s'en chargent de ces tâches et la liste des sous-programmes ou fonctions auxiliaires utilisées.

Les commentaires au début de chaque sous-routine donnent une description du but de calcul, les sous-routines qui l'appellent et les sous-routines et fonctions appelées par celle-là.

Chapitre IV**RESULTATS ET DISCUSSION****IV.1 Définition du problème :**

Ce modeste travail consiste à étudier le comportement du spray dans une chambre de combustion d'un moteur Diesel à injection directe (moteur FL912 « CMT »), (figure IV.1), en utilisant le code KIVA-II (simulateur des écoulements réactifs turbulents, multidimensionnels et instationnaires), lors de l'injection et la combustion.

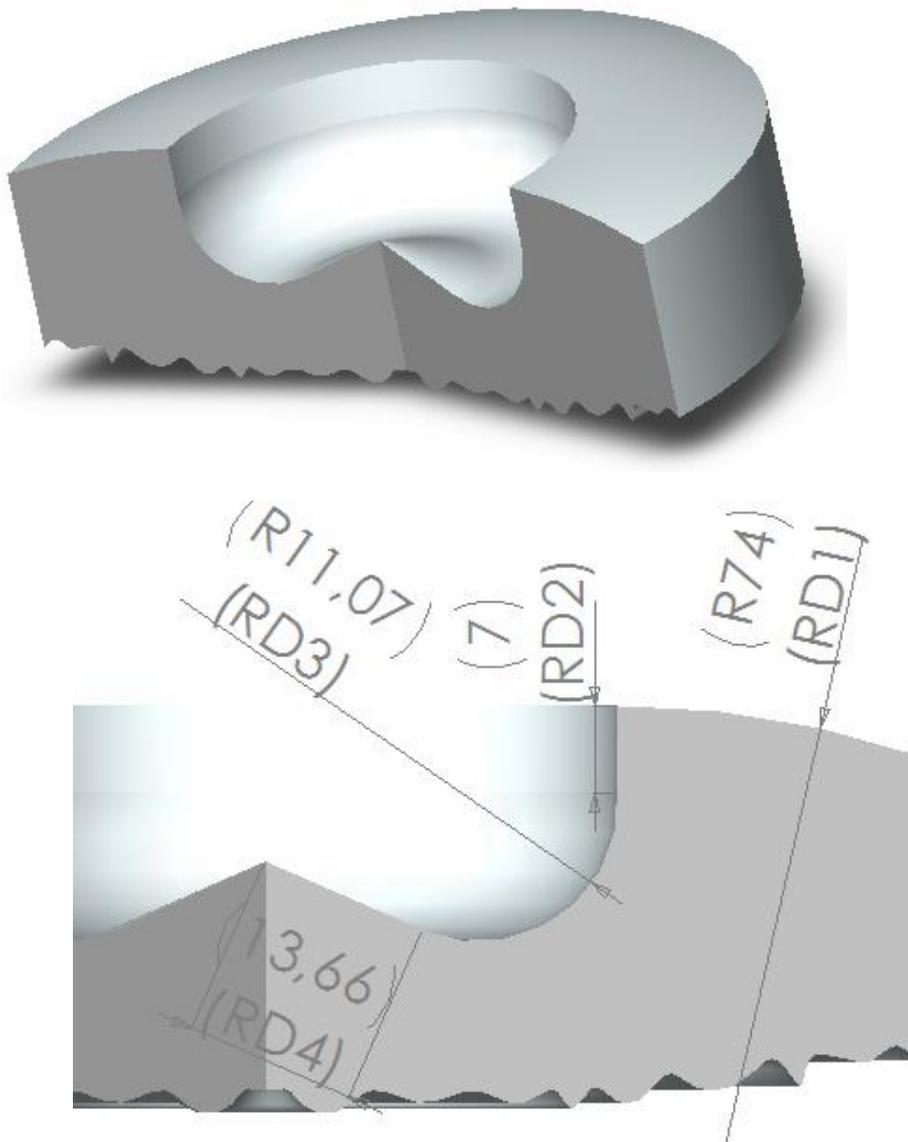


Figure IV.1 : Géométrie du problème

Le phénomène étudié est axisymétrique. L'espace occupé par le spray injecté est un cône creux axisymétrique (figure IV.2). La quantité de carburant injectée est une fonction du temps (une demi-sinusoïde) : en début d'injection (-15° du PMH) le débit est nul ; il atteint une valeur maximale à -8.75° du PMH ; la fin d'injection est à -2.5° du PMH.

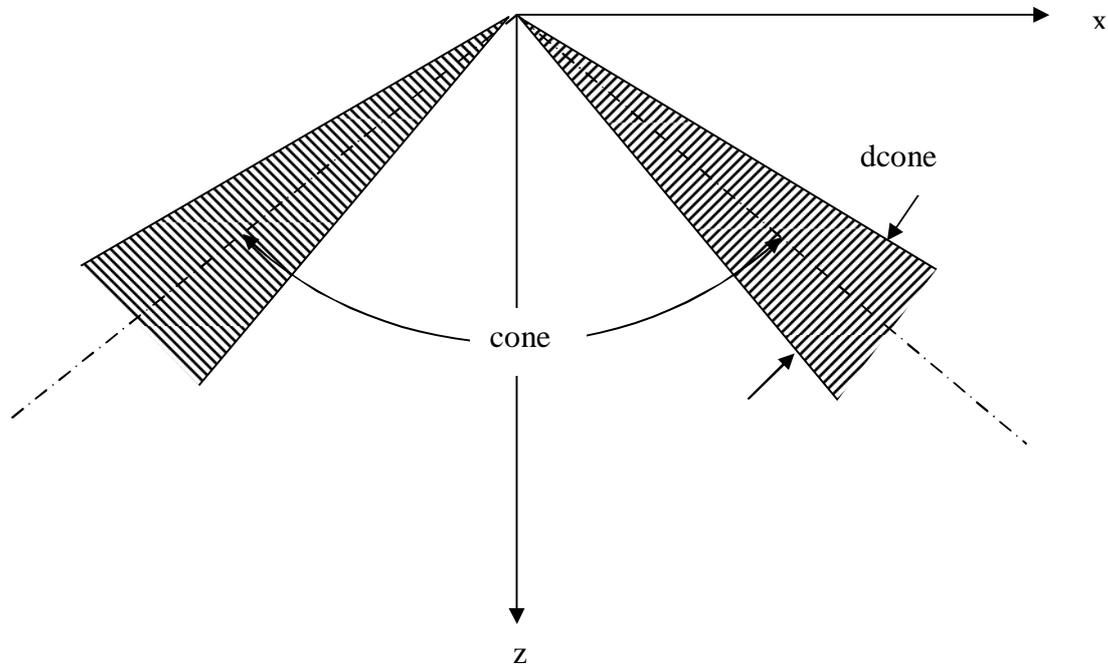


Figure IV.2 : Forme du jet

La simulation commence lors de la phase de compression à 90° d'angle de rotation du vilebrequin avant le PMH et se termine à 90° après le PMH.

Pour le calcul nous avons utilisé les données suivantes :

- Combustible : $DF_2(C_{12}H_{26})$
- Nombre totale des particules du combustible injectées : 2000 particules
- Pas de temps initial : $dt_i = 10^{-7}$ s.
- Masse volumique de le DF_2 à 350k : 0.7952 g/cm^3
- Masse volumique initiale de l'oxygène : $2.4257 \times 10^{-4} \text{ g/cm}^3$.
- Masse volumique initiale de l'azote : $7.9851 \times 10^{-4} \text{ g/cm}^3$.
- Schéma convectif : QSOU.
- Modèle de combustion :

§ Si $\tau_c < \tau_t$: le taux de réaction est donné par le modèle de Magnussen.

§ Si $\tau_c > \tau_t$: le taux de réaction est donné par la loi d'Arrhenius suivante :

$$k = 3.0 \times 10^{11} \left(\frac{r_{C_{12}H_{26}}}{W_{C_{12}H_{26}}} \right)^{0.25} \left(\frac{r_{O_2}}{W_{O_2}} \right)^{1.5} \exp \left(- \frac{1.5078 \cdot 10^4}{T} \right)$$

- force de gravité négligée.
- $T_{\text{piston}} = T_{\text{culasse}} = T_{\text{cylindre}} = 400\text{K}$.
- Energie cinétique turbulente initiale : $0.1 \text{cm}^2/\text{s}^2$.
- Tolérances pour la convergence de la méthode des résidus conjugués pour les termes implicites diffusifs :

§ De gradients de pression : $eps_p = 10^{-4}$.

§ Des espèces chimiques : $eps_y = 10^{-3}$.

§ De la quantité de mouvement : $eps_v = 10^{-3}$.

§ De la chaleur : $eps_t = 10^{-3}$.

§ De l'énergie cinétique turbulente : $eps_k = 10^{-3}$.

§ Du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente : $eps_\epsilon = 10^{-3}$.

- Modèle de fractionnement des gouttelettes : le modèle TAB ("Taylor Analogy Breakup").
- Modèle de dispersion turbulente : le modèle de turbulence k- ϵ

Les dimensions de la chambre de combustion et les caractéristiques du moteur sont résumées dans le tableau IV.1.

IV.2 Génération de maillage :

Le code KIVA-II se base sur une formulation dans un espace géométrique cartésien (x,y,z) . Il est applicable pour le calcul des formes cylindriques (CYL=1.0) et parallélépipédiques (CYL=0.0), en 2 ou 3 dimensions. Le maillage est composé d'un bloc de cellules dans l'espace logique, de NX cellules suivant la direction x, NY cellules suivant la direction y et NZ cellules suivant z. Le maillage peut être représenté selon 5 types valables en code KIVA-II, voir figure (IV.3) qui sont déterminés par la spécification de NY, CYL, JSECTR, et THSECT, dans le fichier des données. Dans le présent travail la géométrie considérée étant axisymétrique : NY=1, CYL=1.0, JSECTR=1.

Le sous-programme SETUP contient un générateur de maillage automatique qui permet de créer des maillages en 2D ou en 3D (cartésiens ou cylindriques) pour une large variété de formes des pistons et des culasses (tête du cylindre), pour les moteurs à allumage commandé et pour les moteurs Diesel. Le générateur nécessite seulement de mettre les données de la géométrie sous forme d'un tableau qui fait partie du fichier de données.

Dans notre cas le maillage est comme suit voir figure (IV.4) : 20 cellules dans la direction radiale et une cellule dans la direction azimutale. Pour la direction selon l'axe Z, le maillage démarre avec 30 cellules, lors de la phase de compression. Le nombre de cellules diminue au fur et à mesure que le piston avance vers la culasse, jusqu'à un nombre minimal de 2 cellules entre la culasse et le plat du piston. Après on aura une opération inverse lors de la phase de détente où le piston s'éloigne de la culasse et on voit clairement que le nombre de cellules augmente.

Diamètre de cylindre	92.0×10^{-3} m.
Course du piston	140.0×10^{-3} m.
Espace entre la culasse et le plat du piston au PMH (<i>squish</i>)	1.2×10^{-3} m.
Longueur de la bielle	250.0×10^{-3} m.
Diamètre de l'injecteur	0.27×10^{-3} m.
Vitesse de rotation	1600 tours/minute
Début d'injection	15° d'angle de rotation de vilebrequin avant le PMH
Durée d'injection	12.5° d'angle de rotation du vilebrequin
Mode d'injection	Injection suivant une demi-sinusoïde (<i>half sine wave</i>)
Masse totale injectée du combustible	0.049 g
Vitesse d'injection du combustible	200 m/s
Pression initiale	1.2 bar
Température initiale de l'air	400 k
Angle d'inclinaison du jet de combustible	60 degrés (de l'axe de cylindre)
Angle d'épaississement du jet de combustible	10 degrés
Température du combustible liquide injecté	350 k

Tableau IV.1 : Caractéristiques du moteur FL912 « CMT ».

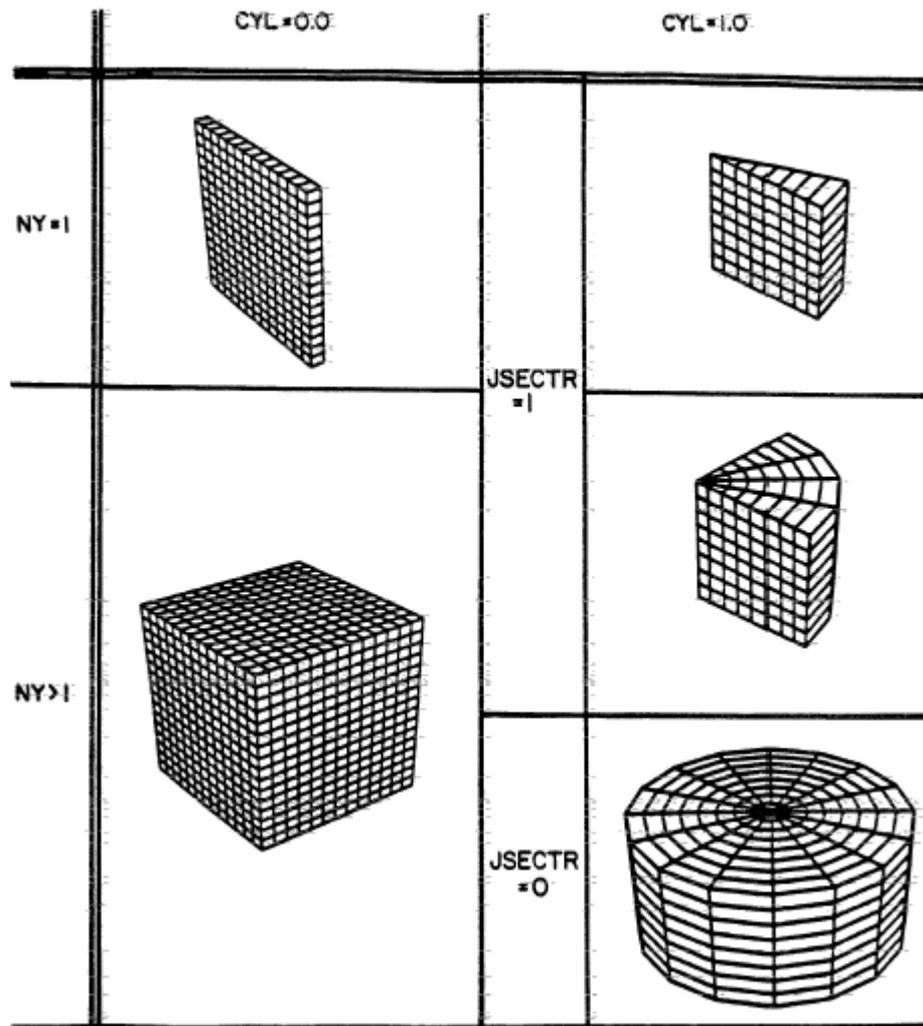


Figure IV.3 : les 5 types du maillage valables au Code KIVA-II

IV.3 Discussion des résultats :

Les résultats de la simulation numérique pour le champ d'écoulement et la combustion se divisent en deux parties, la première correspond à la phase gazeuse, et la deuxième concerne la phase liquide.

IV.3.1 la phase gazeuse :

Les résultats de cette phase ont été traduits sous forme des contours des fractions massiques des différentes espèces : combustible, dioxyde de carbone et oxygène, ainsi que des champs des vecteurs de vitesses, des isothermes et des isobares.

IV.3.1.1 Champ d'écoulement et les contours des isobares :

Les figures (IV.5) représentent le champ des vecteurs de vitesses lors de la compression et la détente à différentes positions du piston.

En ce qui concerne la phase de compression on voit clairement qu'il y a des vitesses importantes au niveau du piston (figure IV.5.1, IV.5.2, IV.5.3) et des vitesses faibles près de la culasse.

A -15.59° du PMH, l'air qui se trouvait entre le plat du piston et la culasse, commence à se diriger vers le centre au fur et à mesure que le piston se rapproche de la culasse, figure (IV.5.4). Donc l'air subit une accélération par l'effet intermédiaire de l'augmentation de pression dans l'espace compris entre le plat du piston et la culasse, et ceci est justifié par la figure (IV.6.1) qui montre clairement une valeur maximale de la pression entre le plat du piston et la culasse.

Après l'injection (13° avant le PMH), l'écoulement devient de plus en plus rapide entre le plat du piston et la culasse.

La figure (IV.5.5) montre qu'il y a une nouvelle vitesse qui apparaît au centre du bol (vitesse d'injection), et aussi deux petites zones de recirculation qui deviennent grandes au fur et à mesure que le piston approche de la culasse. L'apparition de ces zones de recirculation est due aux gradients de vitesse élevés entre le combustible injecté et l'air. Ceci est justifié par l'apparition de deux zones dans les contours des isobares (figure IV.6.3, IV.6.8, IV.6.9) où il y a une dépression ce qui confirme l'existence de deux zones de recirculation.

Pour la phase de détente, les figures (IV.5.13), (IV.5.14) montrent qu'il y a une zone de recirculation qui se développe entre le plat du piston et la culasse due à la dépression confirmée par les contours des isobares (figures IV.6.10, IV.6.11). Cette dernière provoque l'aspiration des gaz contenus dans le bol et les oblige à combler le vide laissé derrière le plat du piston.

IV.3.1.2 Les isothermes :

Les figures (IV.7.1)-(IV.7.12) représentent les isothermes à différentes positions du vilebrequin.

Avant l'injection, on observe une augmentation uniforme de la température entre le piston et la culasse (figure IV.7.1), ce qui est consistant avec l'augmentation de la pression (figure IV.6.1) déjà notée.

Les figures (IV.7.1)- (IV.7.7) représentent la période d'injection où on observe dans un premier temps un noyau relativement froid au cœur du jet du combustible. Ceci est dû à l'absorption de l'énergie pour chauffer les gouttelettes jusqu'à la température d'évaporation puis l'évaporation des gouttelettes du combustible. Donc on a un phénomène de changement de phase où il y a un échange d'énergie (chaleur latente de vaporisation) entre les gaz chauffés et les gouttelettes du combustible.

A la fin d'injection, (figure IV.7.7) on voit clairement que le noyau froid existe encore, donc on peut dire que le combustible ne s'évapore pas complètement à la fin de l'injection, ceci est justifié par les figure (IV.13.6) où on constate quelques particules (gouttelettes) du combustible.

En se référant aux figures (IV.7.6) et (IV.7.7), on note que la combustion démarre sur la périphérie du spray injecté. Cela s'explique par le fait que dans cette zone périphérique le mélange est stoechiométrique et donc très favorable à l'inflammation. Les autres régions le sont moins puisqu'elles sont trop riches ou trop pauvre en combustible.

Après l'évaporation complète, on constate une augmentation brutale de la température. Dans la phase de détente, une diminution de la température est remarquée résultant des deux effets combinés de fin de combustion et de détente.

IV.3.1.3 Les contours des fractions massiques du combustible:

L'évolution des fractions massiques du combustible est montrée par les figures (IV.8.1)-(IV.8.11).

Pendant la période d'injection, on voit clairement que la zone riche en combustible croît jusqu'à la position de 8° avant le PMH, après elle commence à diminuer au début de la phase de détente.

IV.3.1.4 Les fractions massiques de l'oxygène et du dioxyde de carbone :

Les figures (IV.9.1)-(IV.9.11) et (IV.10.1)-(IV.10.11) illustrent l'évolution des fractions massiques de l'oxygène et le dioxyde de carbone.

Avant l'injection, la fraction massique du dioxyde de carbone est nul, après l'injection à 13° avant le PMH, on constate une petite quantité de dioxyde de carbone au niveau du jet, ceci est consistant avec la diminution de l'oxygène (figure IV.9.1).

La fraction massique du dioxyde de carbone croît tant que la combustion n'est pas terminée. L'inverse est vrai pour la fraction massique de l'oxygène qui diminue, et ne reste de cette

fraction qu'une quantité régnante dans le coin entre le piston et la paroi du cylindre. Le combustible n'atteint pas cette région et par conséquent aucune combustion ne peut avoir lieu.

IV.3.2 La phase liquide :

Dans cette phase les résultats sont présentés concernant la position et le nombre de particules avec des couleurs représentant les tailles, les températures et les vitesses absolues des gouttes, ainsi que des champs des vecteurs vitesses absolues des gouttes.

Une étude paramétrique a été réalisée où les effets de la vitesse d'injection du spray, l'angle d'injection et l'épaisseur du jet sur l'aerothermochimie, ont été mis en évidence. En fait les comportements de la pression moyenne, la température moyenne, la masse du combustible, la masse du CO_2 , et la longueur de pénétration ont été analysés.

IV.3.2.1 Evolution des positions des particules :

- **Couleur des gouttes représentant la vitesse absolue des gouttes :**

Les figures (IV.11.1) _ (IV.11.6) montrent les vecteurs des vitesses absolues des gouttes.

On voit clairement que tous les vecteurs vitesses ont presque la même direction.

La position du point qui représente l'injecteur, c'est-à-dire le point d'où les particules sortent, se déplace légèrement d'une position du piston à l'autre. Cela est attribué à la « compression » des deux cellules comprises entre le plat du piston et la culasse (*squish*). La position de l'injecteur qui est fixée au premier nœud de vitesse près de la paroi a tendance à se déplacer donc avec le nœud de vitesse vers le haut pendant la période de compression figures (IV.11).

Les positions des particules avec des couleurs représentant la vitesse absolue des gouttes sont illustrées sur les figures (IV.12.1)-(IV.12.6).

On remarque que la pénétration du jet à l'intérieur de la chambre de combustion c'est-à-dire'' la longueur du jet '' au début de l'injection est maximale (à 15° avant le PMH) par rapport aux autres positions de piston.

Ce retard à l'évaporation des gouttes au début d'injection pourrait s'expliquer par le fait que la combustion n'a pas encore démarrée et que la température pas très élevée. Des gaz frais ne permettent pas une augmentation rapide de la température des gouttes. Après cela, le taux d'évaporation augmente brusquement, figure (IV.12.2)-(IV.12.6)

Les vitesses des gouttes au début de l'injection sont de l'ordre 20000cm/s. En s'éloignant de l'injecteur les vitesses des gouttes diminuent et deviennent appréciablement inférieures à 20000 cm/s.

On remarque un léger ralentissement de particules qui s'éloignent de l'injecteur puisqu'elles subissent de façon continue une force de traînée qui est opposée au mouvement des particules. Il à noter que le jet de particules s'épaissit selon l'angle prescrit de 10°. La simulation est basée sur l'utilisation d'un nombre aléatoire qui donne une orientation à chaque particule injectée dans un intervalle bien déterminé. Le centre du jet fait bien un angle de 60° avec l'axe du cylindre.

- **Couleur des gouttes représentant la taille des gouttes :**

Les figures (IV.13.1)- (I3.10.6) illustrent la répartition des particules selon leurs tailles dans le plan XZ. Etant donné qu'une distribution statistique de la taille des gouttelettes par rapport à la moyenne (smr : Sauter Mean Radius) est utilisée, on constate l'existence des gouttelettes de taille légèrement supérieure et légèrement inférieure par rapport à la valeur moyenne de rayon (smr= 0.4 mm). La coalescence des gouttes peut aussi donner des tailles de gouttes élevées.

On constate aussi que le nombre des gouttes varie d'une position de vilebrequin à l'autre, cela est dû aux différents phénomènes existant comme l'évaporation, la coalescence qui diminue le nombre des gouttes et le fractionnement qui l'augmente.

Pour un angle de vilebrequin aux environs de 8.04° avant le PMH le nombre des gouttes dans la chambre de combustion atteint un maximum puis diminue jusqu'à l'évaporation complète des gouttes.

La figure (IV.13.6) montre bien qu'à la fin d'injection il existe quelques gouttes qui ne sont pas encore évaporées. Donc on peut dire que l'évaporation ne s'achève pas en même temps que l'injection.

- **Couleur des gouttes représentant la température des gouttes :**

Les figures (IV.14.1)-(IV.14.6) illustrent la distribution de la température des gouttes.

Pour les figures (IV.14.1) et (IV.14.2) toutes les gouttes ont la même température. Dans les figures (IV.14.3)-(IV.14.6) on remarque que les températures des gouttes différent. Il y a des gouttes qui ont des températures très élevées proches de la température de saturation du combustible. On peut constater que les gouttes qui ont des valeurs de température très élevées sont de petites tailles.

IV.3.2.2 Effet de l'angle d'injection (cone) :

L'effet de l'angle d'injection (cone) sur la pression moyenne, température moyenne, masse du combustible, masse totale du CO_2 , et la longueur de la pénétration du jet (longueur du jet) est illustré sur les figures (IV.15.1)-(IV.15.6).

Des figures (IV.15.1) et (IV.15.2) on constate que l'angle d'injection cone a un effet sur la pression moyenne et par conséquent sur la température moyenne du mélange, on remarque que la pression moyenne augmente à chaque fois que l'on augmente l'angle d'injection et ceci est consistant avec les résultats des figures (IV.15.3) et (IV.15.4) qui montrent l'augmentation de la consommation du combustible entraînant un accroissement de la masse du dioxyde de carbone.

Pour l'angle d'injection 60° on remarque d'après les figures (IV.15.5) et (IV.15.7) qu'il y a encore des gouttelettes qui persistent dans la chambre de combustion sans s'évaporer jusqu'à la fin du cycle. Ceci est du probablement à l'impact des gouttelettes avec la paroi du piston.

De la figure (IV.5.6), on remarque que la longueur de la pénétration pour l'angle d'injection (cone= 120°) est élevée relativement à celle de l'angle d'injection 90° .

IV.3.2.3 Effet de la vitesse d'injection :

Les figures (IV.16.1)-(IV.16.6) représentent l'évolution de la pression moyenne, température moyenne, masse du combustible, masse du CO_2 , et la longueur de la pénétration du jet en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin en variant la vitesse d'injection.

Les figures (IV.16.1) et (IV.16.2) illustrent le grand effet de la vitesse d'injection sur la pression moyenne et par conséquent sur la température moyenne. On remarque qu'au fur et à mesure que l'on augmente la vitesse d'injection la pression moyenne devient de plus en plus importante, ce qui engendre une température moyenne très élevée. Ceci est consistant avec les résultats illustrés sur les figures (IV.16.3) et (IV.16.4) où on constate que le combustible se consomme avec une vitesse de plus en plus élevée, et le taux de production de CO_2 augmente avec l'augmentation de vitesse d'injection.

Donc on peut dire que la vitesse d'injection a un effet très important sur le taux d'évaporation du combustible, et ceci est justifié aussi par les figures (IV.16.7) où pour la vitesse d'injection 50m/s les dernières gouttes de combustible existent encore à la position qui correspond au PMH. Pour la vitesse 100m/s les gouttes persistent jusqu'à la position de 2° avant le PMH. Pour la vitesse d'injection 200m/s, les dernières gouttes se trouvent à 2.5° avant le PMH.

En ce qui concerne la vitesse 300m/s, on a un taux d'évaporation très élevé et par conséquent une très grande pression moyenne. Cependant, il est à noter sur les figures (IV.16.5) et (IV.15.7) qu'il y a quelques gouttes qui ne s'évaporent pas jusqu'à la fin du cycle. Cela peut être dû au fait que la vitesse d'injection des particules est tellement grande qu'elles adhèrent à la paroi du piston avant qu'elles n'aient le temps de s'évaporer.

La figure (IV.16.6) montre l'évolution de la longueur de la pénétration en fonction de l'angle de vilebrequin pour différentes valeurs de vitesses d'injection.

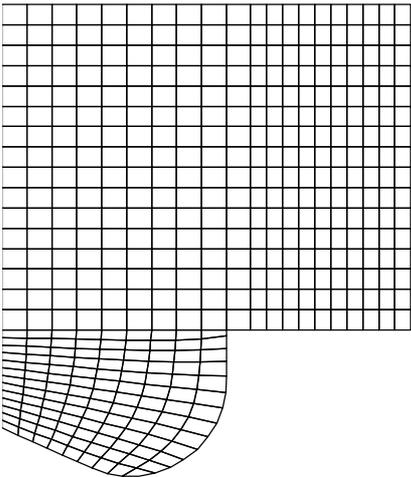
Dans le cas de la vitesse d'injection 50m/s on remarque que la longueur de la pénétration du jet est élevée relativement à ceux des vitesses d'injection 100m/s et 200m/s. ceci est justifié par la relation qui existe entre la vitesse d'injection et le taux d'évaporation ; plus la vitesse est faible plus le taux d'évaporation est faible ce qui donne à la goutte une durée de vie plus longue encore. Cela lui permet de parcourir une distance plus grande. L'inverse est vrai pour les vitesses d'injection élevées.

IV.3.2.4 Effet de l'épaisseur du jet (dcône) :

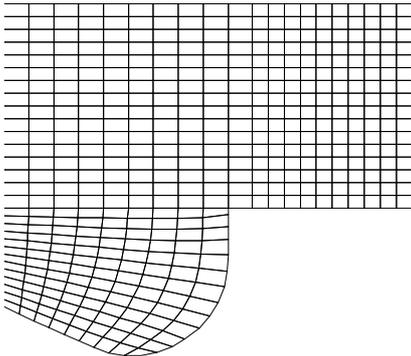
Les figures (IV.17.1)-(IV.17.6) illustrent l'effet de l'épaisseur du jet sur l'évolution de la pression moyenne, température moyenne, masse du combustible, masse du CO₂ et la longueur de la pénétration du jet en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin.

On voit clairement que la variation de l'épaisseur du jet n'a presque aucun effet sur le comportement du spray et la pression moyenne.

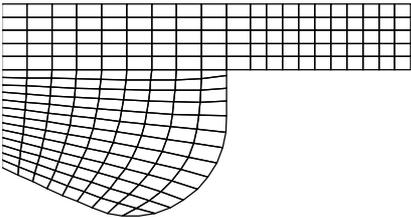
L'influence de l'angle de l'épaississement du jet sur l'évolution de la répartition des gouttes dans la chambre de combustion est mise en évidence sur les figures (IV.17.6)



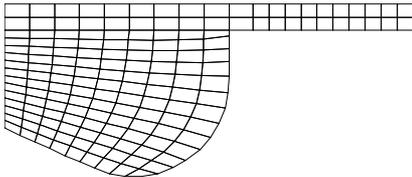
1) 60 degres avant le PMH



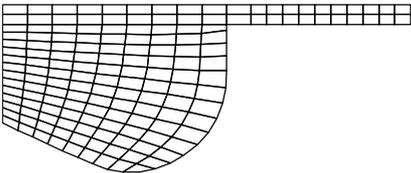
2) 45 degres avant le PMH



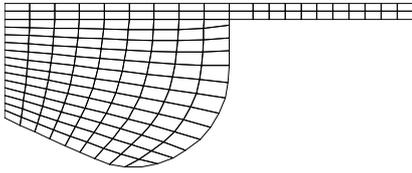
3) 25 degres avant le PMH



4) 15.59 degres avant le PMH

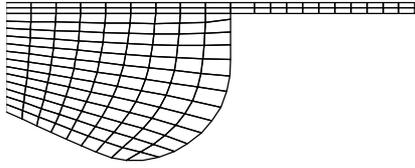


5) 12 degres avant le PMH

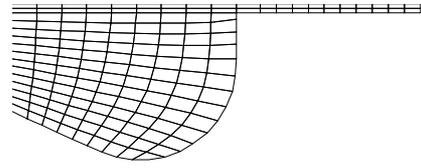


6) 10 degres avant le PMH

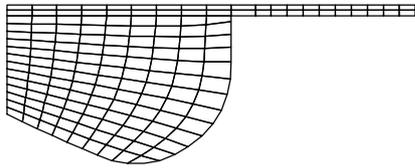
Fig.IV.4 : Les maillages g n r s   diff rentes positions du piston.



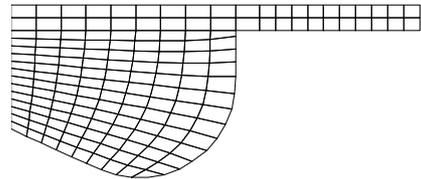
7) 5 degres avant le PMH



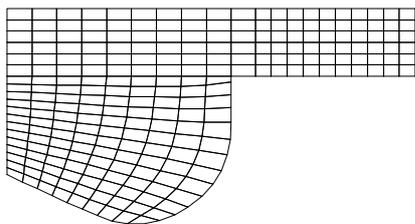
8) 0.0068 degres avant le PMH



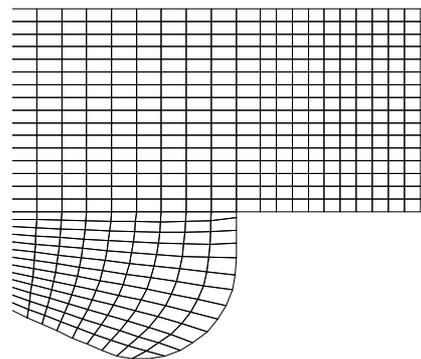
9) 4.99 degres avant le PMH



10) 14.98 degres avant le PMH



10) 24.70 degres avant le PMH



10) 44.70 degres avant le PMH

Fig.IV.4 : (Suite)

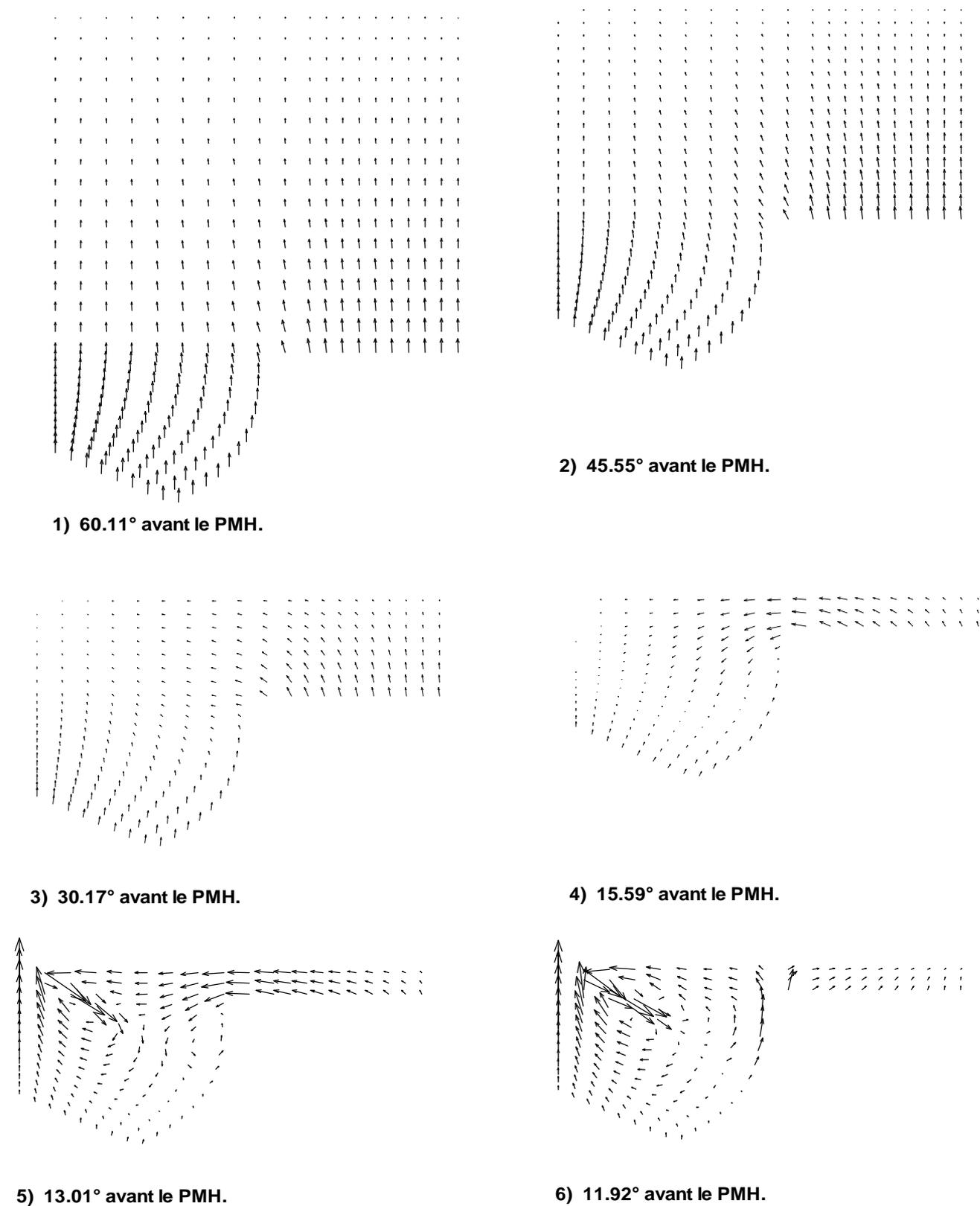
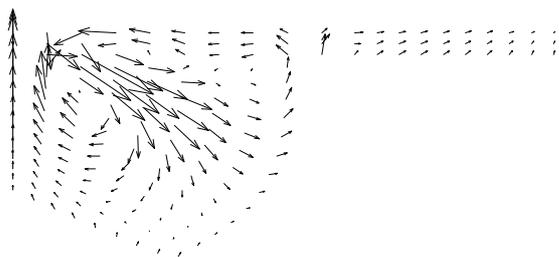
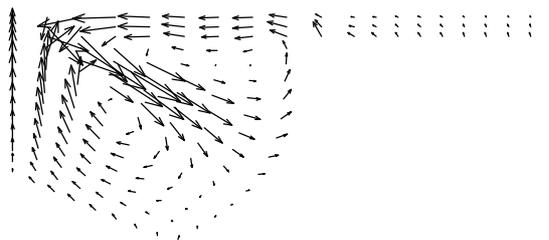


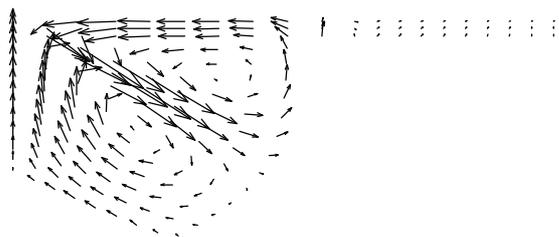
Fig.IV.5 : Les champs des vecteurs de vitesse à différentes positions du piston



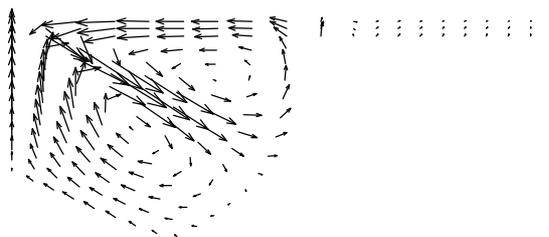
7) 10.02° avant le PMH.



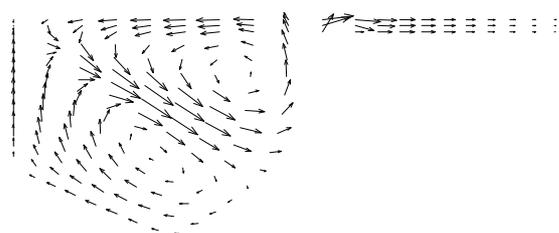
8) 8.04° avant le PMH.



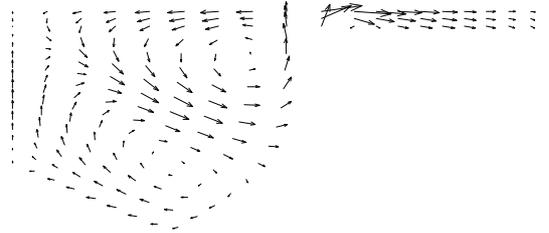
9) 5.039° avant le PMH.



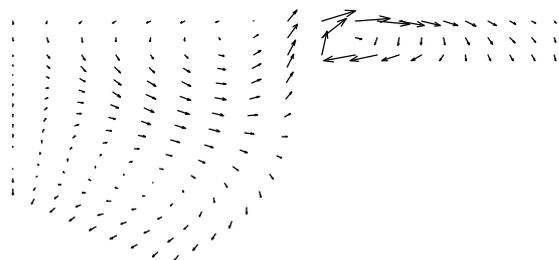
10) 2.60° avant le PMH.



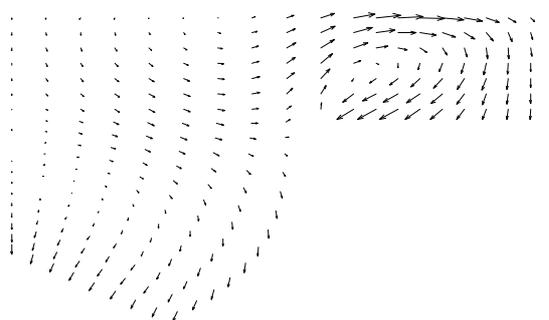
11) 0.13° avant le PMH.



12) 4.95° après le PMH.



13) 14.76° après le PMH.



14) 24.37° après le PMH.

Fig.IV.5 : (Suite).

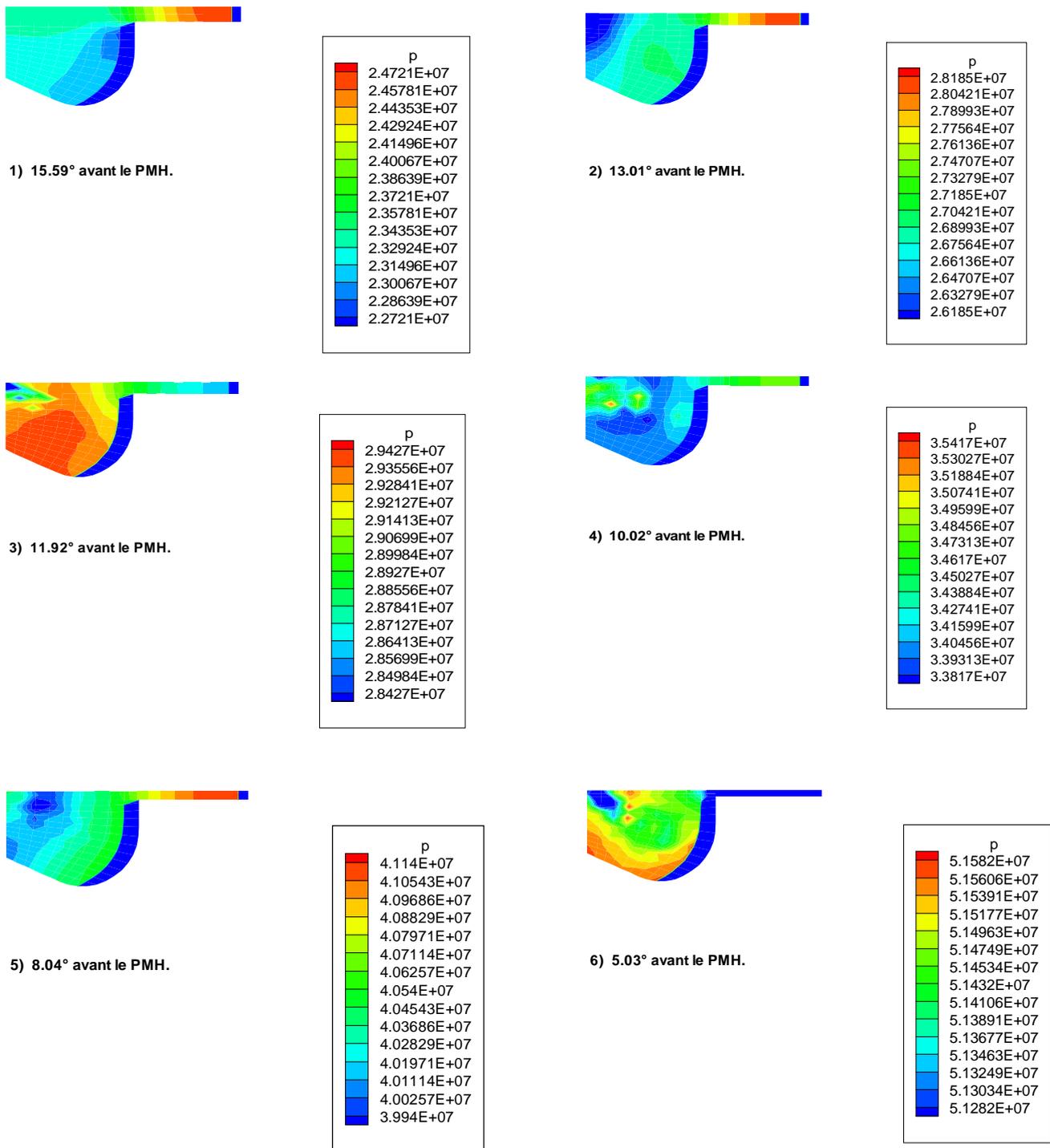
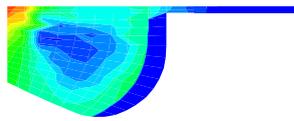
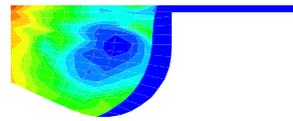
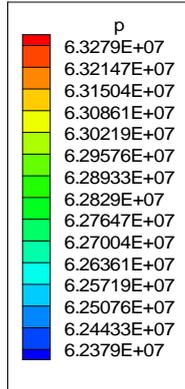


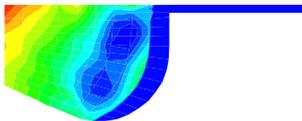
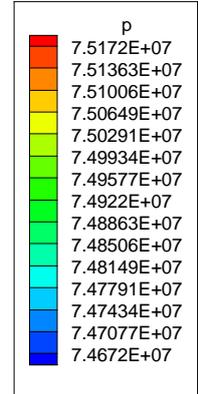
Fig.IV.6: Les isobares dans la chambre de combustion à différentes positions du piston.



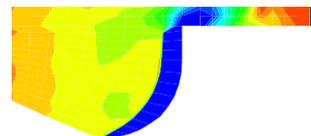
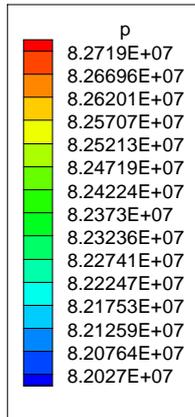
7) 2.60° avant le PMH.



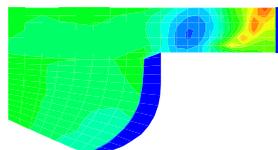
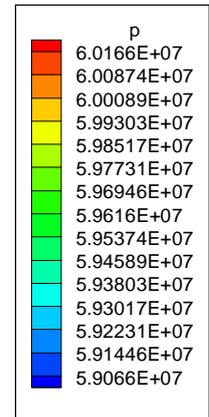
8) 0.13° avant le PMH.



9) 4.99° apres le PMH



10) 14.76° apres le PMH.



11) 24.37° apres le PMH.

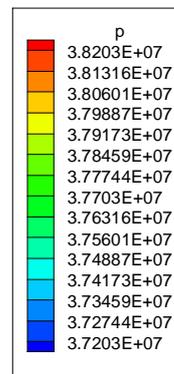


Fig.IV.6: (Suite).

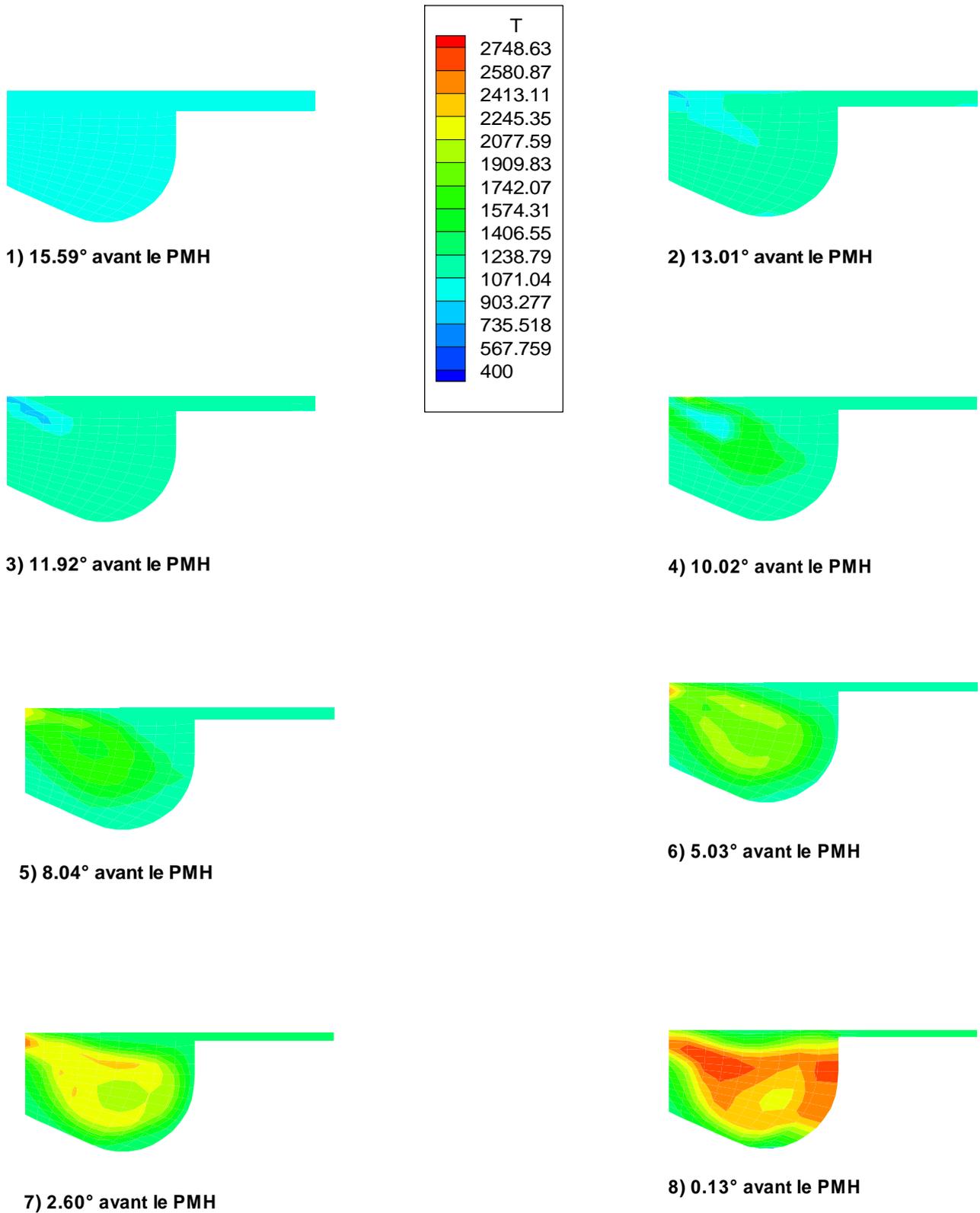


Fig.IV.7 : Les isothermes à différentes positions du piston.

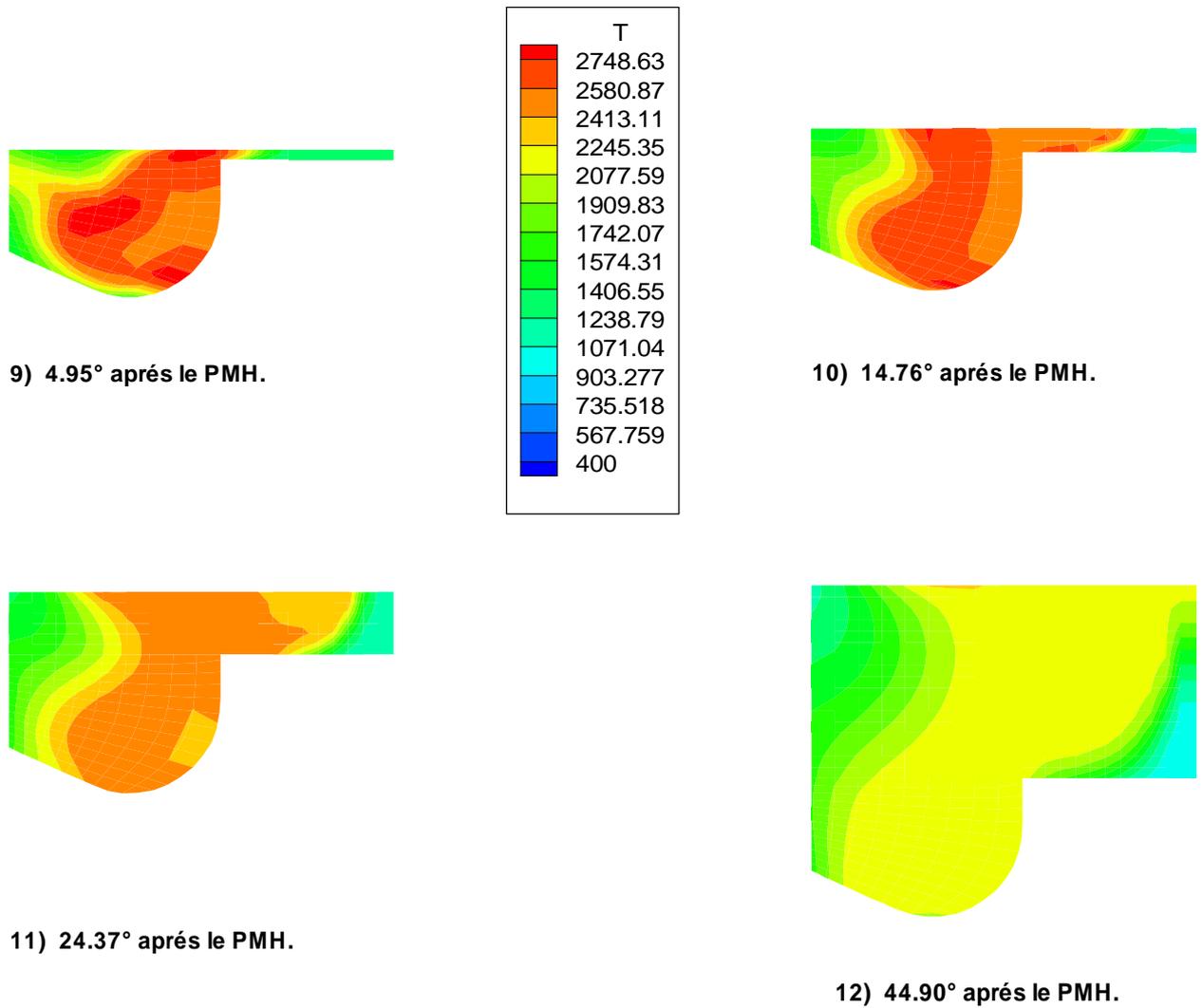


Fig.IV.7 : (Suite)

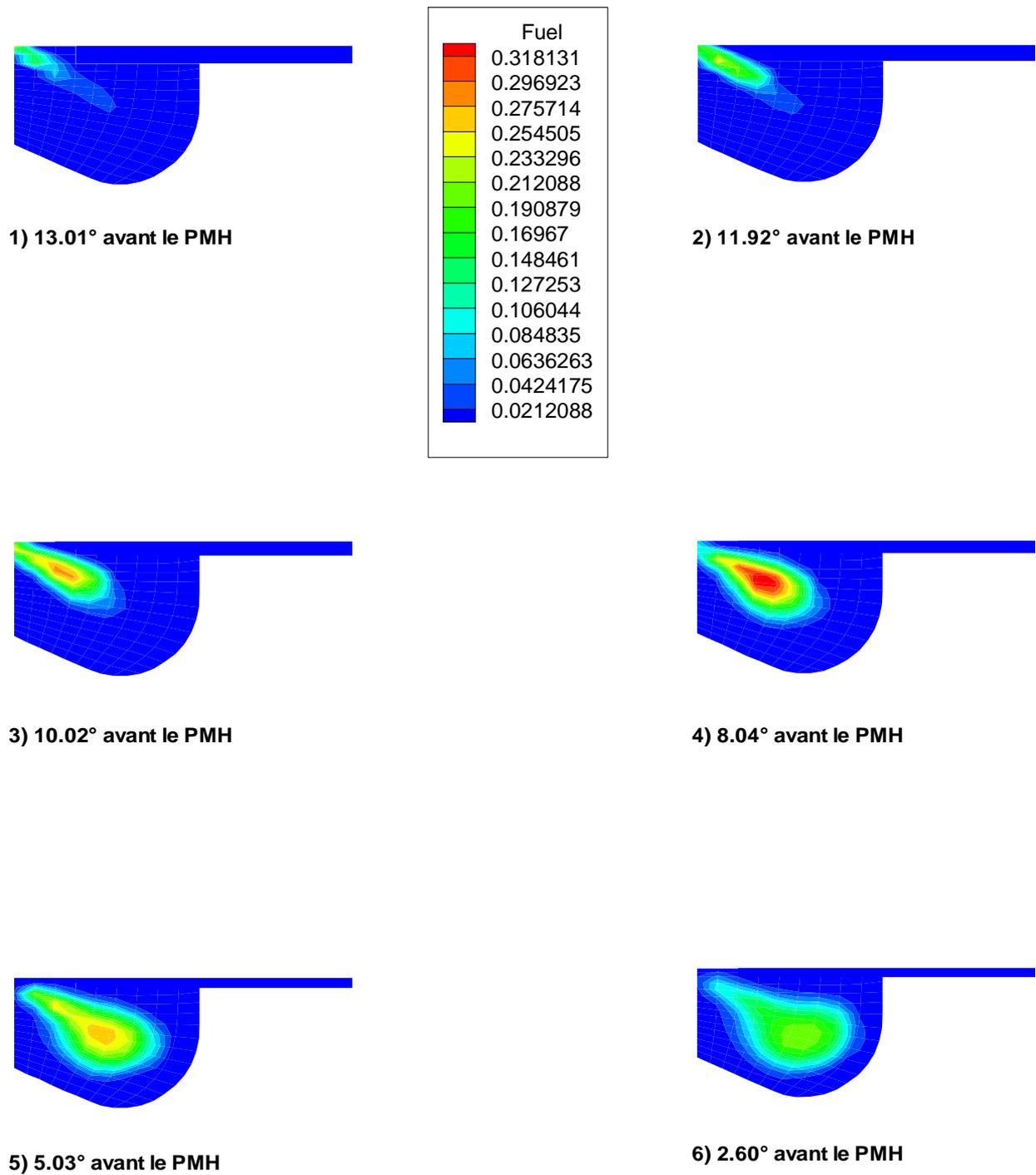


Fig.IV.8 : Les contours des fractions massiques du combustible à différentes positions du piston.

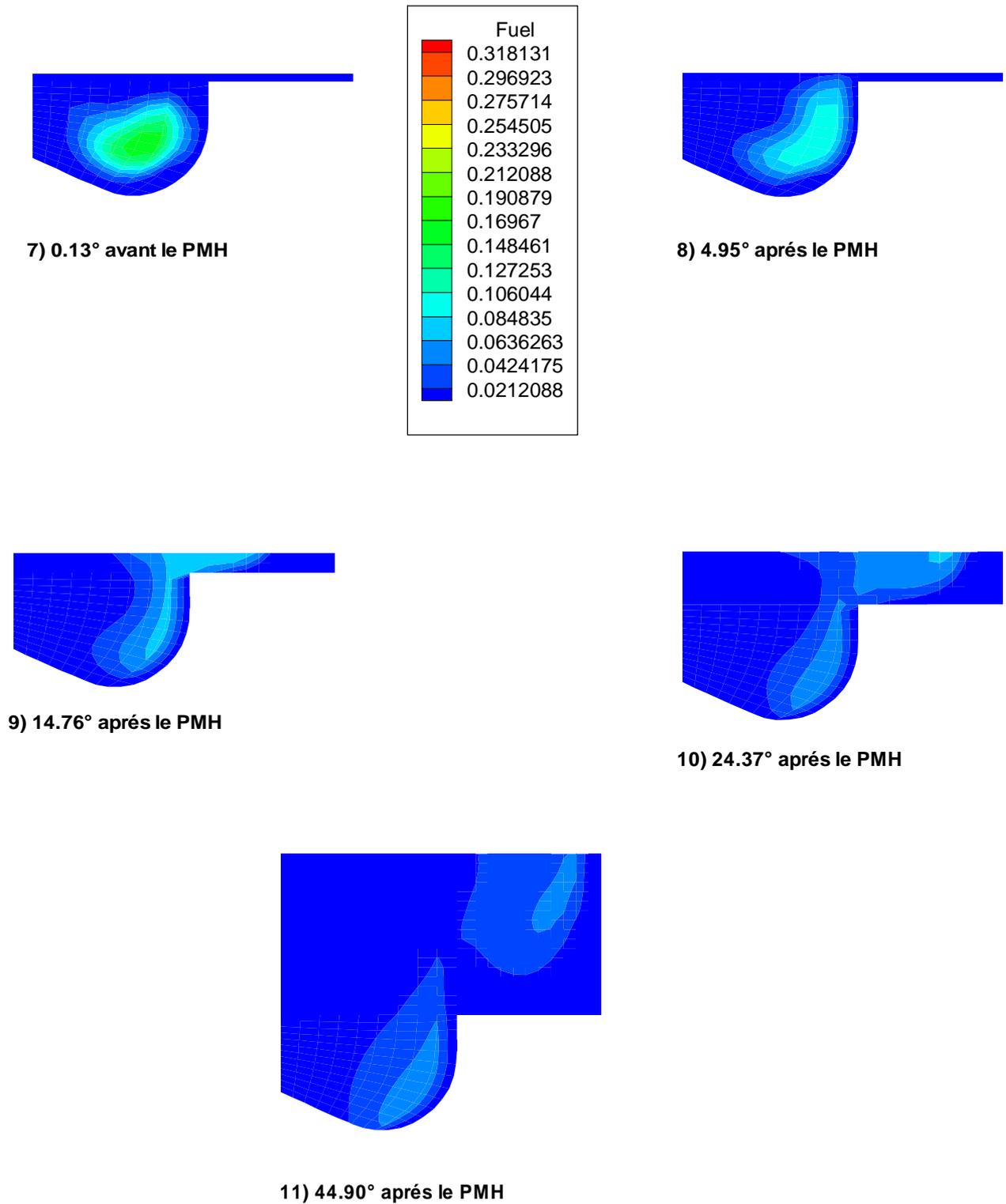


Fig.IV.8 : (Suite).

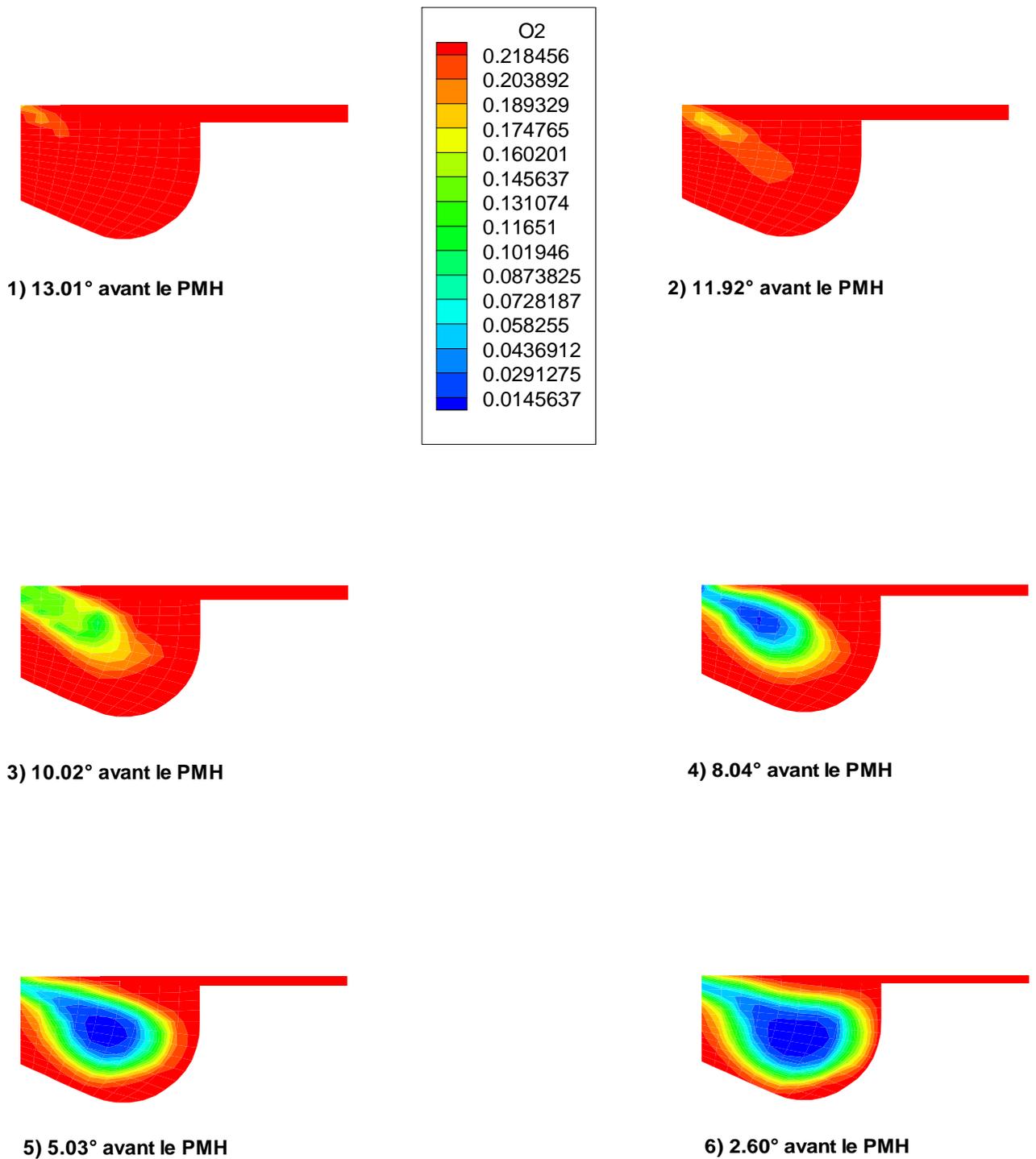


Fig.IV.9 : Les contours des fractions massiques de l’oxygène à différentes positions du piston.

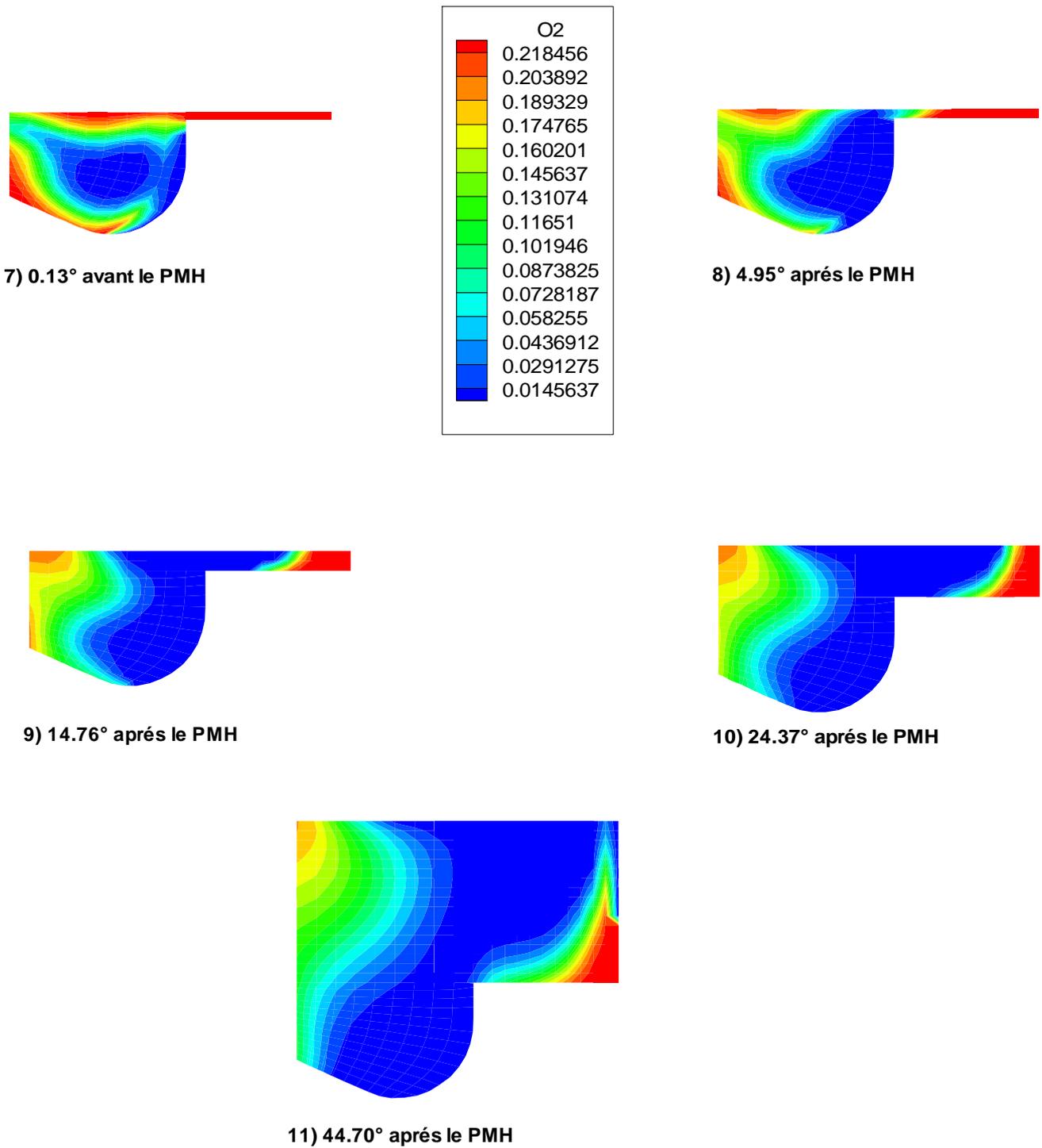


Fig.IV.9 : (Suite)

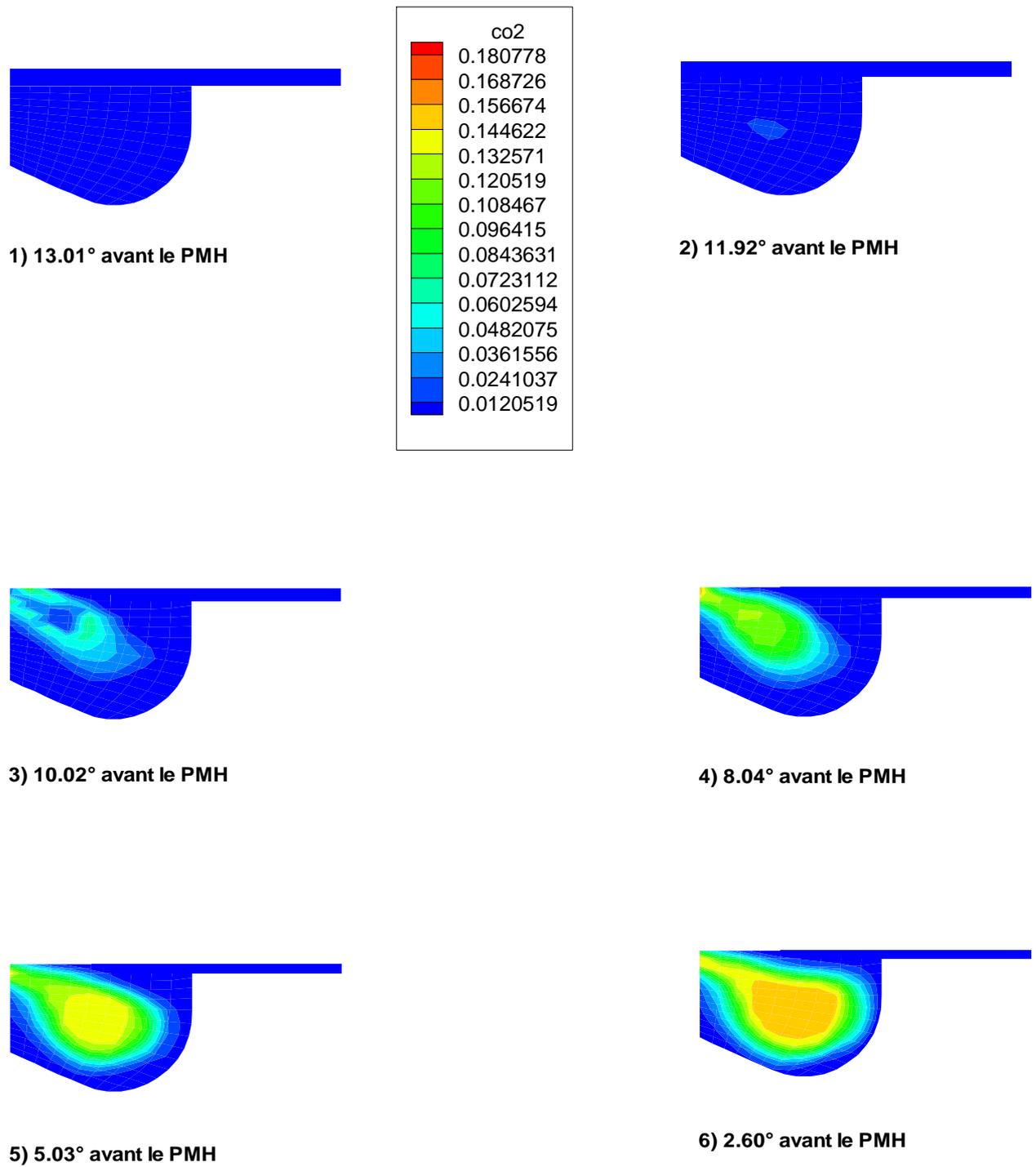


Fig.IV.10 : Les contours des fractions massiques du dioxyde de carbone à différentes positions du piston.

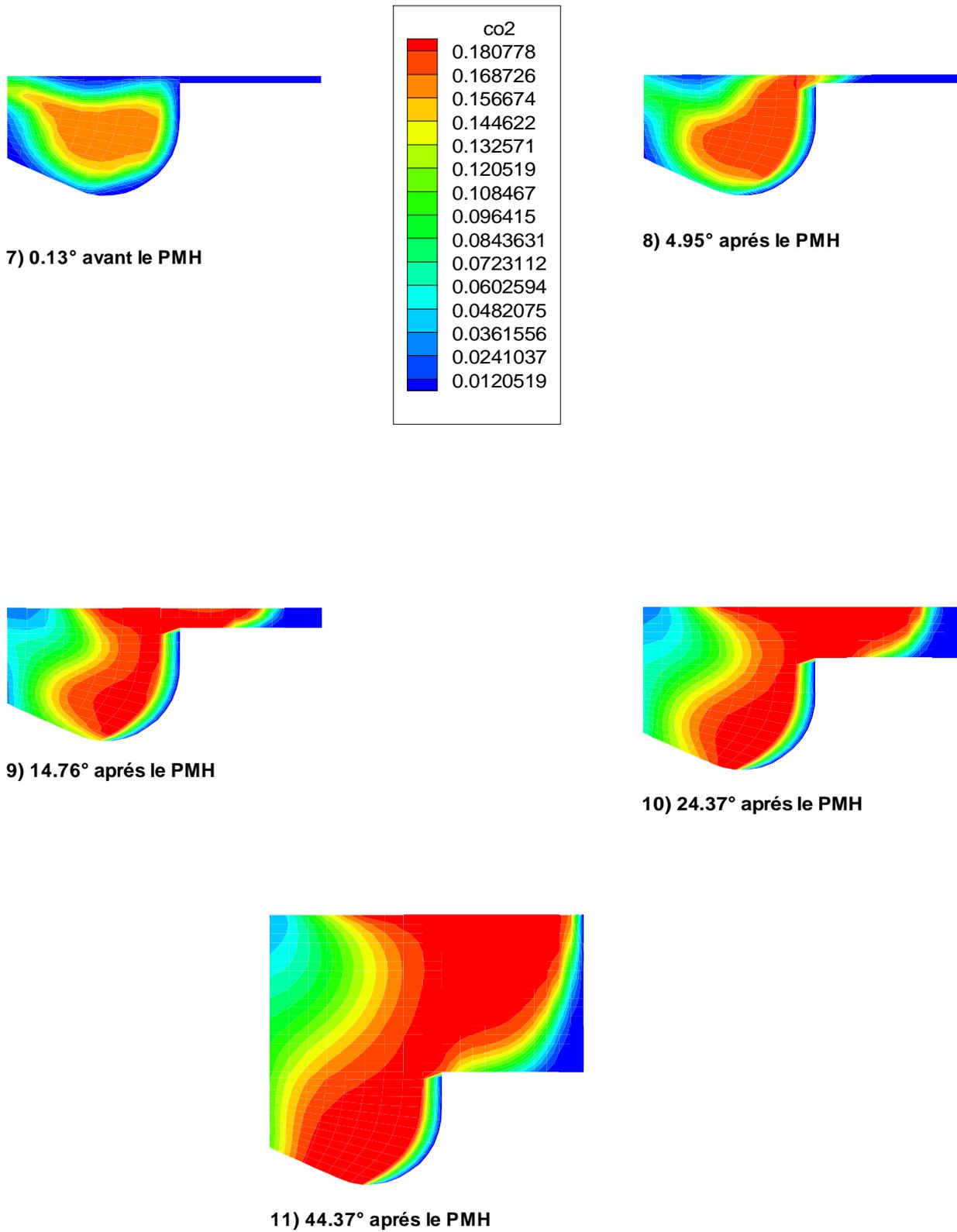


Fig.IV.10 : (Suite)

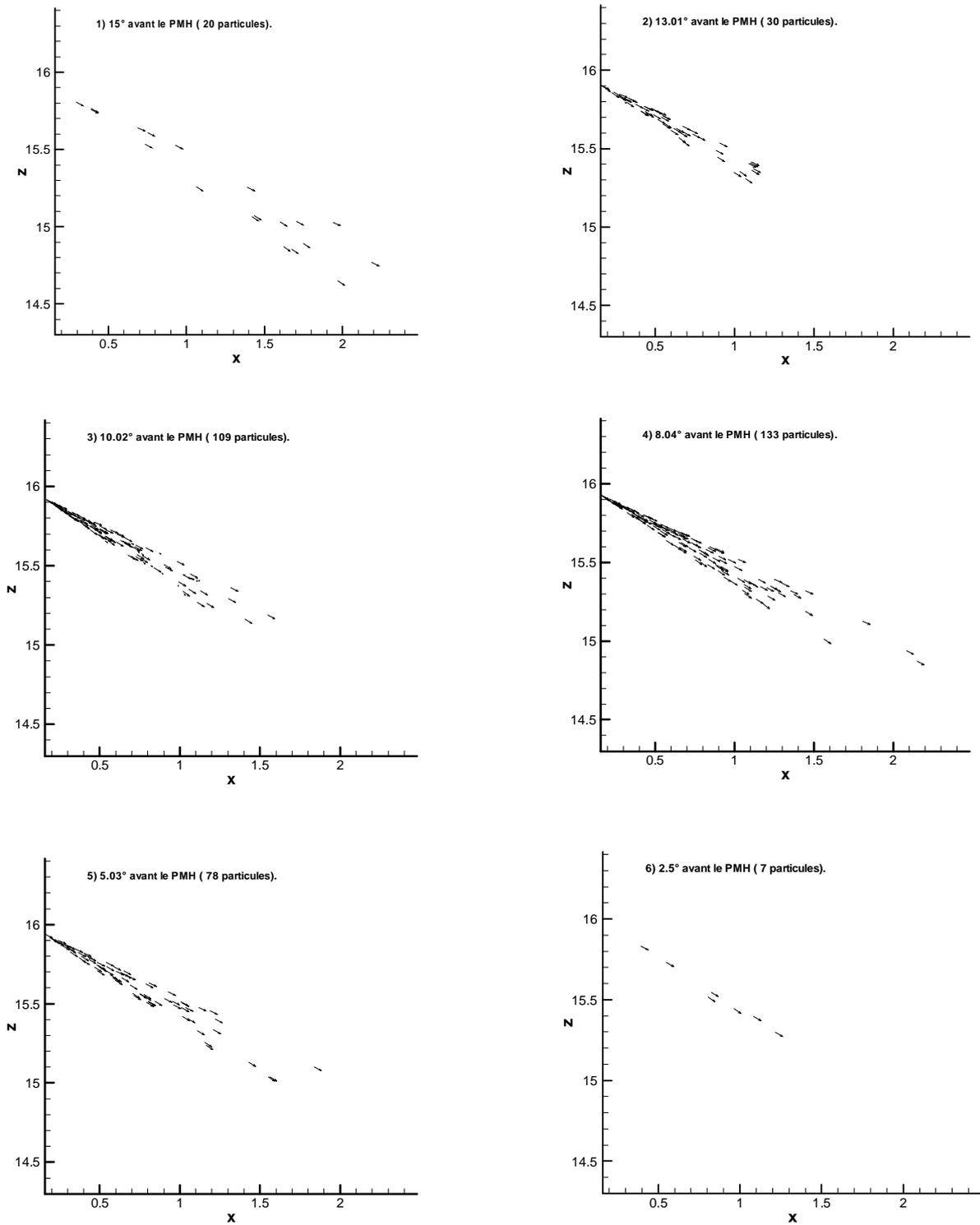


Fig.IV.11 : Les vecteurs des vitesses absolues des gouttes du combustible à différentes positions du piston.

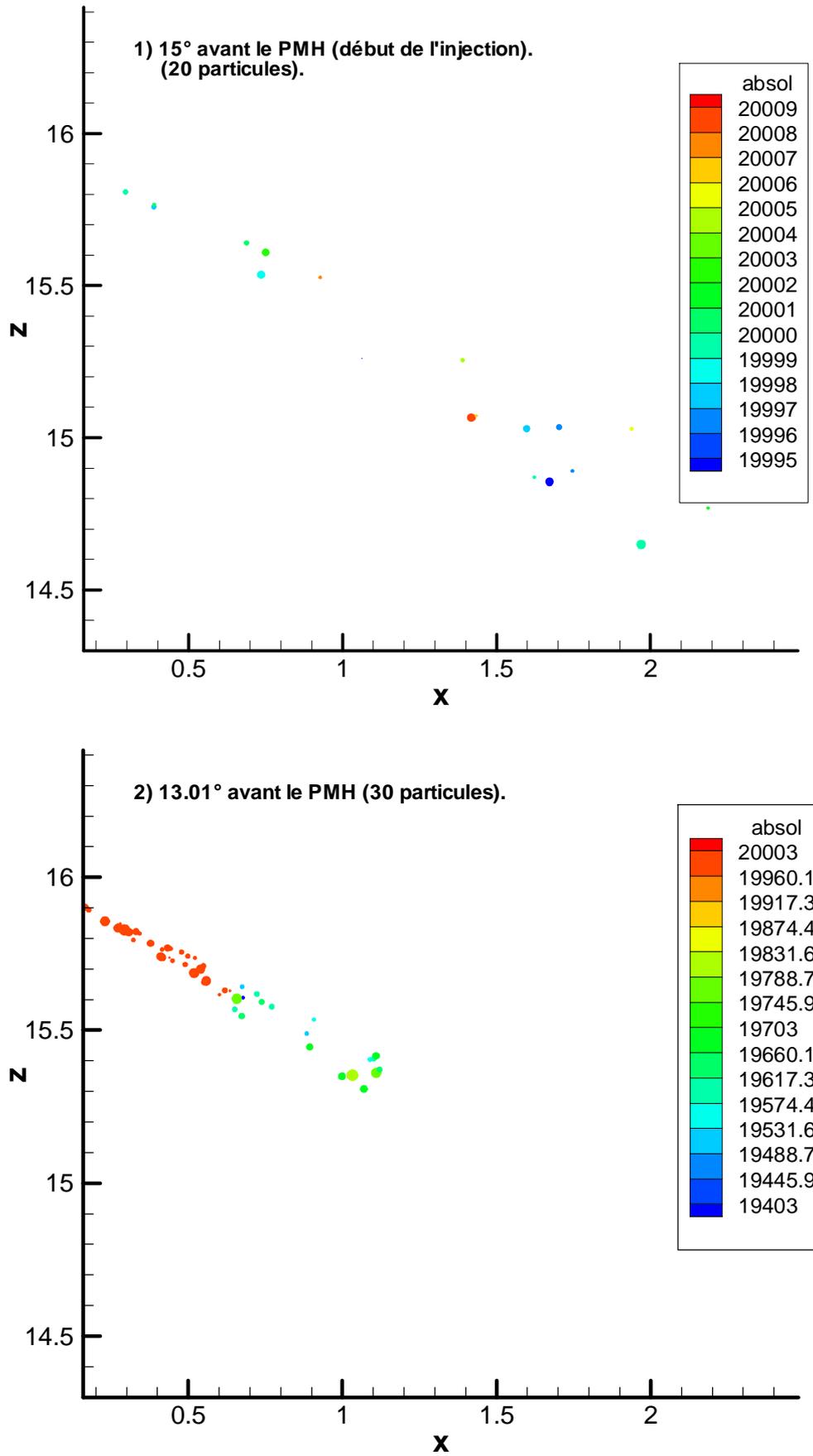


Fig.IV.12 : position des gouttes du combustible – couleur représentant les vitesses absolues.

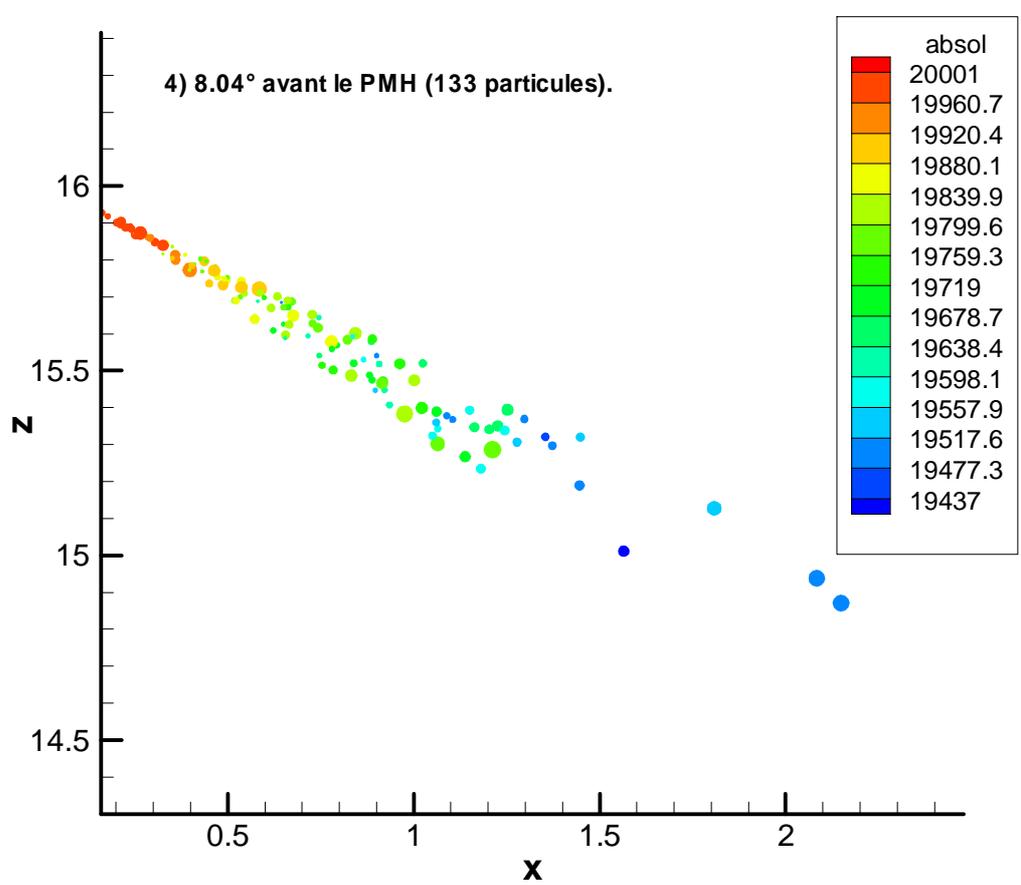
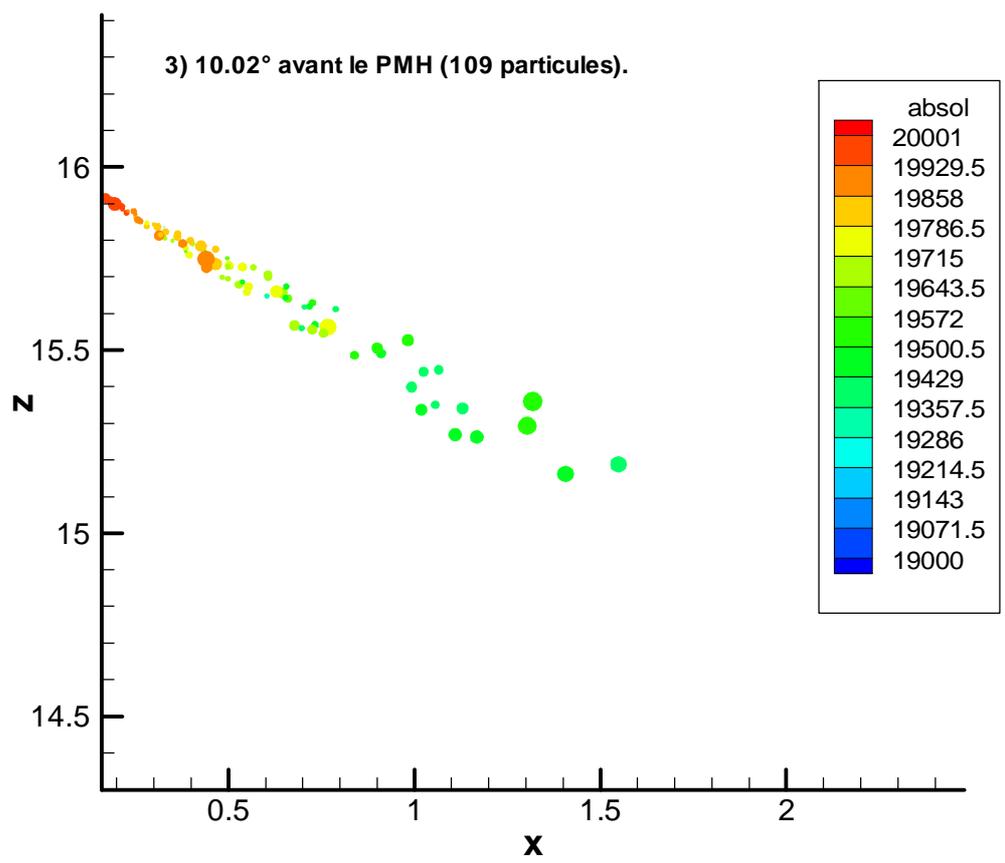


Fig.IV.12 : (Suite)

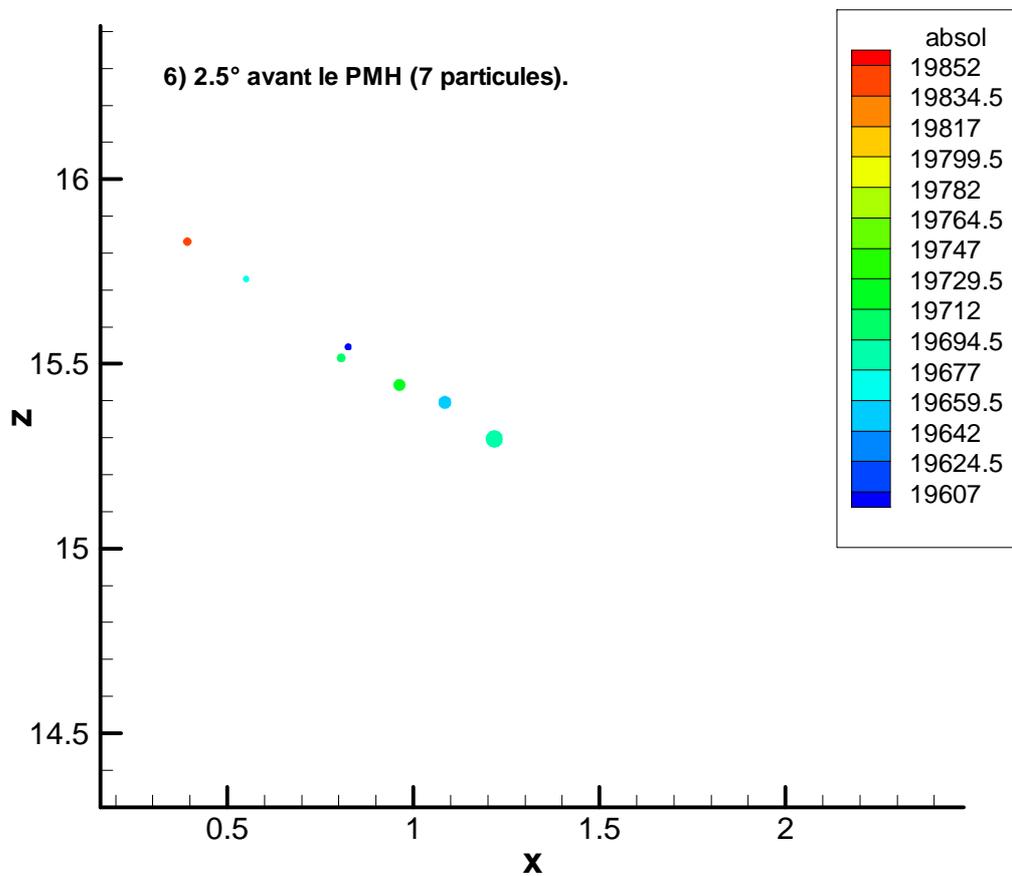
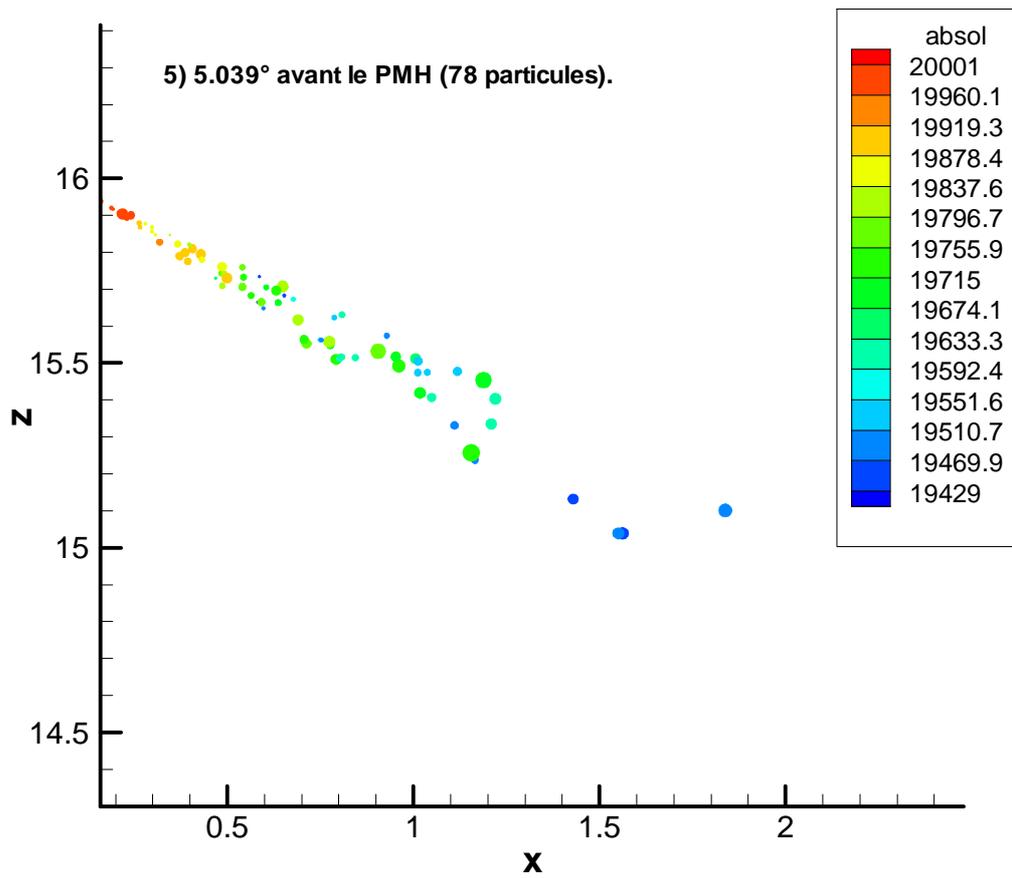


Fig.IV.12 : (Suite)

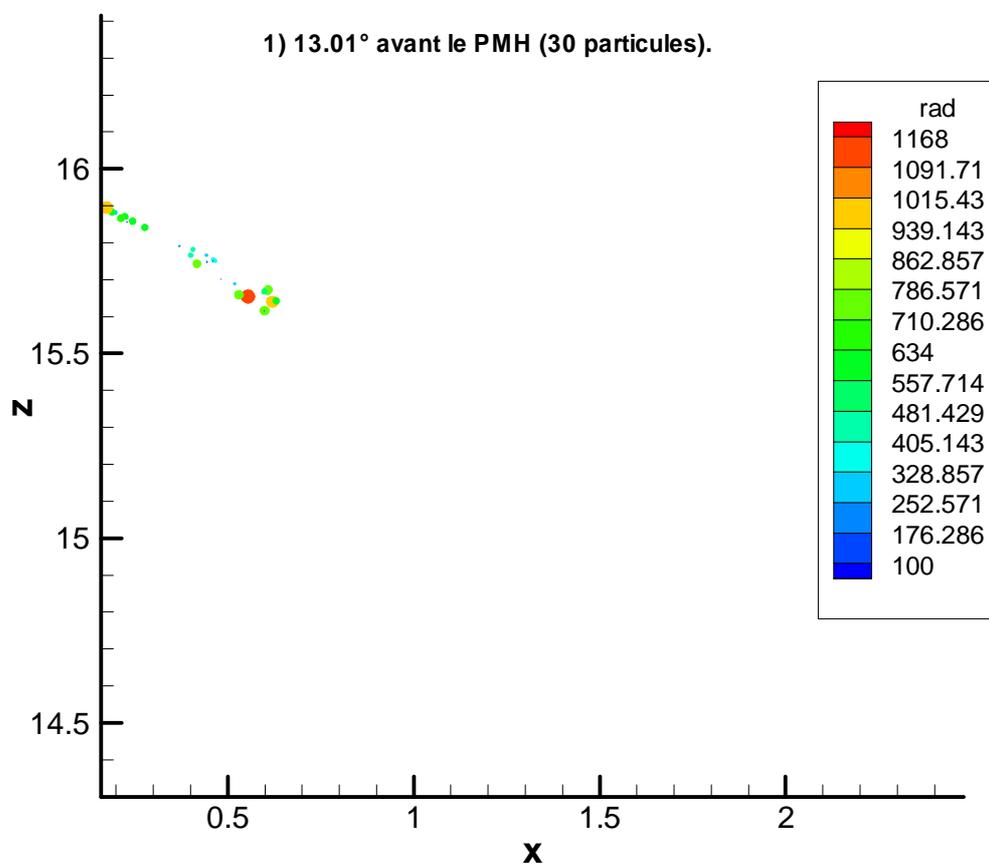
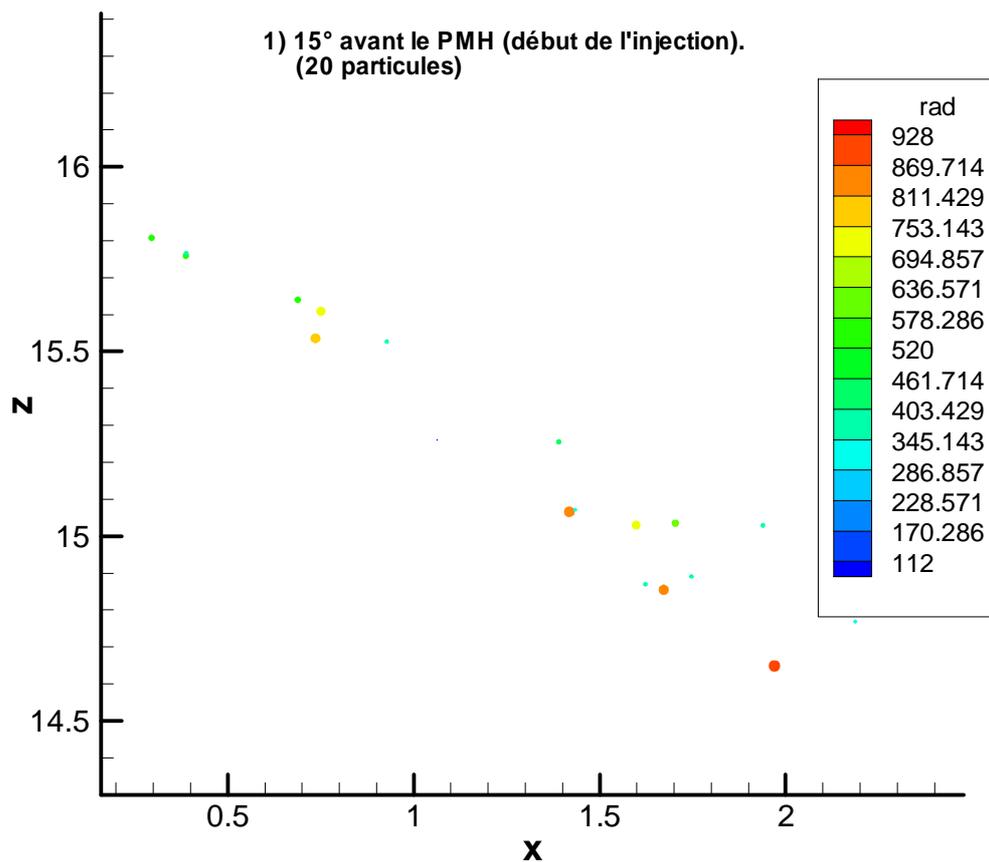


Fig.IV.13: Position des gouttes (couleur représentant le rayon).

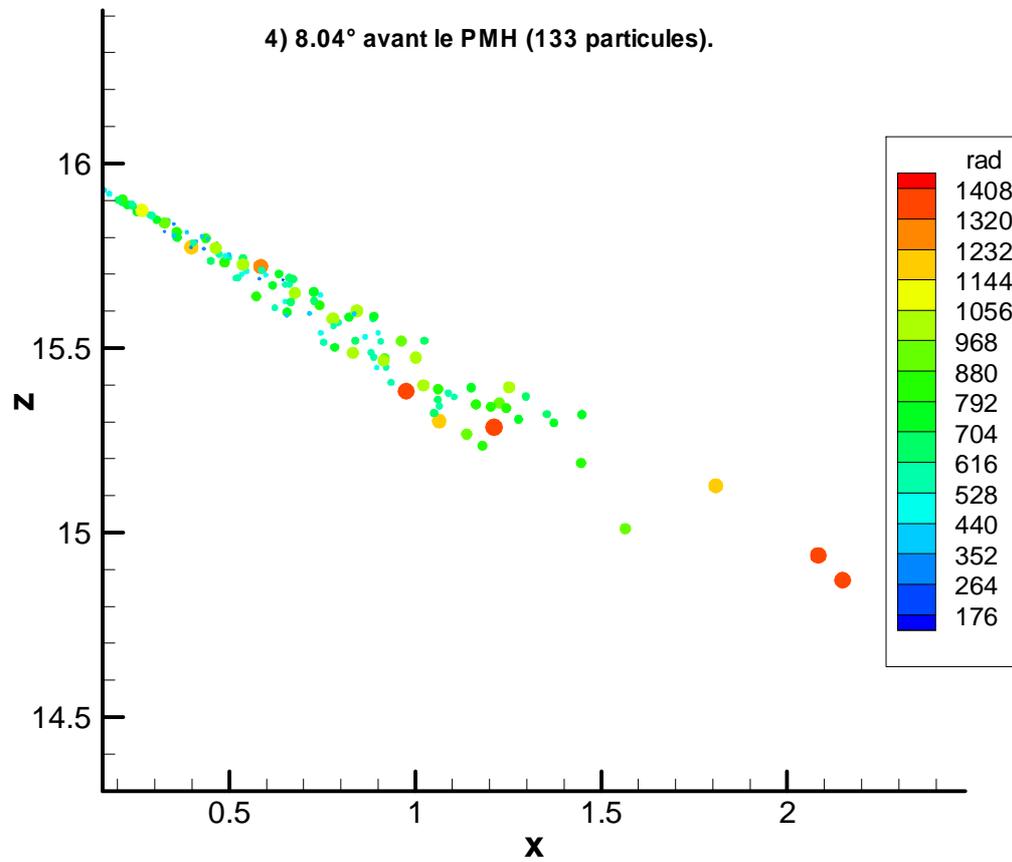
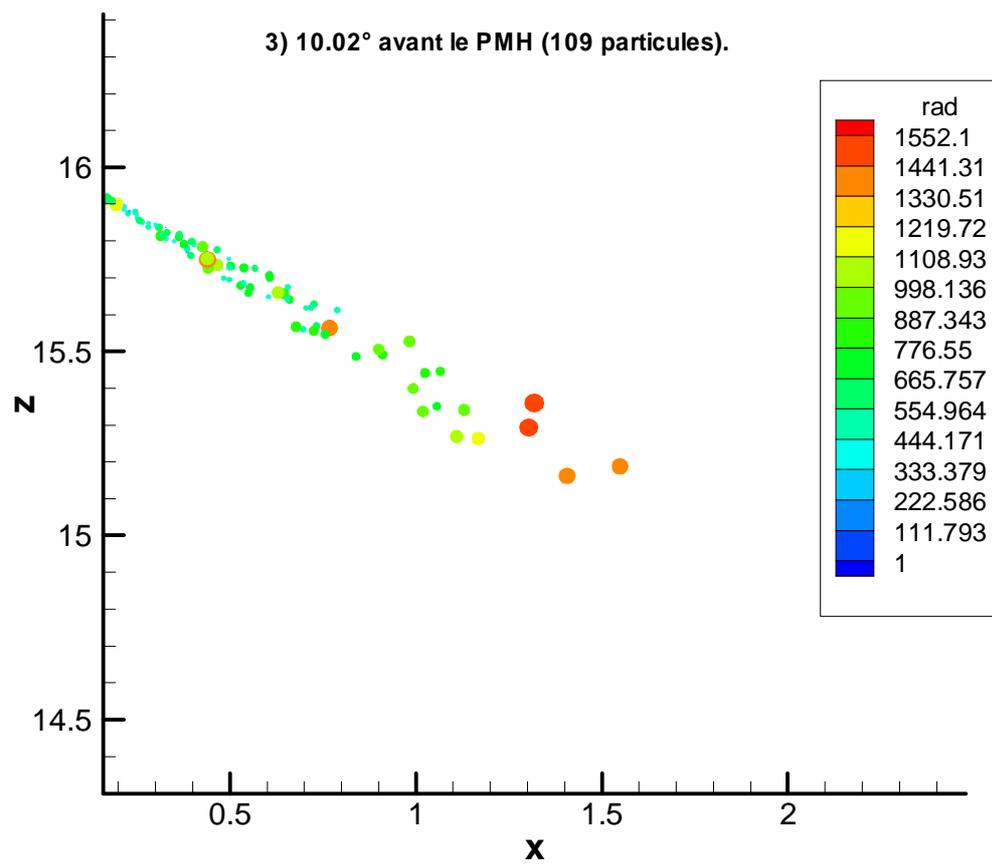


Fig.IV.13 : (Suite)

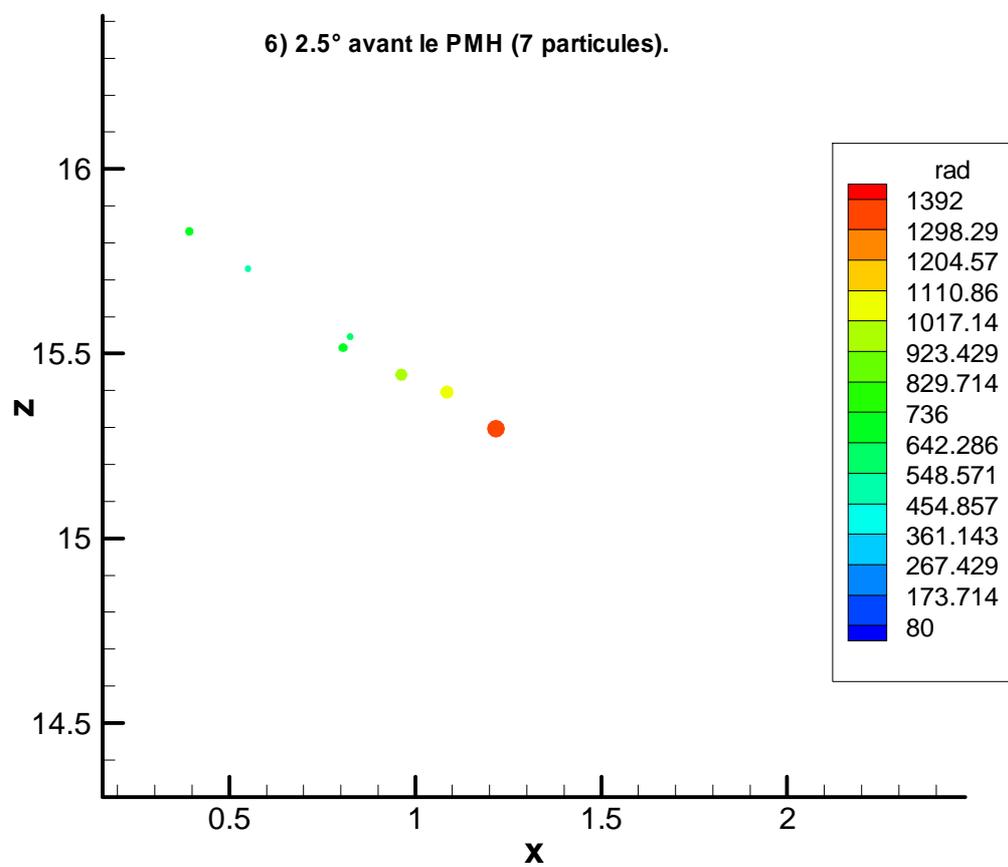
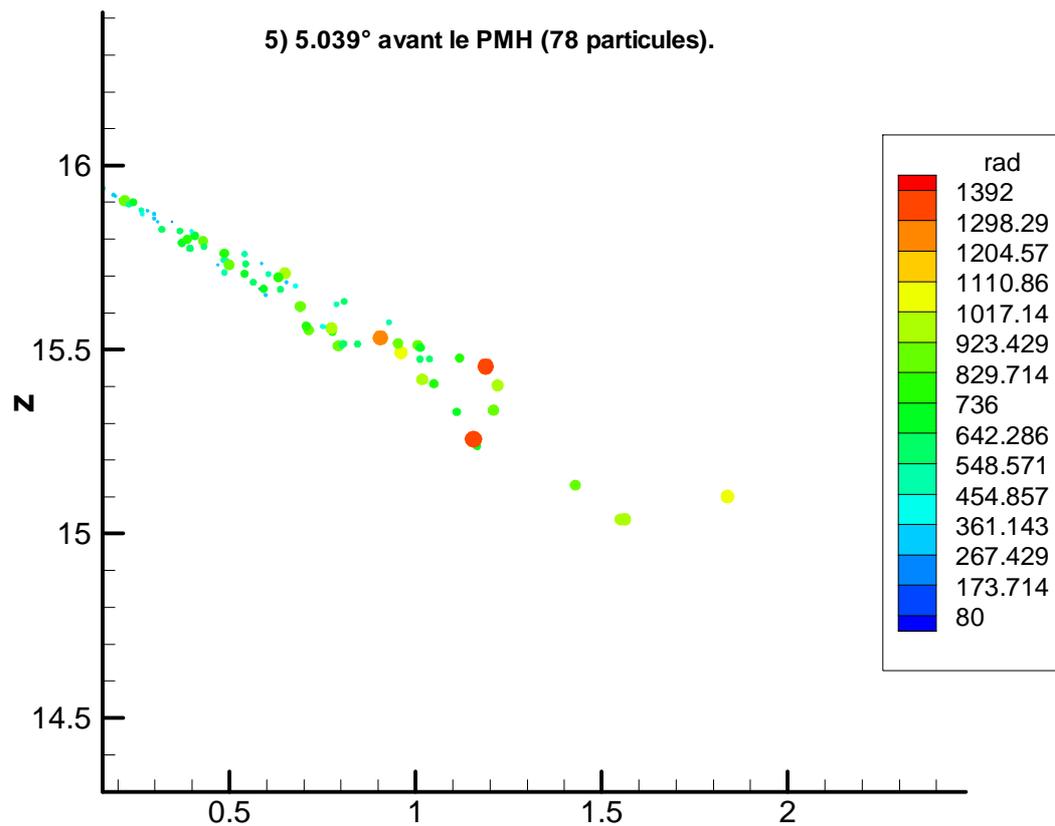


Fig.IV.13 : (Suite)

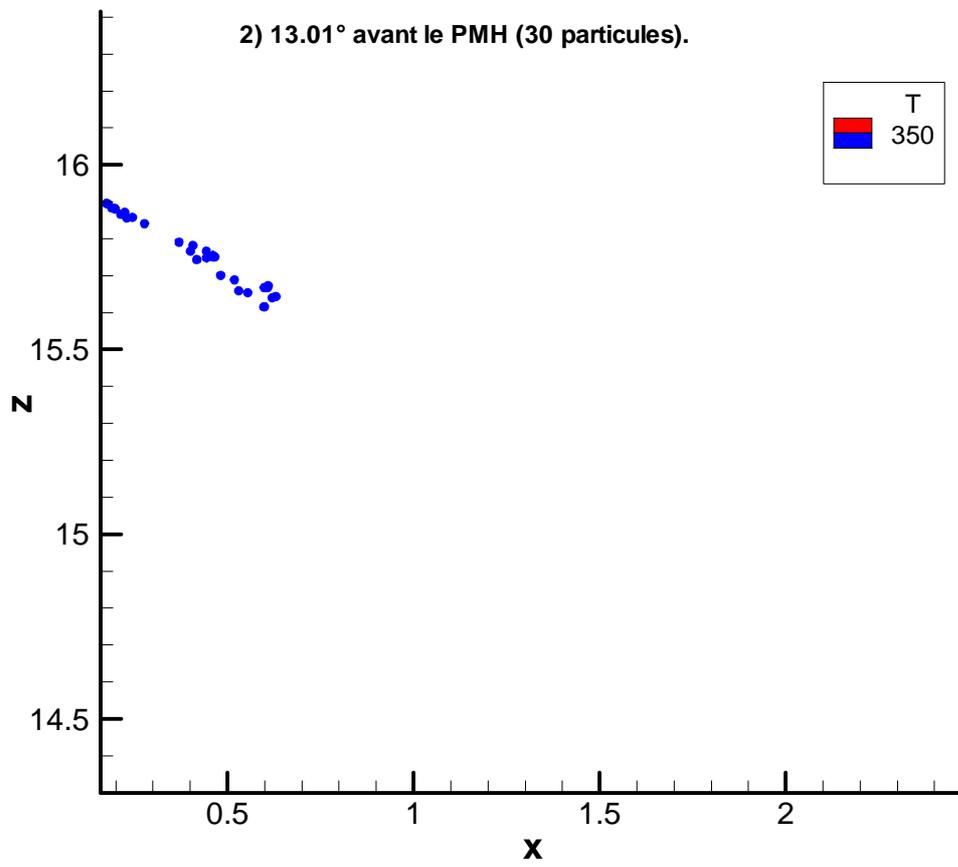
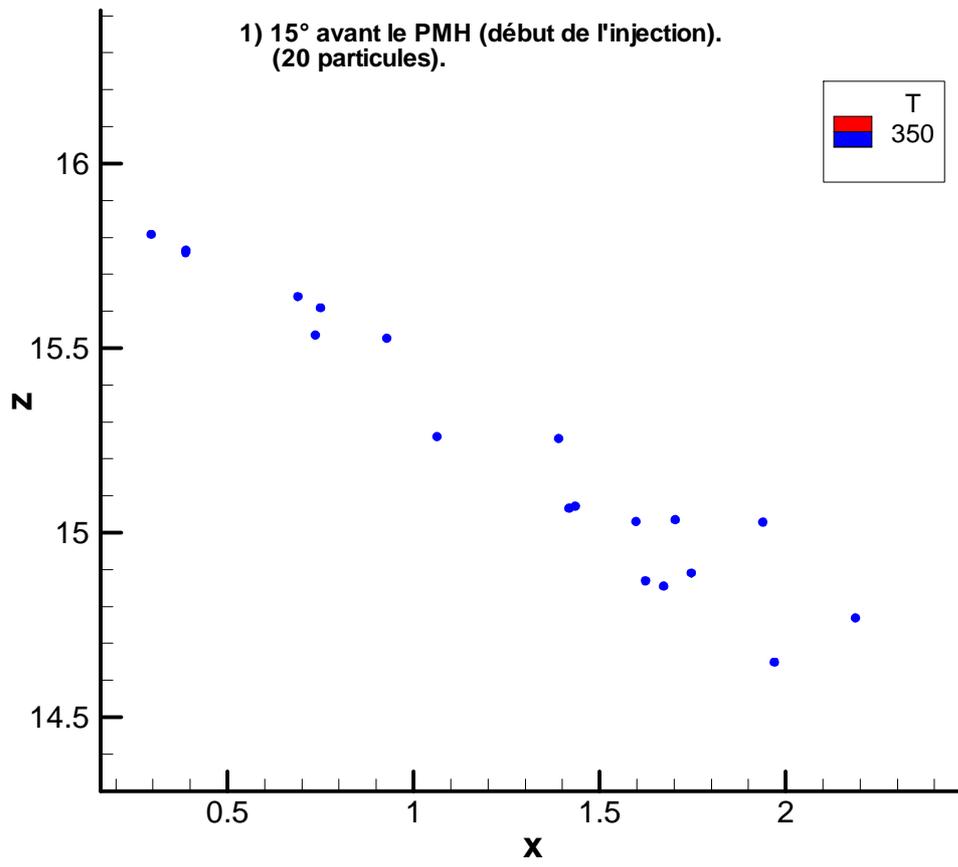


Fig.IV.14 : Position des gouttes (couleur et taille représentant la température)

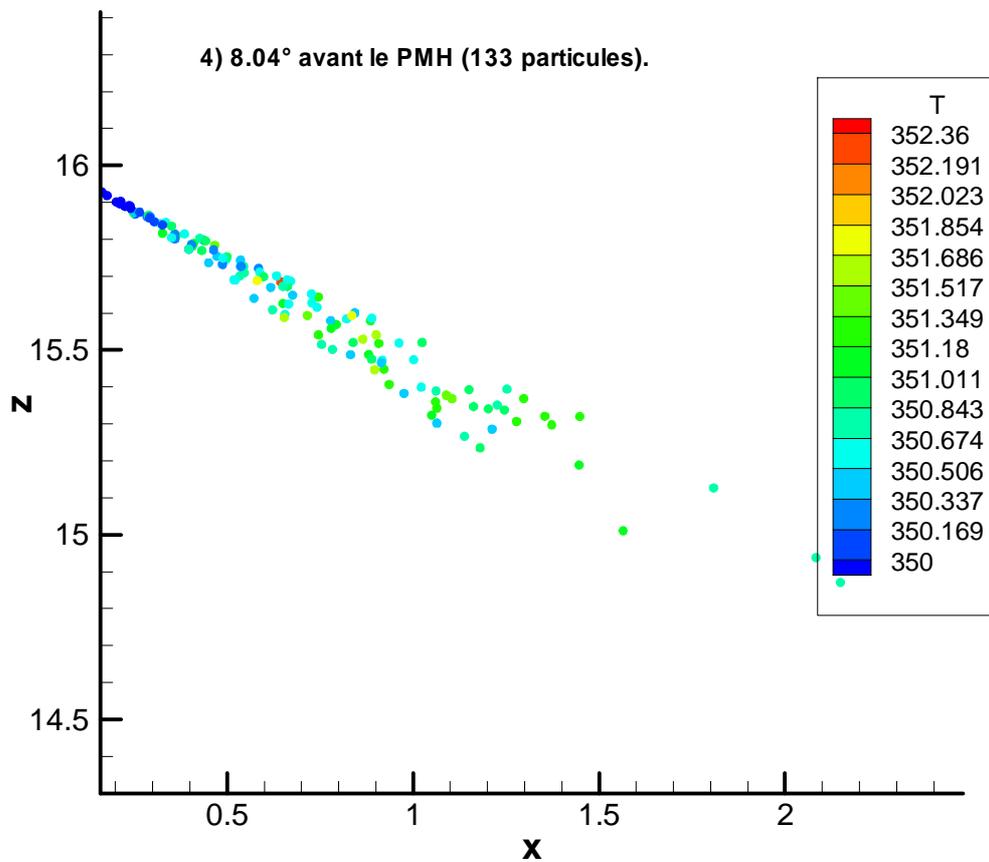
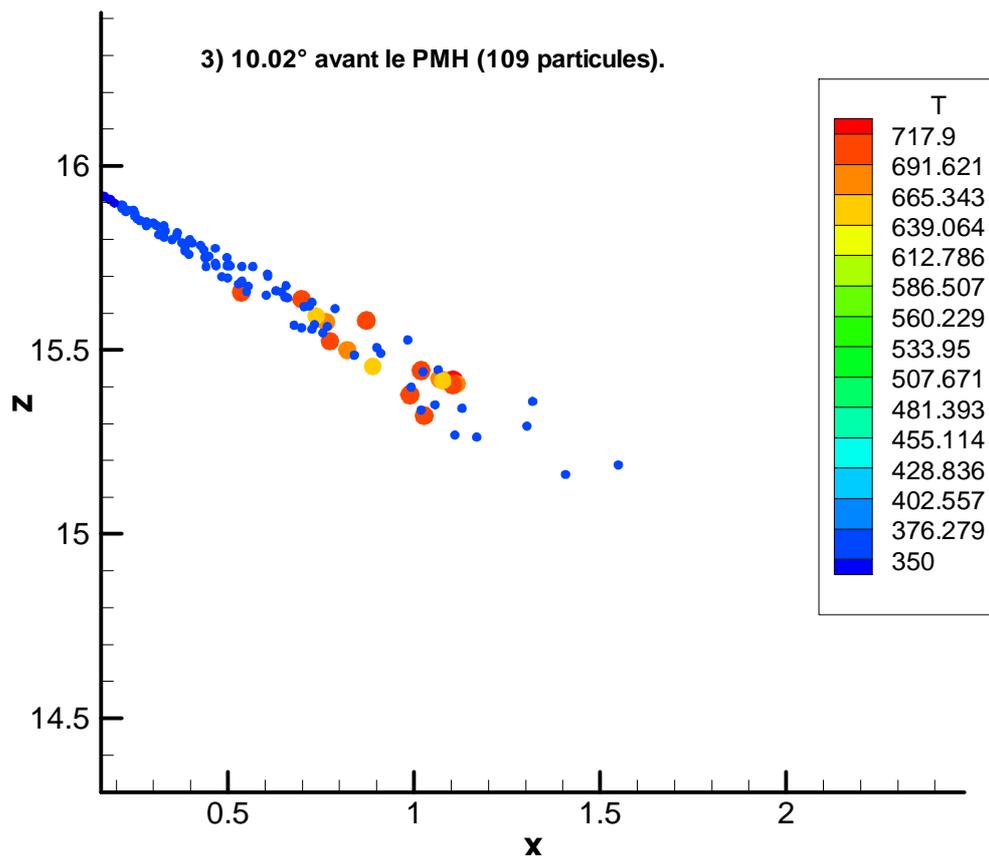


Fig. IV.14 : (Suite)

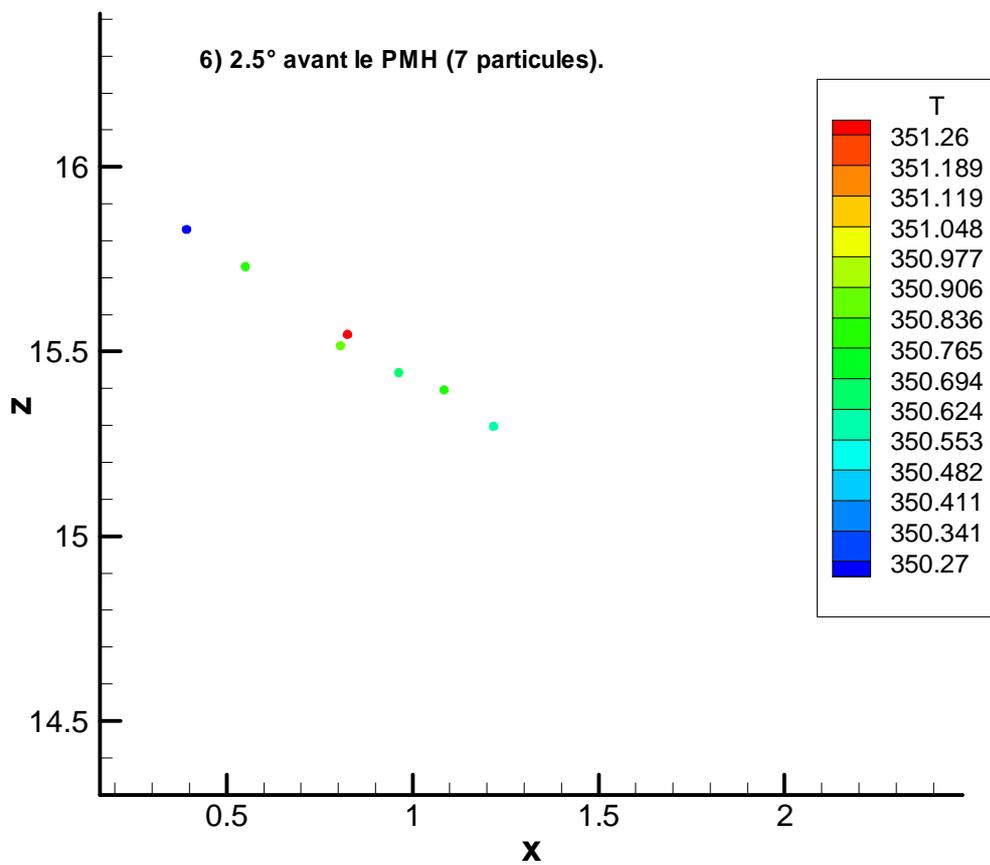
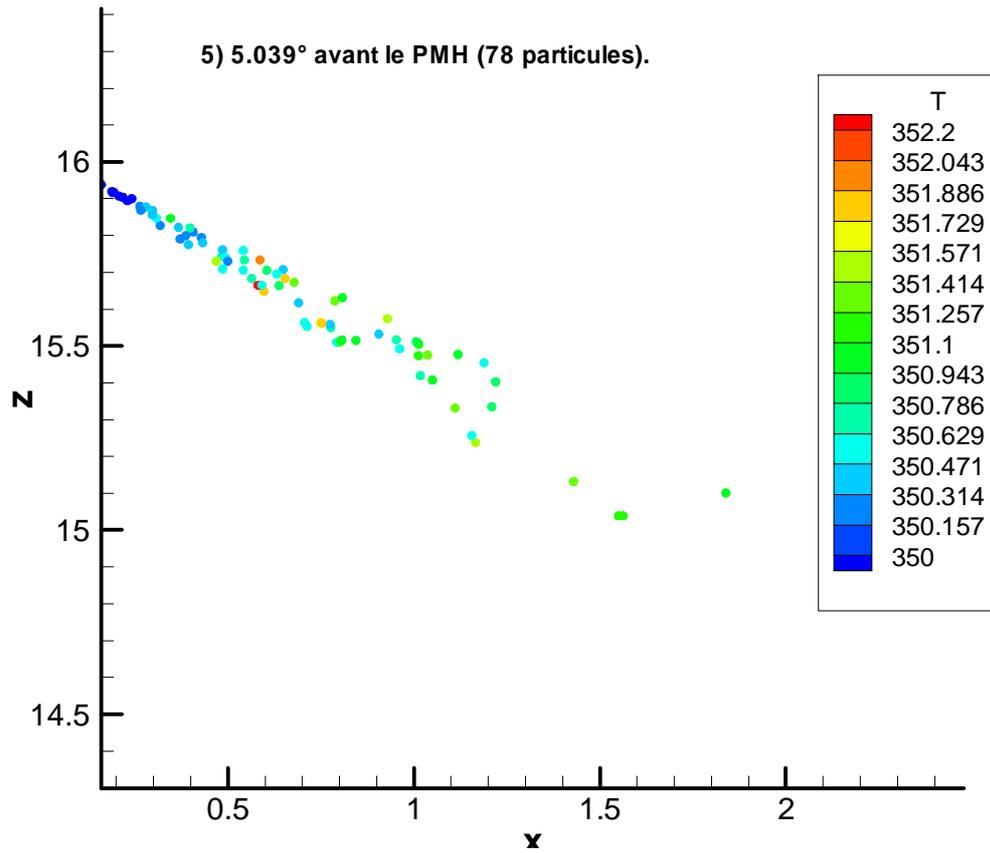


Fig.IV.14 : (Suite)

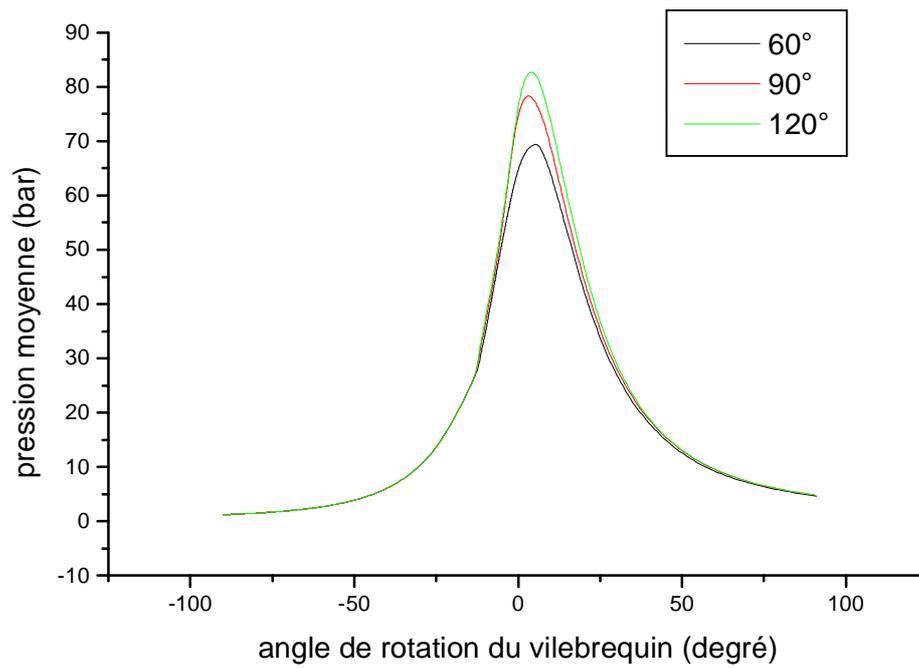


Fig.IV.15.1: Evolution de la pression moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents angles d'injection (cône).

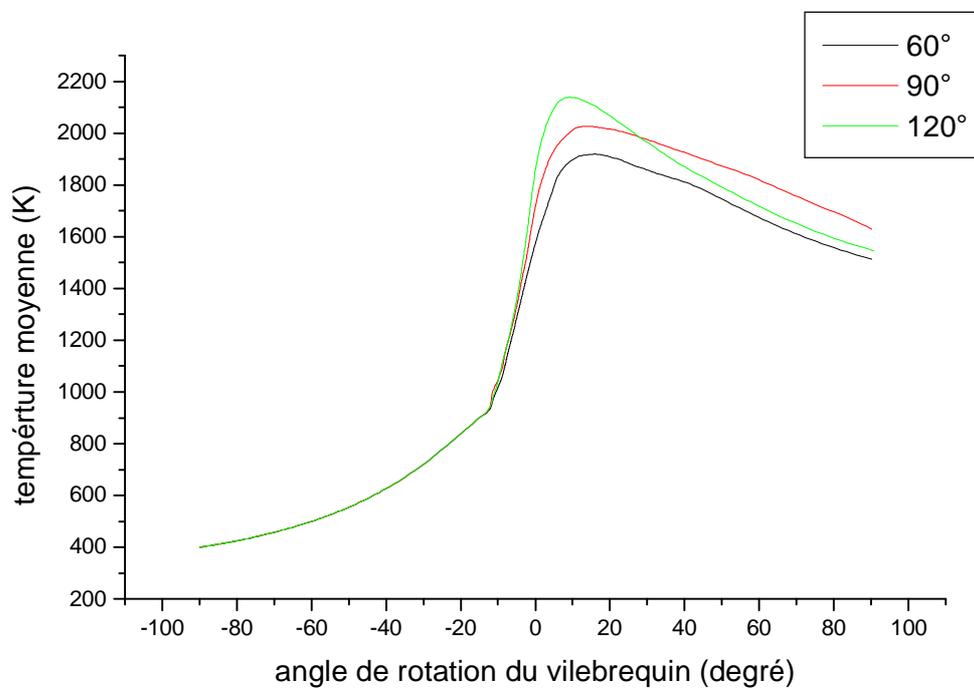


Fig.IV.15.2 : Evolution de la température moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents angles d'injection (cône).

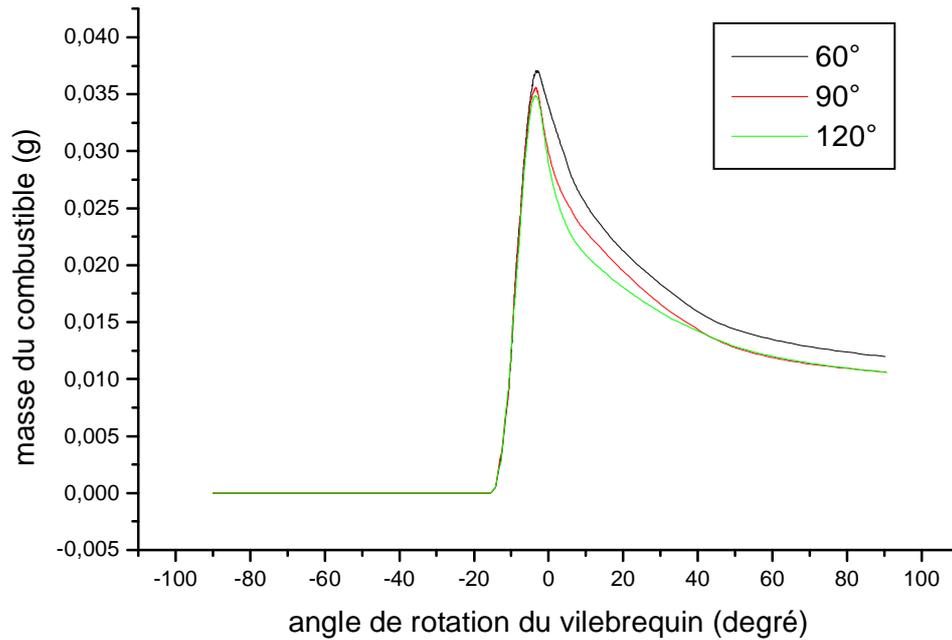


Fig.IV.15.3 : Evolution de la masse du combustible en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents angles d'injection (cône).

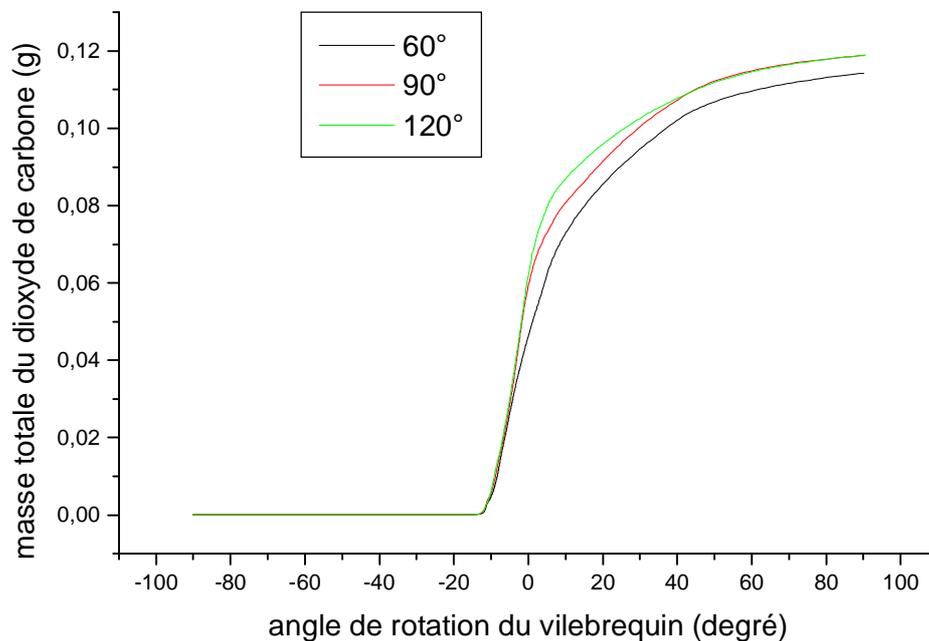


Fig.IV.15.4 : Evolution de la masse totale du CO₂ en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents angles d'injection (cône).

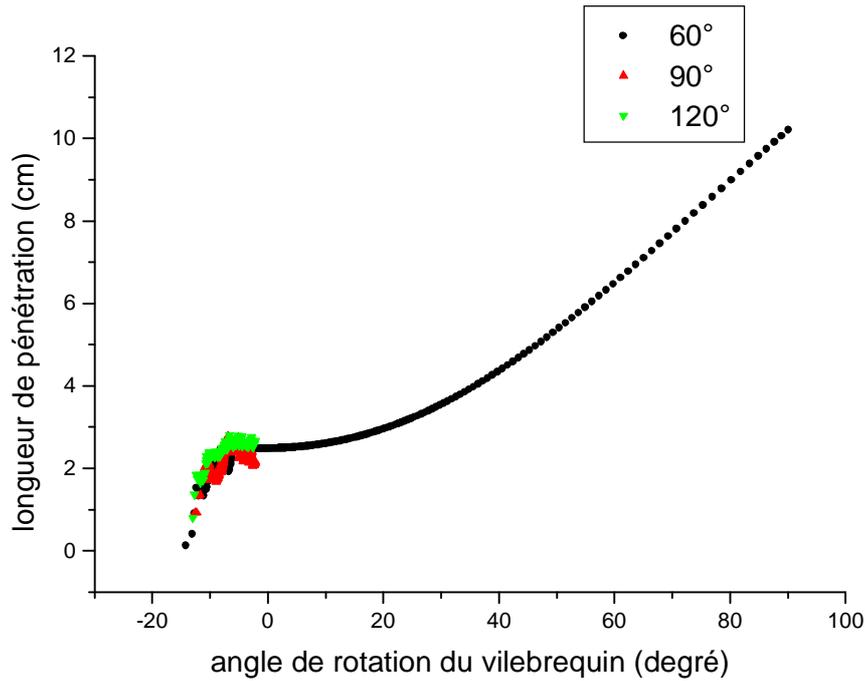


Fig.IV.15.5 : Evolution de la pénétration en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents angles d'injection (cône).

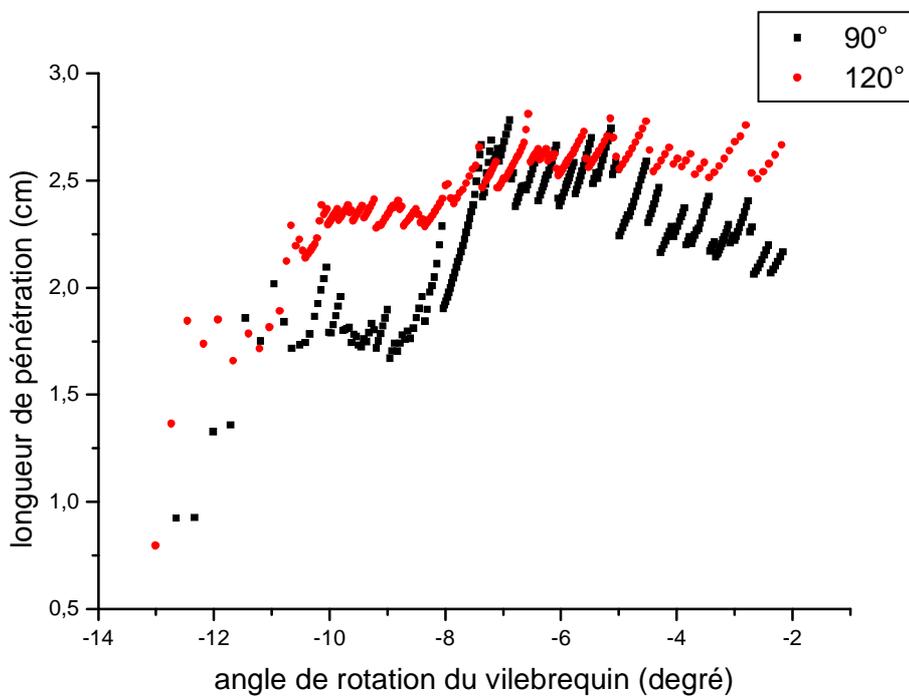
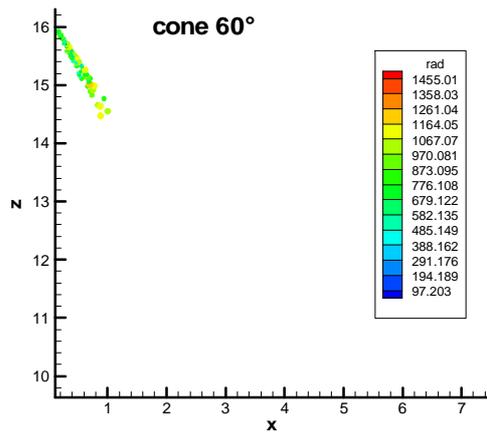
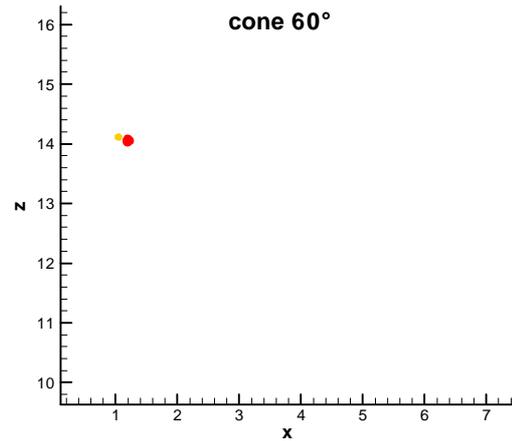


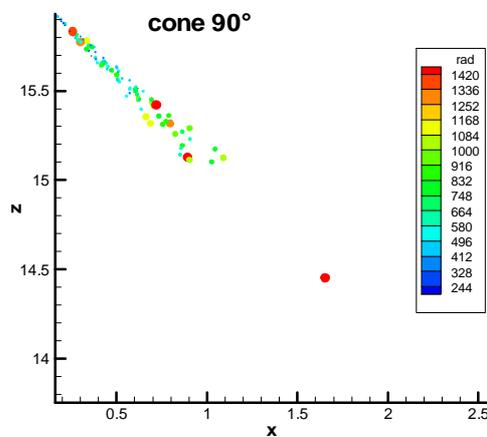
Fig.IV.15.6 : Evolution de la pénétration en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différents angles d'injection (cône).



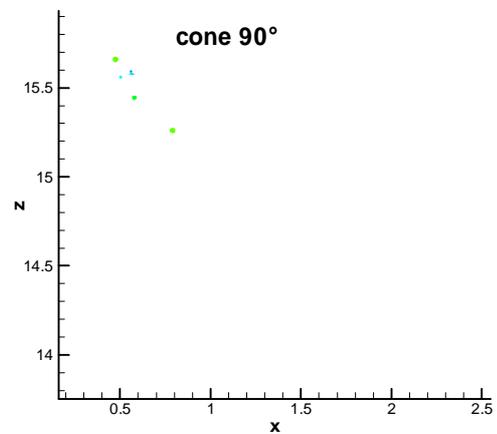
a) à 8.04° avant le PMH



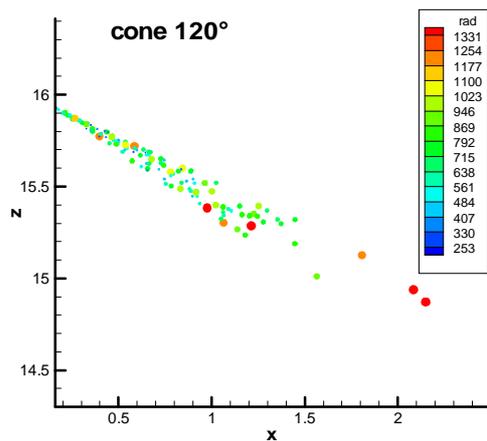
b) après fin d'injection



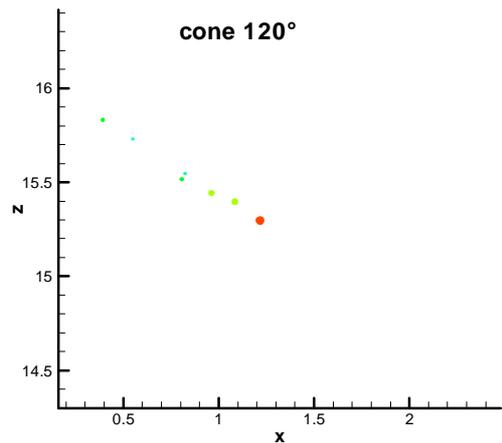
c) à 8.04° avant le PMH



d) fin d'injection (2.5° avant le PMH)



e) à 8.04° avant le PMH



.f) fin d'injection (2.5° avant le PMH)

Fig.IV.15.7. : Distribution des gouttes pour différents angles d'injections (cone) à différentes positions

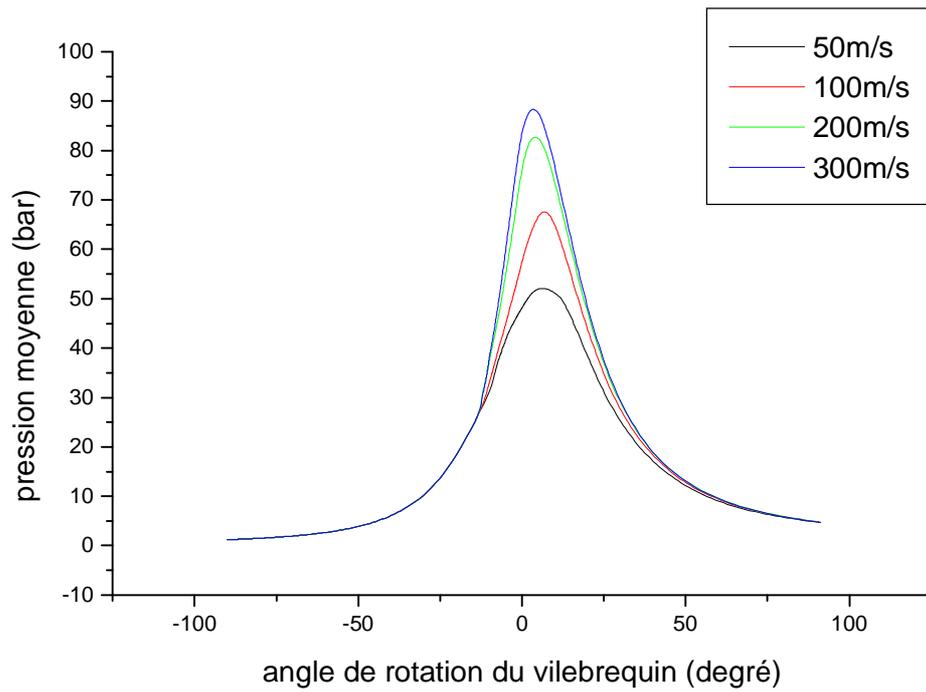


Fig.IV.16.1 : Evolution de la pression moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes vitesses d'injection.

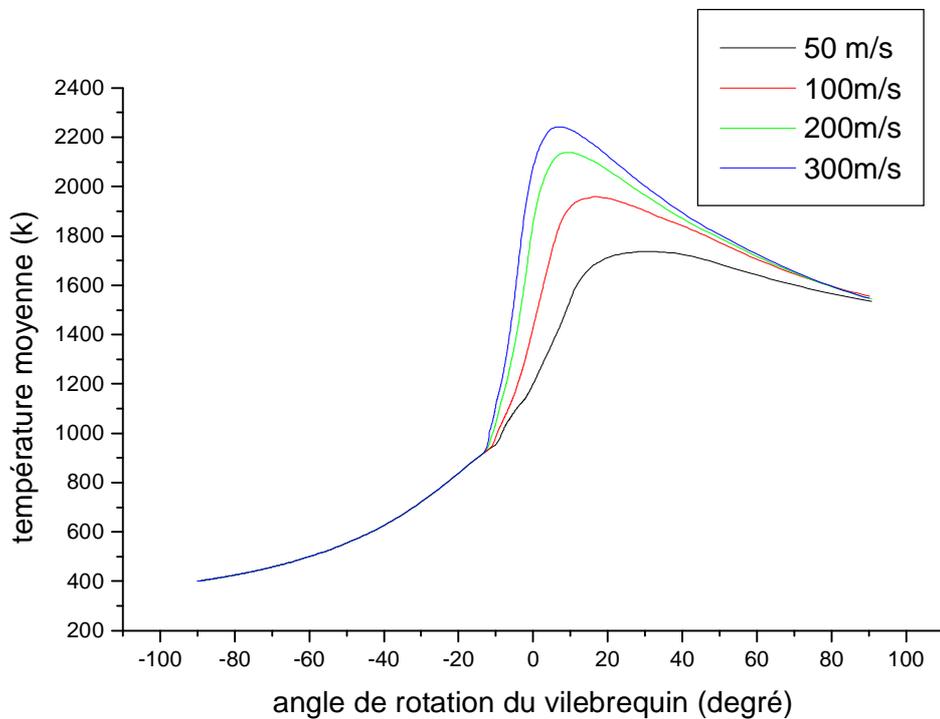


Fig.IV.16.2 : Evolution de la température moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes vitesses d'injection.

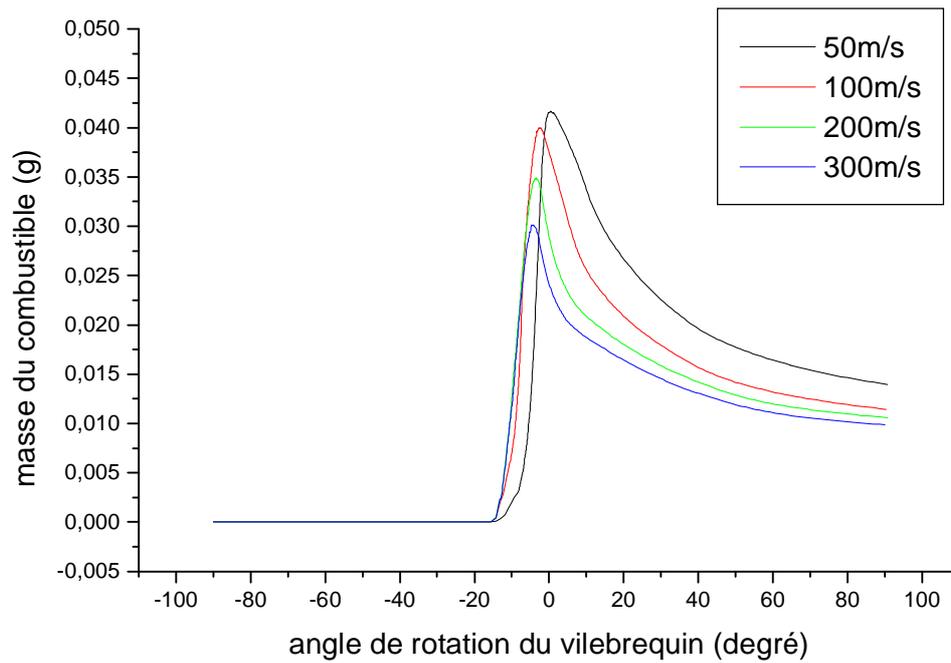


Fig.IV.16.3 : Evolution de la masse du combustible en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes vitesses d'injection.

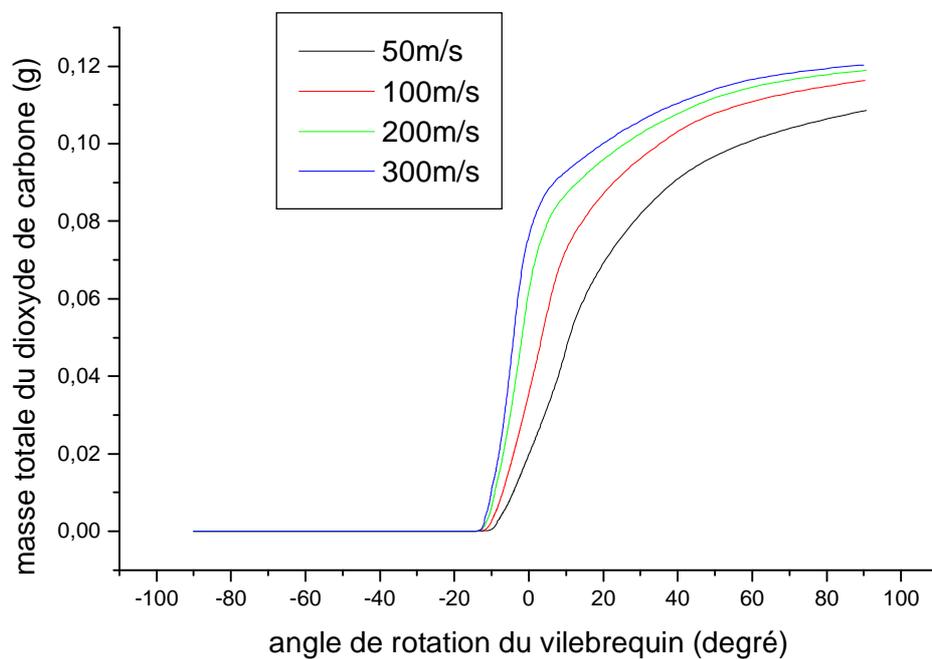


Fig.IV.16.4 : Evolution de la masse totale du CO_2 en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes vitesses d'injection.

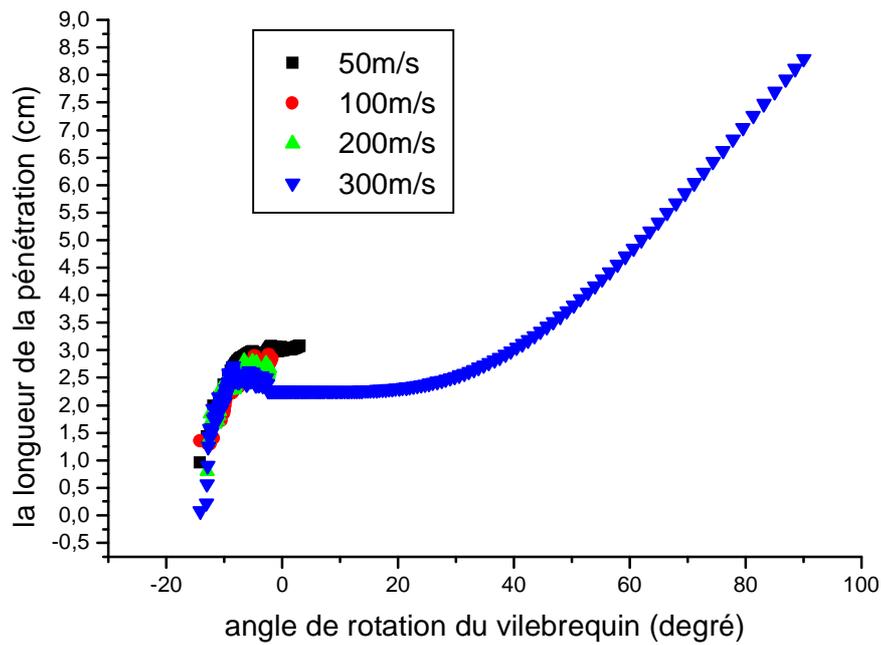


Fig.IV.16.5 : Evolution de la pénétration en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes vitesses d'injection.

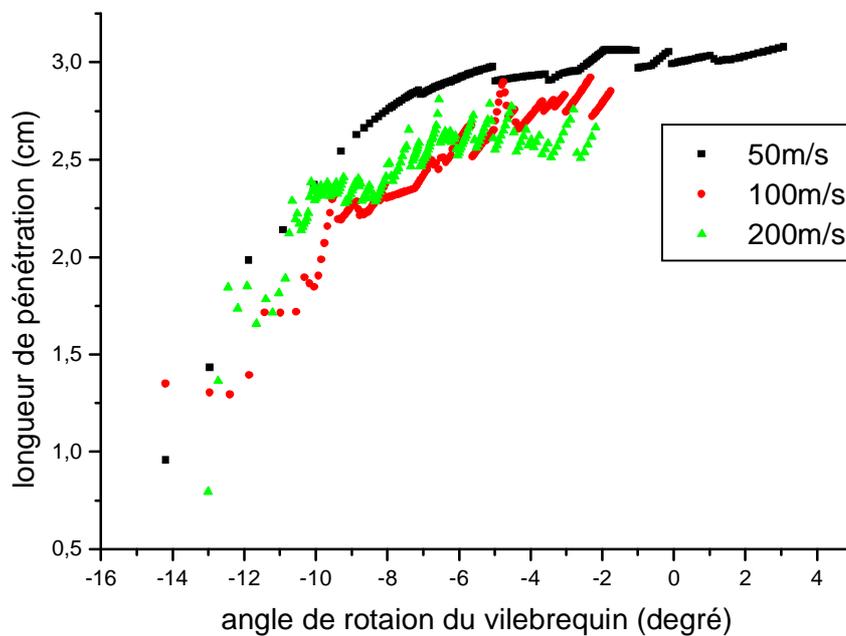
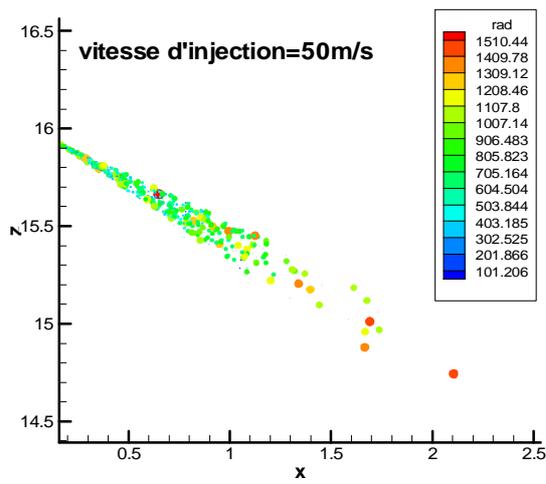
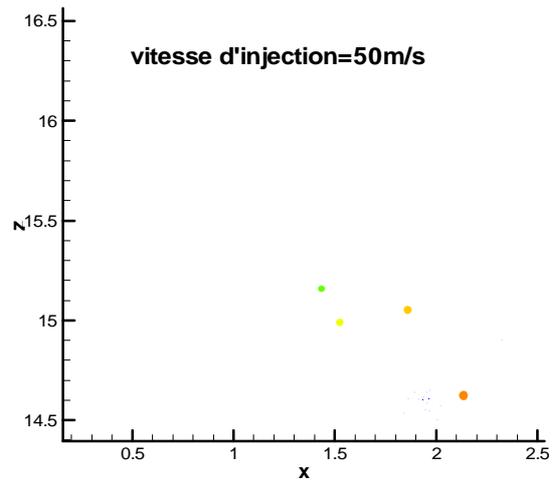


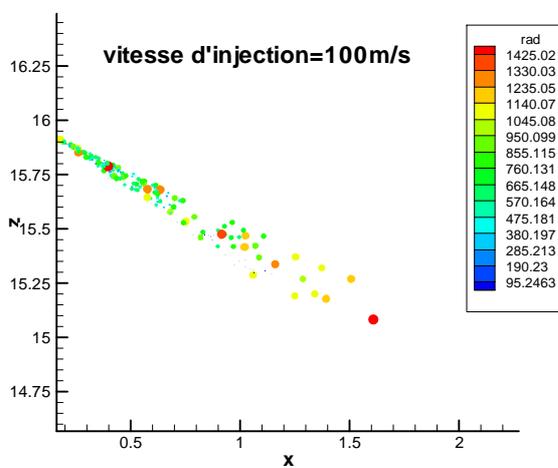
Fig.IV.16.6 : Evolution de la pénétration en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes vitesses d'injection.



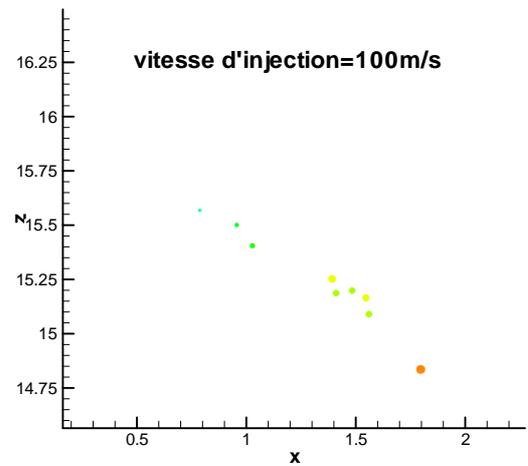
a) à 10.02° avant le PMH



b) au PMH

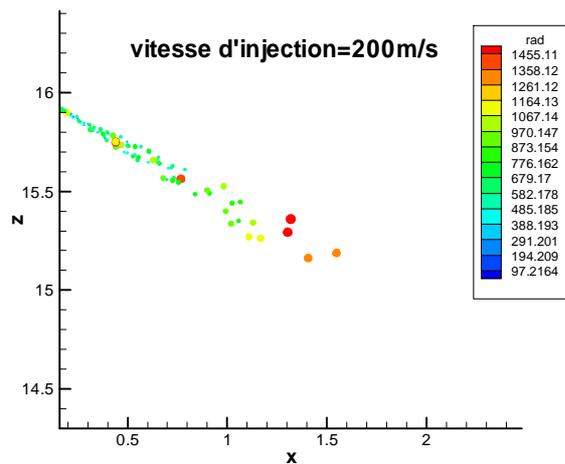


c) à 10.02° avant le PMH

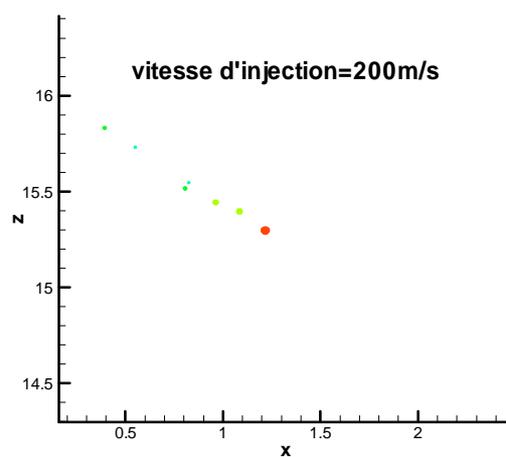


d) 2° avant le PMH

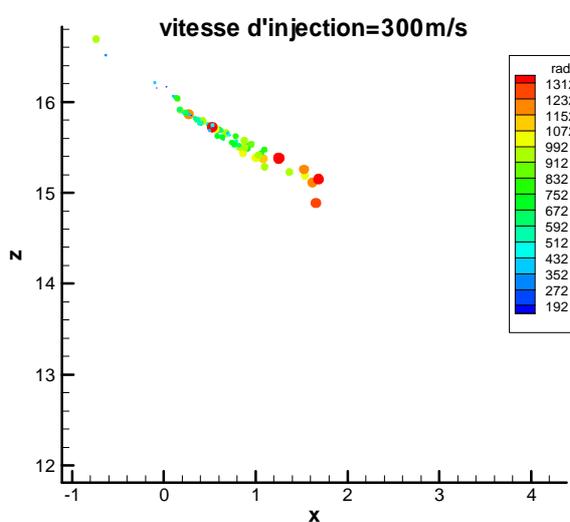
Fig.IV.16.7 : Distribution des gouttes pour différentes vitesses d'injection à différentes positions du piston.



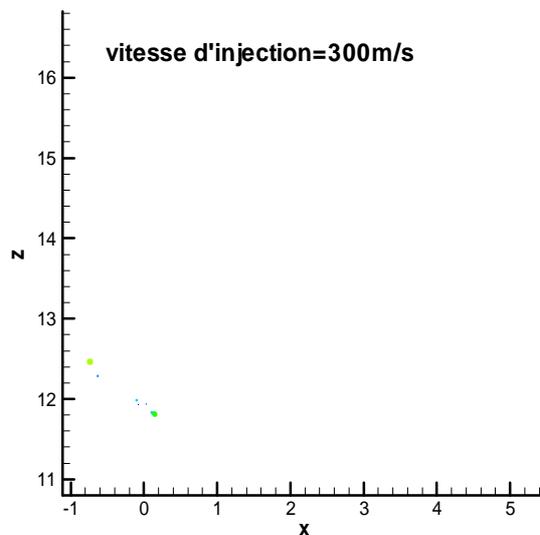
e) à 10.02° a vant le PMH



f) 2.5°avant le PMH (fin d'injection)



g) à 10.02° avant le PMH



h) 60° après le PMH

Fig.IV.16.7 : (Suite).

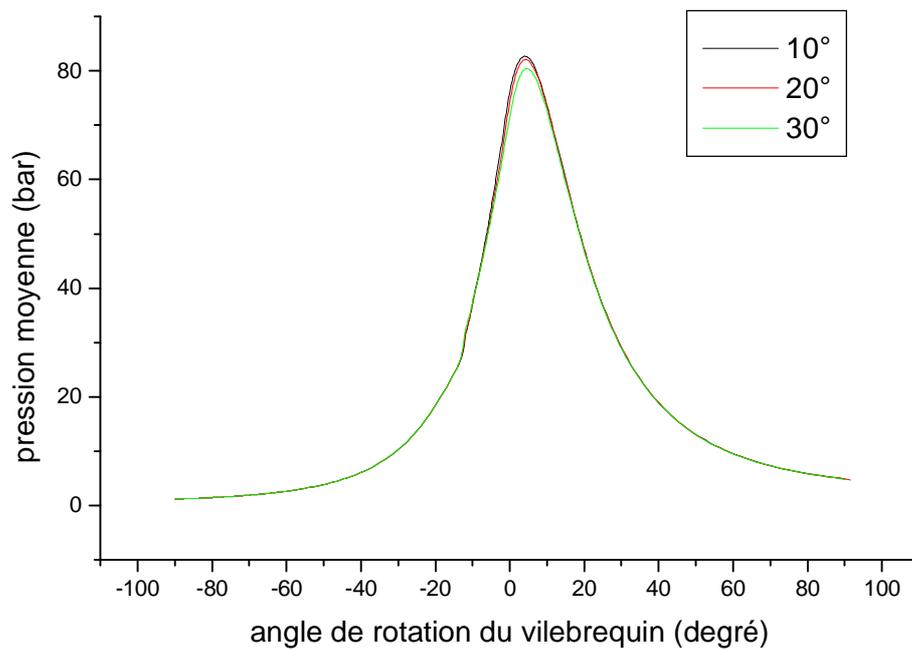


Fig.IV.17.1 : Evolution de la pression moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes épaisseurs du jet (angle dcone)

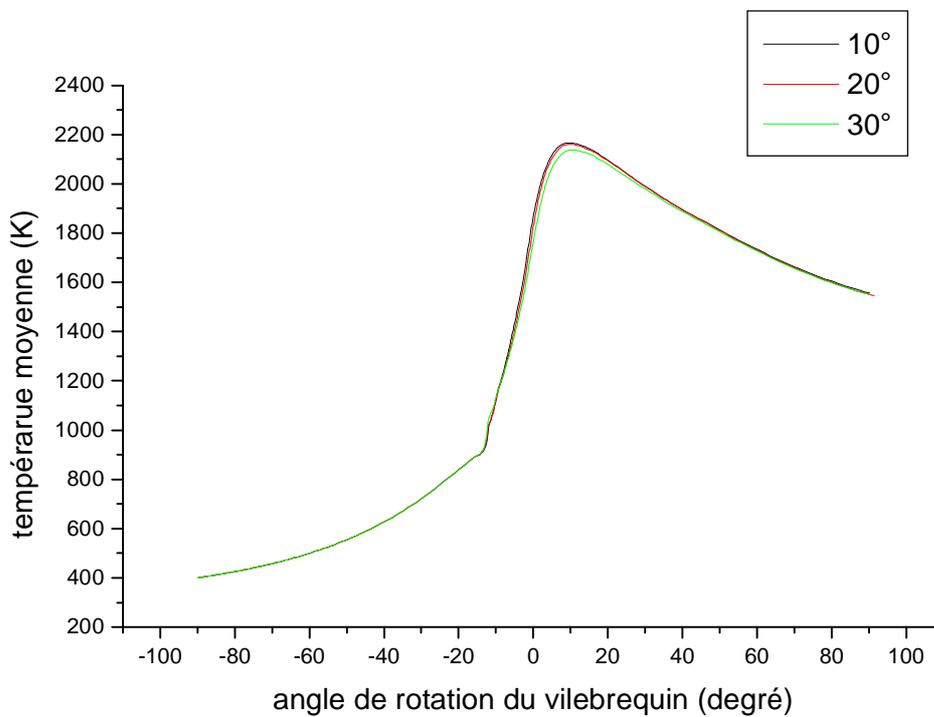


Fig.IV.17.2 : Evolution de la température moyenne en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes épaisseurs du jet (angle dcone)

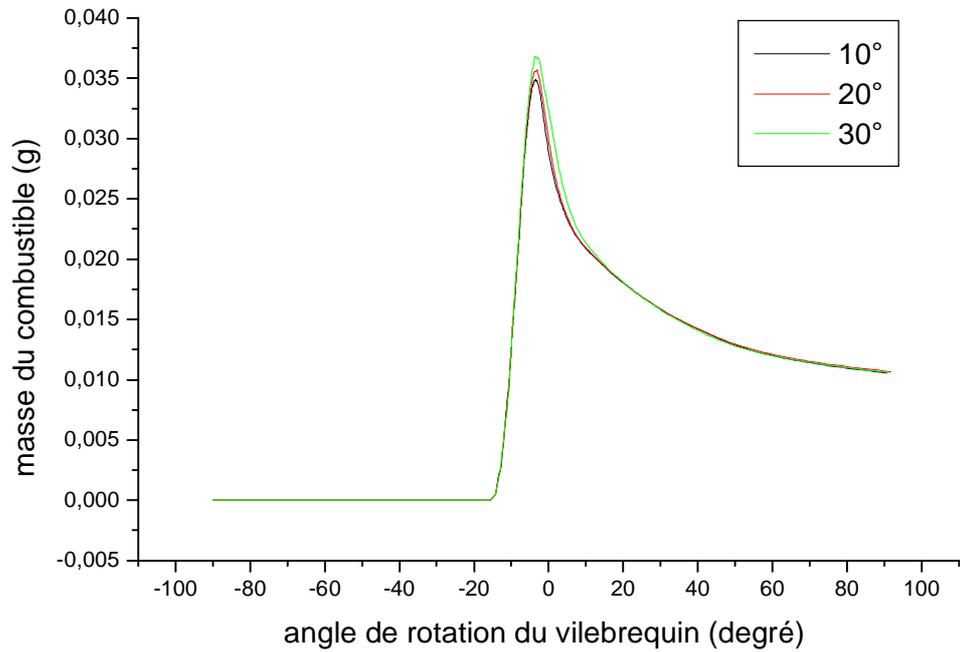


Fig.IV.17.3 : Evolution de la masse du combustible en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes épaisseurs du jet (angle dcone)

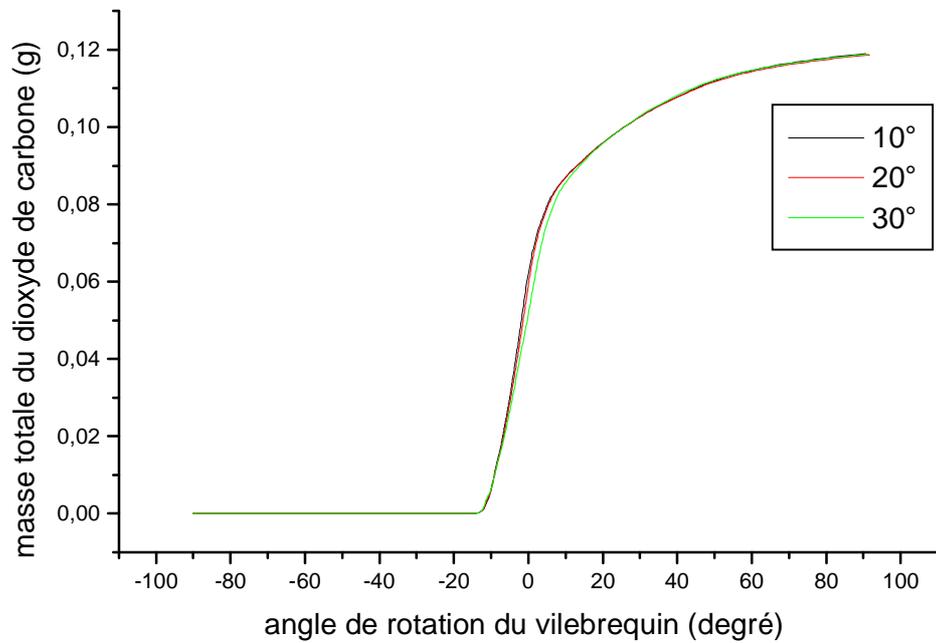


Fig.IV.17.4 : Evolution de la masse totale du CO_2 en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes épaisseurs du jet (angle dcone)

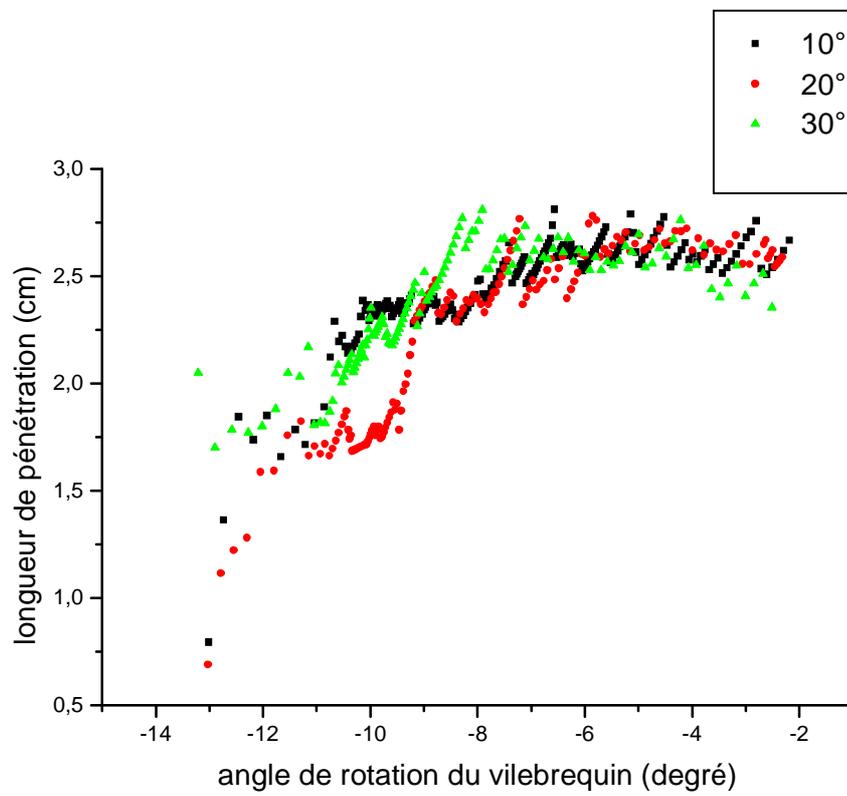
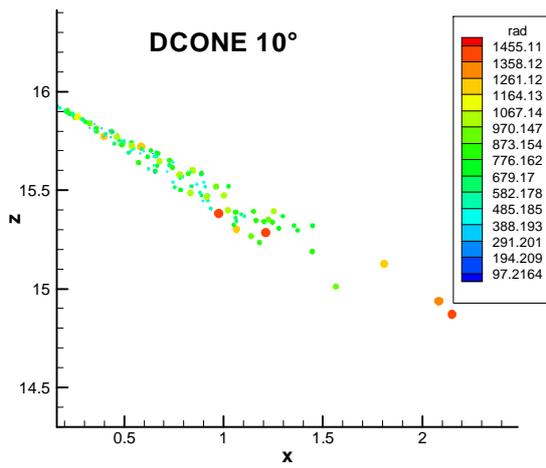
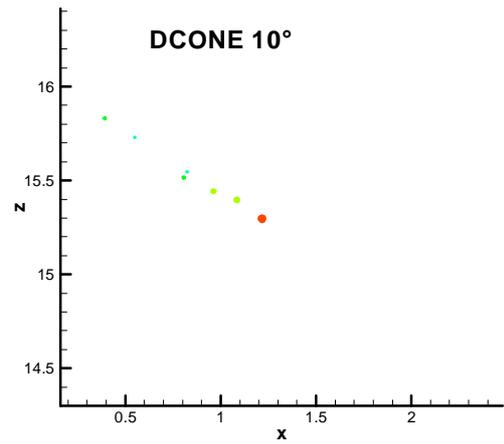


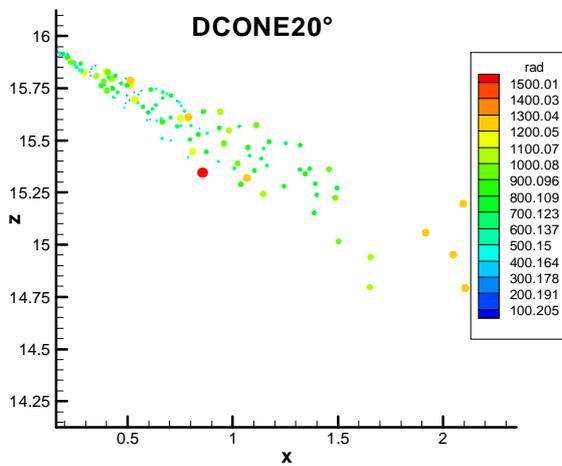
Fig.IV.17.5 : Evolution de la pénétration en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin pour différentes épaisseurs du jet (angle dcone)



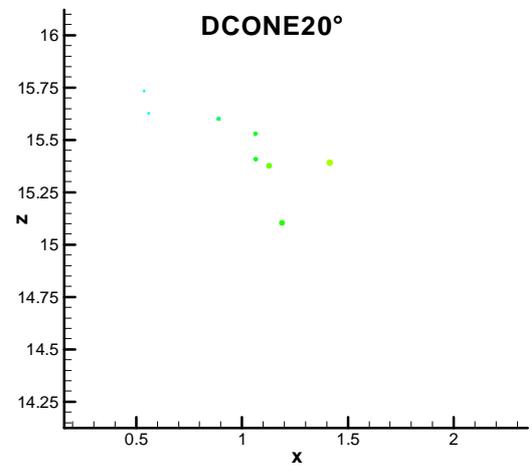
a) 8.04° avant le PMH



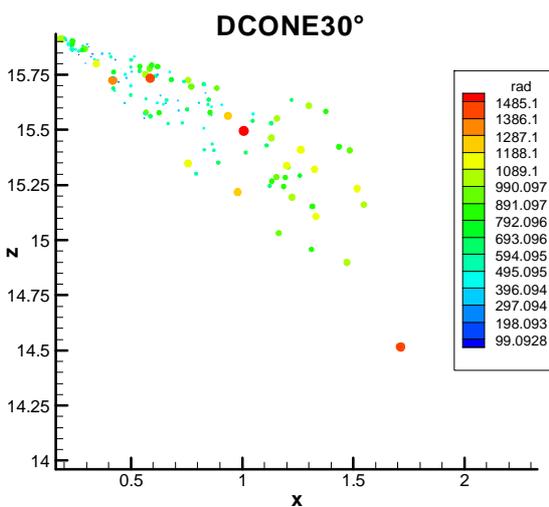
b) 2.5° avant le PMH (fin d'injection)



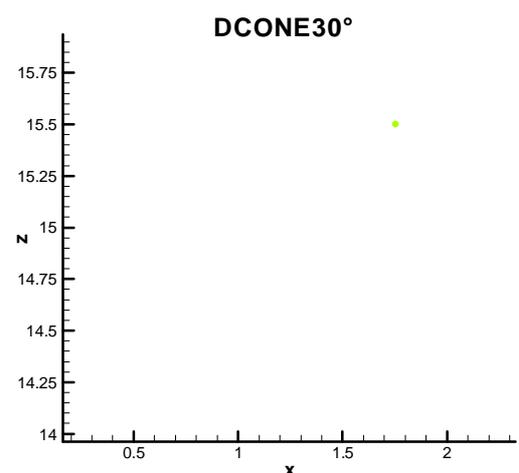
c) 8.04° avant le PMH



d) 2.5° avant le PMH (fin d'injection)



e) 8.04° avant le PMH



f) 2.5° avant le PMH (fin d'injection)

Fig.IV.17.6: Distribution des gouttes pour différentes épaisseurs d'injection (dcone) à différentes positions du piston.

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

L'étude du comportement du spray et la compréhension des différents phénomènes qui régissent l'évolution du spray du carburant dans les moteurs Diesel sont devenues très importantes et fondamentales pour avoir un bon rendement de la combustion et une opération efficace et propre d'un moteur Diesel.

Dans ce modeste travail, notre étude a porté sur la dynamique et l'énergétique des gouttelettes lors de l'injection du spray dans une chambre de combustion d'un moteur Diesel à injection directe.

Les résultats de cette étude révèlent que :

- La vitesse d'injection a un effet très important sur le taux d'évaporation du combustible et par conséquent sur la pénétration du spray " la longueur du jet", et la pression moyenne.
- L'angle d'injection a un effet moins important que la vitesse d'injection sur le comportement du spray.
- En ce qui concerne l'épaisseur du jet on peut dire que son effet est faible en comparant avec l'effet de l'angle d'injection et la vitesse d'injection.

Le champ aérodynamique a un effet important sur le brassage du mélange air-carburant et sur la combustion, dans la chambre de combustion du moteur.

Les résultats ont montré aussi que l'évaporation des gouttelettes du combustible ne s'achève pas au même instant que l'injection.

Cette étude est une étude préliminaire, qui considère de manière simplifiée les phénomènes qui existent réellement dans le moteur. Il serait très intéressant de continuer cette étude en introduisant l'effet du tourbillonnement (swirl) qui contribue au bon mélange pour avoir une bonne combustion.

NOMENCLATURE

$\mathbf{\hat{A}}_a$	Vecteur surface normale à la facette a d'une cellule de base $[m^2]$
$\mathbf{\hat{A}}'_b$	Vecteur surface d'une cellule auxiliaire de quantité de mouvement $[m^2]$
$\mathbf{\hat{A}}''_g$	Vecteur surface d'une cellule auxiliaire utilisée pour le calcul des vitesses Normales des facettes des cellules de base $[m^2]$
a	Coefficient de tension superficielle du liquide $[N.m^{-1}]$
b	Facteur de décentrage entre deux gouttes entrant en collision
C_l	Chaleur spécifique du carburant liquide $[j.kg^{-1}.k^{-1}]$
C_p	Chaleur spécifique du mélange à pression constante $[j.kg^{-1}.k^{-1}]$
C_{pm}	Chaleur spécifique de l'espèce m à pression constante $[j.kg^{-1}.k^{-1}]$
C_v	Chaleur spécifique du mélange à volume constant $[j.kg^{-1}.k^{-1}]$
C_{vm}	Chaleur spécifique de l'espèce m à volume constant $[j.kg^{-1}.k^{-1}]$
D	Diffusivité (loi de Fick) $[m^2.s^{-1}]$
h_m	Enthalpie spécifique de l'espèce m $[j.kg^{-1}]$
I	Énergie interne spécifique du mélange $[j.kg^{-1}]$
I_m	Énergie interne de l'espèce m $[j.kg^{-1}]$
$\mathbf{\hat{J}}$	Vecteur densité de flux de chaleur $[W.m^{-2}]$
K	Conductivité $[W.m^{-1}.K^{-1}]$
L	Chaleur latente de l'évaporation $[j.kg^{-1}]$
M_{ijk}	Masse contenue dans la cellule (i,j,k) $[kg]$
M'_{ijk}	Masse contenue dans la cellule auxiliaire (i,j,k) de quantité de mouvement $[kg]$
M''_{ijk}	Masse contenue dans la cellule auxiliaire centrée sur la face a de la cellule (i,j,k) $[kg]$
N_p	Nombre des gouttelettes contenues dans une particule
P	Pression du mélange $[N.m^{-2}]$

P_v	Pression de vapeur saturante du carburant [$N.m^{-2}$]
\mathcal{Q}^s	Terme source qui représente l'énergie fournie ou absorbée par le spray [$J.m^{-3}.s^{-1}$]
R_0	Constante universelle des gaz parfaits [$J.mole^{-1}.K^{-1}$]
r_{32}	Rayon moyen de Sauter d'un nuage de goutte [cm]
t	Variable temps [s]
t_{bu}	Temps de breakup [s]
T	Température du mélange [K]
$\dot{\mathbf{u}}$	Vecteur vitesse du mélange de composantes (u,v,w) [$m.s^{-1}$]
u'_p	Vitesse fluctuante turbulente de l'écoulement [$m.s^{-1}$]
V_p	Vitesse absolue de la goutte [$m.s^{-1}$]
V_{ijk}^n	Volume de cellule (i,j,k) au pas de temps n [m^3]
V_{ijk}^A	Volume de cellule (i,j,k) en fin de la phase A [m^3]
V_{ijk}^B	Volume de cellule (i,j,k) en fin de la phase B [m^3]
W_m	Masse molaire de l'espèce m [$kg.mole^{-1}$]
\mathcal{W}^s	Terme source d'énergie cinétique turbulente issu de l'interaction fluide/spray [$J.m^{-3}.s^{-1}$]
x, y, z	Variables d'espace
$x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk}$	Coordonnées du sommet n°4 de la cellule (i,j,k)
$x_{ijk}^c, y_{ijk}^c, z_{ijk}^c$	Coordonnées du centre de la cellule (i,j,k)
X^n	Variable X au pas de temps n
X^A	Variable X obtenue à la fin de la phase A
X^B	Variable X obtenue à la fin de la phase B
X^{n+1}	Variable X au pas de temps (n+1)
X'_p	Variable de la goutte calculée en tenant compte des phénomènes de collision et de fragmentation
X_p^A	Variable de la goutte calculée à la phase A
X_p^B	Variable de la goutte calculée à la phase B

Y_m^A	Fraction massique de l'espèce m en fin de la phase A
Y_m^B	Fraction massique de l'espèce m en fin de la phase B
y_1	Fraction massique de vapeur de carburant au-delà de la couche limite autour de la goutte
y_1^*	Fraction massique de vapeur de carburant prise à la surface de la goutte
y_p	Déformation adimensionnée par le rayon b de la goutte
$\dot{\gamma}_p$	Taux de déformation de la goutte

Lettres grecques

d_{m1}	Symbole de kronecker valant 1 si $m=1$ et 0 sinon
Δt	Pas de temps de calcul utilisé pour la discrétisation temporelle [s]
e	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente [$m^2.s^{-3}$]
\mathbf{s}	Tenseur des contraintes visqueuses [$N.m^{-2}$]
x_m	Représente une mole de l'espèce m
r	Masse volumique du mélange [$kg.m^{-3}$]
r_m	Masse volumique de l'espèce m [$kg.m^{-3}$]
r_d	Masse volumique du liquide (combustible) [$kg.m^{-3}$]
$\dot{\omega}^s$	Terme source provenant du spray pour le carburant [$kg.m^{-3}.s^{-1}$]
$\dot{\omega}_r$	Taux de réaction de la réaction chimique n°r [$mole.m^{-3}.s^{-1}$]
f_D	Paramètre d'implicitation des terme diffusifs
f_p	Paramètre d'implicitation des termes de pression
l, m	Coefficients de viscosité [$kg.m^{-1}.s^{-1}$]
t_c	Échelle de temps caractéristique de la chimie [s]
t_t	Échelle de temps caractéristique de la turbulence [s]

Nombres sans dimensions

Sh_d	Nombre de Sherwood
We_e	Nombre de Weber

Pr	Nombre de Prandtl
Re_t	Nombre de Reynolds turbulent
Sc	Nombre de Schmidt
N_u	Nombre de Nusselt

Abstract :

In direct injection (DI) Diesel engines the fuel efficiency and pollutants formation are strongly influenced by the various phenomena which govern the evolution of the fuel spray. In particular, the liquid jet atomization and the breakup of droplets or lumps of fluid into smaller fragments make a fundamental contribution to an efficient and clean engine operation. Consequently, it is important that one studies the injection of the fuel in the Diesel engines.

The computations presented in this study have conducted with a KIVA-II, based code, in order to simulate the spray in the combustion chamber of direct injection Diesel engines at injection and combustion of the fuel.

The evolution of the spray is governed by a probability density function which is used in the selection of particle radius at injection, droplet collision calculation, droplet breakup calculation and the calculation of droplet turbulent dispersion.

In this study, the stochastic particle technique is used to solve the spray equation. This approach is a combination of the discrete particle methods and Monte Carlo method.

The turbulence model utilized in these computations is the equation k- ϵ model, modified to include the effects of the spray turbulence interaction.

A study on the influence of velocity at injector, injection angle, and the thickness of the spray was carried out.

This study made it possible to obtain numerical results which are divided into two parts, the first part corresponds to the gas phase and the second relates to the liquid phase.

Keywords: Spray, Diesel engines, KIVA II.

Résumé:

Dans les moteurs Diesel à injection directe le rendement de la combustion et la formation de polluants sont fortement influencés par les divers phénomènes qui régissent l'évolution du spray du carburant. En particulier, l'atomisation du spray (jet) du liquide et le fractionnement des gouttelettes, apportent une contribution fondamentale à une opération efficace et propre d'un moteur. En conséquence, il y a un grand intérêt à étudier l'injection du carburant dans les moteurs Diesel.

Dans cette étude, le code de calcul KIVA II (simulateur des écoulements réactifs turbulents, multidimensionnels et instationnaires) a été utilisé pour simuler le jet du carburant dans une chambre de combustion d'un moteur Diesel à injection directe lors de l'injection et la combustion du combustible.

L'évolution du spray est simulée en utilisant la fonction densité de probabilité qui a été utilisée pour choisir les rayons des gouttes à l'injection, au calcul de la collision, la fragmentation et la dispersion turbulente des gouttes.

Dans cette étude, la technique stochastique a été utilisée pour faire la résolution de l'équation du spray. Cette approche est composée de la méthode de Monté Carlo et la méthode discrète de la particule. Le model de turbulence k- ϵ tenant compte de l'effet de l'interaction turbulence-spray a été employé.

Les effets de la vitesse d'injection, l'angle d'injection, et l'épaisseur du jet ont été mis en évidence.

Cette étude a permis d'obtenir des résultats numériques divisés en deux parties, la première partie correspond à la phase gazeuse et la deuxième concerne la phase liquide.

Mots clés : spray, moteur Diesel, code KIVA II.

