

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**  
**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA**  
**RECHERCHE SCIENTIFIQUE**  
**UNIVERSITE DE CONSTANTINE**

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

**N° d'ordre : 302/Mag/2006**  
**Série : 010/GM/2006**

**MEMOIRE DE MAGISTER**

**SPECIALITE GENIE MECANIQUE**

**OPTION THERMOFLUIDE**

**PRESENTEE PAR KABAR SELOUA**

**THEME**

---

**ETUDE NUMERIQUE DE L'EFFET DU TYPE DE CARBURANT SUR LES**  
**EMISSIONS POLLUANTES DANS UN MOTEUR**

---

**Soutenu-le : 29/11/2006**

**DEVANT LE JURY**

**PRESIDENT : Mr BOUCHOUCHA ALI**  
**RAPORTEUR: Mr KADJA MAHFOUD**  
**MEMBRES : Mr BENYESAAD SMAIL**  
**Mr TALBI KAMAL**

**PROF. Univ. De Constantine**  
**PROF. Univ. De Constantine**  
**M.C Univ. De Constantine**  
**M.C Univ. De Constantine**

## REMERCIEMENTS

Je tiens en premier lieu à remercier sincèrement Monsieur **M. KADJA**, professeur à l'Université de Constantine de m'avoir accordé sa confiance durant la réalisation de ce mémoire.

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur **A. BOUCHOUCHA**, professeur à l'Université de Constantine, à Monsieur **S. BENYESAAD**, Maître de Conférence à l'Université de Constantine et à Monsieur **K. TALBI**, Maître de Conférence à l'Université de Constantine, d'avoir accepté de participer à ce jury et d'avoir pris le temps d'expertiser ce travail.

Je remercie vivement tous les enseignants du Département de Génie Mécanique qui m'ont transmis tout leur savoir pendant toutes ces années d'études.

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

## RESUME

Le réchauffement de l'atmosphère terrestre et l'épuisement des puits pétroliers estimé dans les trois décennies prochaines ont poussés le monde à se plonger sur l'étude des phénomènes physiques et chimique de la combustion pour diminuer l'émission des gaz polluants par les moteurs en baissant la consommation en carburant tout en gardant les performances du moteur.

Dans ce travail, les concentration des différentes espèces polluantes CO, CO<sub>2</sub>, HC et NO sont calculées numériquement en utilisant le code KIVA2 pour quatre carburant : C<sub>14</sub>H<sub>30</sub> n-tetradecane, C<sub>13</sub>H<sub>28</sub> tridécanne, Df2 diesel #2, C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> iso-octane et C<sub>7</sub>H<sub>16</sub> n-heptane dans un moteur Diesel à injection directe en introduisant les réactions chimiques cinétiques de Zeldovich pour la formation du NO et la réaction globale d'oxydation du carburant et les réactions d'équilibres contribuant à la formation des polluants . Cette étude nous permet de faire une comparaison quantitative des polluants des différents carburants.

**Mot clés :** Code KIVA II, moteur diesel, combustion turbulente, gaz polluants, carburants.

## ABSTRACT

The reheating of the Earth's atmosphere and the exhaustion of the oil estimated in the three next decades pushed the world to study the physical phenomena and chemical phenomena of combustion to decrease the emission of pollutant gases by the engines by lowering consumption of fuel and keeping the performances of the engine.

In this work, the concentration of the various pollutant species CO, CO<sub>2</sub>, HC and NO are calculated numerically by using code KIVA II for fore fuels: C<sub>14</sub>H<sub>30</sub> n-tetradecane, diesel Df2 # 2, C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> iso-octane and C<sub>7</sub>H<sub>16</sub> N-heptane in a diesel engine with direct injection by introducing the kinetic chemical reactions of Zeldovich to the formation of NO and the total reaction of oxidation of the fuel and equilibrium reactions contributing to the formation of the pollutants. This study enables us to make a quantitative comparison of the pollutants of different fuels.

**Key words:** Code KIVA II, turbulent combustion, pollutant gases, fuels.

## ملخص

إن ارتفاع الحرارة للغلاف الجوي المحيط بالأرض و انعدام البترول المتوقع في الثلاثة العقود القادمة، دفع العالم أن يدرس الظواهر الفيزيائية و الكيميائية للإحتراق لتخفيض انبعاث غازات ملوثة من طرف المحركات وهذا بتخفيض استهلاك الوقود مع الاحتفاظ بمرودود المحرك.

ندرس في هذا البحث، تركيزات لمختلف الملوثات تم حسابها عدديا باستخدام البرنامج KIVA II لأربعة وقود :  $C_{13}H_{28}$  tridécane،  $C_{14}H_{30}$  n-tetradecane،  $C_7H_{16}$  n-heptane و  $C_8H_{18}$  iso-octane، diesel#2، في محرك ديازل بالحقن المباشر وذلك باستعمال مختلف التفاعلات الكيميائية الحركية لزيلدوفيتش لتكوين NO و معادلة التفاعل الكلي لأكسدة الوقود وتفاعلات التوازن التي تساهم في تكوين الملوثات.

بهذه الدراسة نستطيع التفريق بين كمية الغازات الملوثة المبعوثة مع غازات احتراق الوقود الأربعة.

**الكلمات المفتاحية :** البرنامج KIVA II، محرك ديازل، الوقود الغازات الملوثة، الاحتراق المضطرب.

## NOMENCLATURE

$\mathbf{\hat{A}}_a$	Vecteur surface normale à la facette $a$ d'une cellule de base
$\mathbf{\hat{A}}'_b$	Vecteur surface d'une cellule auxiliaire de quantité de mouvement
$\mathbf{\hat{A}}''_g$	Vecteur surface d'une cellule auxiliaire utilisée pour le calcul des vitesses
	Normales des facettes des cellules de base
$a$	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 [ $K$ ]
$\mathbf{\dot{u}}$	Vecteur vitesse du mélange de composantes (u,v,w)
$u'_p$	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
$\Delta t$	Pas de temps de calcul utilisé pour la discrétisation temporelle [s]
$\epsilon$	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) [ $kg.m^{-3}$ ]
$\dot{m}^s$	Terme source provenant du spray pour le carburant [ $kg.m^{-3}.s^{-1}$ ]
$\dot{w}_r$	Taux de réaction de la réaction chimique n°r [ $mole.m^{-3}.s^{-1}$ ]
$f_D$	Paramètre d'implication des terme diffusifs
$f_p$	Paramètre d'implication des termes de pression
$l, m$	Coefficients de viscosité [ $kg.m^{-1}.s^{-1}$ ]

### Nombres sans dimensions

$Sh_d$	Nombre de Sherwood
$We$	Nombre de Weber
$Pr$	Nombre de Prandtl
$Re_{it}$	Nombre de Reynolds turbulent
$Sc$	Nombre de Schmidt
$Nu$	Nombre de Nusselt

## SOMMAIRE

**Remerciements.**

**Dédicaces.**

**Résumés.**

**Nomenclature.**

**Sommaire.**

### **Chapitre I**

#### **Introduction**

I- Introduction.....	1
I-1-Transport routier et pollution en Algérie. ....	2
I-1-1- Facteurs de dégradation de la qualité d'air en Algérie. ....	3
I-2- Caractéristiques des gaz de combustion polluants.....	4
I-2-1- Monoxyde de carbone.....	5
I-2-2- Gaz carbonique.....	5
I-2-3- Oxydes d'azotes.....	6
I-2-3- Hydrocarbures.....	7
I-3- Nouvelles voies envisagées pour la réduction de la consommation des carburants et des émissions de polluants.....	7
I-3-1- Amélioration de la combustion dans les moteurs.....	8
I-3-2- Les systèmes de post-traitement des gaz d'échappement.....	9
I-3-3- Perspectives de recherche sur la formulation des carburants....	10
I-4- Etude bibliographique sur les carburants alternatifs.....	10
I-5- Objectif du travail.....	12
I-6- Contenu du mémoire.....	13

### **Chapitre II**

#### **Les hydrocarbures**

II-1- Introduction.....	14
II-2- Hydrocarbures purs.....	15
II-2-1- Les hydrocarbures saturés.....	16
A- les paraffines ou alcanes à chaînes carbonées ouvertes.....	16
B- Les paraffines à chaîne fermée saturée.....	16
II-2-2- Les hydrocarbures insaturés.....	16
A- Les oléfines ou alcènes.....	16

B- Les acétyléniques.....	17
II-2-3-Les hydrocarbures aromatiques.....	17
II-3- Oxydation des hydrocarbures.....	17

### Chapitre III      **Formulation mathématique.**

III-1- Le code KIVA II.....	18
III-2- Equations des écoulements réactifs turbulents avec jet.....	18
III-2-1- La phase gazeuse.....	19
III-2-1-1- Equation de continuité pour l'espèce $m$ .....	19
III-2-1-2- Equation de continuité pour le mélange.....	20
III-2-1-3- Equations de conservation de quantité de mouvement.....	20
III-2-1-4- Equation de conservation de l'énergie.....	21
III-2-1-5- Equation de transport de l'énergie cinétique turbulente.....	22
III-2-1-6- Equation de transport du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente.....	22
III-3-Réactions chimiques.....	24
III-3-1-Mécanisme de la réaction globale.....	25
III-3-2- Les réactions d'équilibre.....	26
III-3-3- Les réactions cinétiques.....	27
III-4- La phase liquide.....	31
III-4-1- Collision.....	32
III-4-2- Breakup (fragmentation).....	33
III-4-3- Evaporation de la goutte.....	36
III-4-4- Termes interaction gaz-jet.....	38
III-5- Equations d'état.....	38
III-6- Conditions aux limites.....	39
III-6- 1-Condition pour la vitesse.....	39
III-6- 2-Condition pour la température.....	40
III-6- 3-Condition pour l'énergie cinétique turbulente $k$ .....	41
III-6- 3-Condition pour du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente $e$ .....	41

## Chapitre VI Modèle numérique

IV-1- Introduction.....	42
IV-2- Discrétisation temporelle.....	42
IV-3- Maillage et topologie.....	43
IV-3-1- Cellule de base.....	44
IV-3-2- Cellules auxiliaires.....	46
IV-4- La phase Lagrangienne (phase A et B).....	47
IV-4-1- Phase A.....	47
IV-4-1-1-Equation de conservation de la masse.....	47
IV-4-1-2- Equations de conservation de la quantité de Mouvement.....	48
IV-4-1-3- Equation de conservation de l'énergie.....	49
IV-4-1-4- Equations du modèle de turbulence k- $\epsilon$ .....	49
IV-4-1-5- Technique Stochastique de particule.....	50
IV-4-2- Phase B.....	50
IV-4-2- 1-Equation de conservation de la masse.....	51
IV-4-2- 2-Equation de conservation de la quantité de mouvement.....	52
IV-4-2- 3- Equation de conservation de l'énergie.....	55
IV-4-2- 4-Equations du modèle de turbulence k- $\epsilon$ .....	56
IV-4-2-4- Equations d'état.....	57
IV-4-2-4- Calcul de la vitesse de la gouttelette.....	57
IV-4-2-5- Algorithme <i>SIMPLE</i> .....	58
IV-4-3- Phase C.....	59
IV-5- Conditions aux limites.....	59
IV-6- Organigramme de calcul du code KIVA-II.....	60

## Chapitre V

### Résultats et discussions.

V-1-Introduction.....	62
V-2- Spécification du moteur .....	62
V-3- Paramètres physiques des carburants utilisés .....	64
V-4-Génération du maillage.....	64
V-5-Discussion des résultats.....	71
V-5-1-Formation des polluants.....	71

V-5-2- Performance du moteur .....72  
V-5-3- Comparaison des résultats pour les différents carburants.....73

**Chapitre IV    Conclusions**

Conclusion.....84

**Bibliographie**

---

# I.INTRODUCTION

---

## **I- Introduction :**

Les habitants de la planète et les générations futures doivent réduire autant que possible les atteintes à l'environnement et les coûts économiques liés à la production/consommation d'énergie. Aujourd'hui, le pétrole constitue encore la seule source d'énergie quasi exclusive pour le secteur des transports, contribuant aux moitiés à la consommation des ressources pétrolières mondiales [1]. Selon l'IFP (l'Institut français de pétrole) les réserves mondiales en pétrole sont en diminution, le maximum de la production étant situé selon les experts entre 2010 et 2030 [14], il y a donc nécessité de trouver des technologies permettant de réduire au maximum la pollution atmosphérique due aux transports routiers et la quantité de carburant consommée.

Jusqu'en 1970 [2], les critères les plus recherchés pour les carburants étaient ceux permettant d'obtenir les meilleures performances du véhicule en matière de mise en action, de faculté d'accélération et de vitesse maximale. Les recherches étaient portées alors sur l'ajustement des caractéristiques physiques des essences (volatilité, pression de vapeur) et à accroître leur indice d'octane, par tous les moyens possibles, notamment par l'adjonction de quantités importantes d'alkyles de plomb. Des gains de 20 à 30 % ont été ainsi enregistrés en une trentaine d'années. Parallèlement, à la fin des années 1970, est apparue la nécessité d'améliorer la qualité d'air tout particulièrement dans les zones urbaines en réduisant très fortement la pollution atmosphérique d'origine automobile. Ce fut l'époque de la suppression du plomb dans les essences aux Etats-Unis et au Japon, afin de permettre l'usage des pots d'échappement catalytiques. A partir de là l'Europe et les Etats Unis ont édicté des réglementations anti-pollution de plus en plus sévères.

Depuis la fin des années 1990 [2], un nouvel effort de recherche a donc été consenti par les fabricants de moteurs et les pétroliers pour améliorer encore plus la performance des moteurs Essence et Diesel. L'objectif étant de maintenir leur puissance actuelle tout en se conformant, d'une part, à la réglementation anti-pollution et, d'autre part, à l'objectif de diminution des émissions de CO<sub>2</sub> reliée à une diminution de la consommation en carburant. Les efforts étaient concentrés sur l'effet des propriétés physiques et chimiques des carburants sur les émissions polluantes. Actuellement les études sont radicalement différentes, les chercheurs essaient de déterminer l'influence des paramètres physiques de carburants de composition

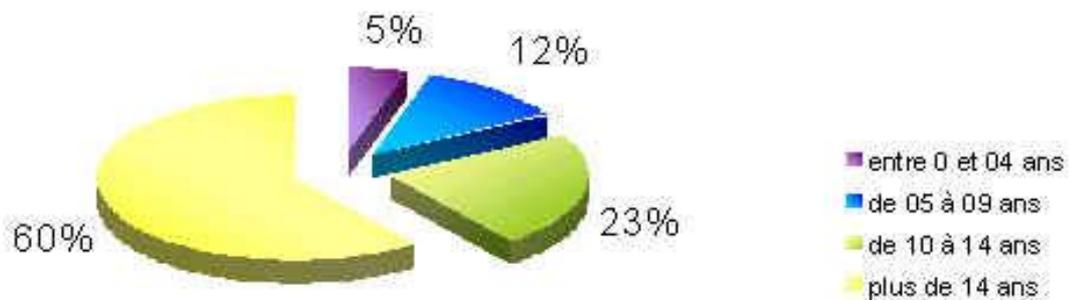
chimique très complexe et ainsi choisir le carburant pragmatique qui peut assurer le plus bas taux de gaz polluants émis dus aux véhicules.

### **I-1-Transport routier et pollution en Algérie :**

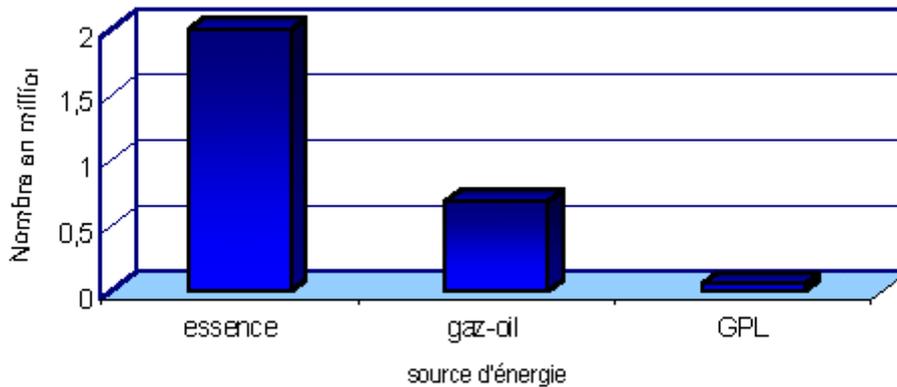
En Algérie un tiers de la consommation énergétique finale va vers le secteur des transports. Le transport routier en particulier, se caractérise par une dépendance importante vis-à-vis des produits pétroliers (essences et gasoil) et représente ainsi une des principales sources de pollution atmosphérique dans les grandes agglomérations urbaines du nord du pays (Alger, Oran, Constantine et Annaba).

En effet, en constante évolution depuis 1985 (5 % de croissance annuelle), le parc automobile algérien compte plus de 2.8 millions de véhicules tous genres confondus, se caractérisant par une certaine vétusté (60 % du parc a plus de 14 ans) **Figure I-1**.

Concernant la consommation de carburant, l'essence reste la principale source d'énergie pour plus de 75 % des véhicules de ce parc et en particulier pour 92,5% des véhicules de tourisme **Figure I-2**.



**Figure I-1** : Répartition du parc automobile algérien selon les tranches d'âge du véhicule arrêtée au 31/12/98 [3].



**Figure I-2** : Répartition du parc algérien selon la source d'énergie arrêtée 31/12/98 [3].

Malheureusement, jusqu'à ce jour, il n'existe pas de chiffres évaluant la part des émissions polluantes dues au secteur des transports, dans la pollution atmosphérique au niveau des grands centres urbains. En effet, hormis une étude du PNAE (Plan National d'Actions Environnementales) [3], effectuée sur la base de données relatives au parc de véhicules recensés en 1985, peu de mesures de concentration de polluants dans l'atmosphère ont été réalisées, faute de moyens d'observation et de surveillance. Pourtant, cette étude révélerait des niveaux de charges de pollution inquiétants puisque dans les seules régions du gouvernorat du grand Alger et des wilayates limitrophes (Blida, Boumerdès, Tipasa) la concentration dans l'air des fumées noires était 3 fois supérieure à la valeur indicative de l'OMS (Organisation Mondiale de la Santé) et celle du plomb (Pb) était de  $(1 \mu\text{g}/\text{m}^3)$  deux fois supérieure à la valeur indicative de l'OMS.

#### **I-1-1- Facteurs de dégradation de la qualité d'air en Algérie :**

Différents facteurs ont contribué à la dégradation de la qualité de l'air aux niveaux de ces régions, notamment :

- Une forte concentration du parc national.
- Une circulation en pente, très dense et peu fluide dans les centres urbains en l'absence de plans de circulation étudiés.
- La qualité des carburants disponibles sur le marché national, non conformes aux normes internationales.

L'absence d'une législation adéquate (normes d'émissions) et d'une politique de contrôle de ce type de pollution est responsable de l'accroissement de ces émissions. Le contrôle technique des véhicules est envisagé, mais tarde à être mis en place. L'introduction de l'essence sans plomb a été engagée, mais n'a pas bénéficié des investissements et incitations fiscales nécessaires à sa généralisation. De plus, aucune politique de sensibilisation à ce type de pollution n'a encore été mise en œuvre.

### **I-2- Caractéristiques des gaz de combustion polluants :**

Certains produits de combustion peuvent présenter un danger plus ou moins prononcé. Ainsi, les oxydes de carbone et d'azote sont toxiques, certains hydrocarbures (imbrûlés ou transformés lors des processus de combustion) semblent être classés parmi les substances cancérogènes. Les suies et les fumées sont également indésirables du point de vue de la pollution de l'air. Rentre également dans la rubrique de pollution, les effets nocifs de certains bruits qui accompagnent la combustion dans ces applications. Le **tableau I-1** illustre les propriétés nuisibles des principaux gaz polluants.

<b>Constituants</b>	<b>Propriétés nuisibles</b>
Oxyde d'azote, de carbone, de soufre, hydrocarbures, aldéhydes	Toxiques
Oxyde de carbone (manque d'oxygène)	Asphyxiant
Acroléine, formaldéhyde, oxyde de soufre, hydrocarbures.	Irritation des muqueuses (nez, yeux, gorge)
Hydrocarbures polycycliques aromatiques	Effet cancérigène
Aldéhydes, hydrocarbures.	Odeurs désagréables.
Suie, goudron, vapeur de combustible et huile, élément minéraux	Fumées

**Tableau I-1 :** Propriétés nuisibles des gaz polluants. [4]

Parmi les différents produits polluants qui peuvent être élaborés par la combustion, les oxydes de carbone, les hydrocarbures imbrûlés ou partiellement oxydés et les oxydes d'azotes sont considérés comme les principaux polluants produits par un moteur à combustion interne.

### **I-2-1- Monoxyde de carbone :**

Le monoxyde de carbone CO est un gaz incolore, inodore, sans vapeur, inflammable, formant avec l'air un mélange explosif, peu soluble. Effet toxique à partir d'une concentration de volume à 0,1 % d'exposition prolongée.

#### **Formation du monoxyde de carbone :**

Le mécanisme de formation du CO peut résulter : [4]

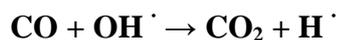
- De la combustion à faibles températures des flammes froides.
- De l'oxydation à haute température des hydrocarbures présents dans le combustible.
- De la décomposition des aldéhydes.
- De la dissociation du gaz carbonique à haute température.

### **I-2-2- Gaz carbonique :**

Le gaz carbonique CO<sub>2</sub> n'est pas toxique mais en proportion élevée dans l'atmosphère risque de provoquer un effet de « serre » et donc un réchauffement de l'atmosphère terrestre avec pour conséquence une fusion des glaces polaires et de ce fait une remontée des niveaux des océans submergeant les côtes à basse altitude.

### **Formation du gaz carbonique :**

La formation du gaz CO<sub>2</sub> carbonique résulte de la combustion complète de tout composé carboné avec parfois l'étape intermédiaire de la formation de l'oxyde de carbone puis de sa combustion selon les deux réactions suivantes dont la seconde est très lente et ne joue aucun rôle dans le mécanisme de la formation du CO<sub>2</sub> :

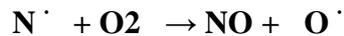
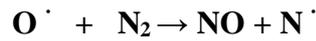


### **I-2-3-Oxydes d'azotes:**

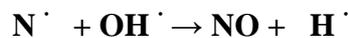
Les oxydes d'azotes sont: NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O, N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, qui sont globalement désignés par le symbole NO<sub>x</sub>. Les deux plus dangereux pour les voies respiratoires sont NO et NO<sub>2</sub>. Le premier est toxique, dès lors que la teneur dépasse 25 ppm. Le second est pire; il suffit de 5. En outre, NO<sub>2</sub> joue un rôle majeur dans le mécanisme conduisant à des composés comme le nitrate de peroxyacétyle (PAN), CH<sub>3</sub>COO<sub>2</sub>NO<sub>2</sub>, qui peut irriter gravement les yeux et les voies respiratoires. N<sub>2</sub>O, quand à lui, joue un rôle dans le phénomène du « trou d'ozone ». NO et NO<sub>2</sub> peuvent réagir avec l'eau et donner ainsi des solutions acides contenant les acides nitreux, surtout, nitrique ; ce processus peut contribuer au phénomène des « pluies acides ».

### **Formation de l'oxyde d'azote :**

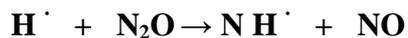
La formation d'oxyde d'azote, essentiellement sous forme d'oxyde nitrique NO est dû à l'oxydation l'azote de l'air ou de l'azote contenu dans le carburant ; dans les mélanges pauvres et aux températures et pressions élevées atteintes au moment de la combustion : [5]



Les teneurs en NO produits dans la chambre de combustion sont toujours inférieures à celles correspondant à l'équilibre thermodynamique à hautes températures car le temps nécessaire à cet équilibre est grand devant le temps de séjour dans le cylindre. Les deux premières réactions correspondent surtout au mélange pauvre ou proche de la stœchiométrie, au voisinage de la stœchiométrie ainsi que dans les mélanges riches peut se produire aussi la réaction :



A basses températures et avec des mélanges pauvres, la teneur en NO se fige par un mécanisme passant par N<sub>2</sub>O est devenue supérieure à celle de l'équilibre à la sortie des gaz d'échappement :



### **I-2-3-Hydrocarbures:**

Les hydrocarbures apportent aux gaz d'échappement une odeur désagréable et des propriétés irritantes. Les produits de réaction photo-chimique des hydrocarbures associés à ceux des oxydes d'azote créent une pollution appelée SMOG (contraction anglo-saxonne de smok (fumée) et de fog (brouillard)).

#### **Formation des hydrocarbures:**

Les hydrocarbures rejetés dans les gaz de combustion d'échappement résultent :

- Des phénomènes d'extinction de la flamme à proximité des parois où sa température est plus faible et dans les espaces morts.

- De la propagation incomplète de la flamme à proximité en mélange pauvre ou à faible charge (basse pression et température) qui se traduit par son extinction.
- En mélange riche, de la non combustion du carburant en excès, l'oxygène étant en quantité insuffisante.

### **I-3- Nouvelles voies envisagées pour la réduction de la consommation des carburants et des émissions de polluants : [6]**

Les efforts pour diminuer la consommation en carburant et les émissions de gaz polluants s'orientent aujourd'hui dans trois directions principales :

- L'amélioration de la combustion proprement dite par la conception de nouveaux moteurs plus performants, en utilisant les méthodes CFD (computational fluid dynamics) combinés à des essais expérimentaux et des modèles de cinétique chimique.
- L'amélioration des techniques de post-traitements des gaz émis à la sortie du moteur : pot catalytique, filtres à particules.
- La reformulation des carburants en essayant par des programmes expérimentaux d'établir des corrélations empiriques entre la composition chimiques du carburant et les émissions.

#### **I-3-1- Amélioration de la combustion dans les moteurs :**

L'effort de recherche des motoristes pour l'amélioration de la combustion dans les moteurs a principalement porté sur trois axes :

- La réduction de la cylindrée essentiellement dans les moteurs à essence qui permettra de réduire la consommation du carburant.
- Le système d'injection qui pour les nouveaux moteurs Diesel, a été développé depuis le début des années 2000 par une généralisation de l'injection du carburant sous-pression avec alimentation des injecteurs au travers d'une rampe commune à tous les cylindres (système common-rail). Ce système permet une pression d'injection identique dans tous les cylindres et donc un meilleur contrôle de l'alimentation et de la dispersion du carburant.
- Pour les moteurs à essence, dont le fonctionnement avec des mélanges stœchiométriques implique une surconsommation en carburant de 20% par rapport au moteur Diesel, une évolution vers l'injection du carburant directement dans la

chambre de combustion est appropriée. C'est notamment le cas des moteurs à combustion stratifiée encore en développement actuellement et pour lesquels l'injection est dirigée près de la bougie d'allumage, créant une zone riche en carburant. Ces conditions d'injection permettent l'auto-inflammation de mélange ayant une richesse proche de 0,3 alors que dans les conditions classiques de fonctionnement du moteur à essence le mélange ne peut s'enflammer que pour des richesses comprises entre 0,7 et 1,2. D'où à performance équivalente un gain de consommation en carburant de 10 à 20 %.

- Le mode de combustion actuellement développé dans les moteurs est la combustion en mélange pauvre homogène, que le carburant d'alimentation soit de l'essence ou du gazole. Ainsi une alternative prometteuse à la combustion en moteur Diesel est le moteur à allumage par compression de charge (HCCI) appelé également moteur CAI pour les applications développé à partir des moteurs essence. Cette technologie s'appuie sur le mode de fonctionnement d'un moteur Diesel mais pour lequel la charge avant auto-inflammation serait totalement homogène permettant un contrôle chimique de l'auto-inflammation, la température à l'intérieur du cylindre étant contrôlée par recirculation des gaz d'échappement. Ce mode de combustion utilisant des mélanges pauvres a pour avantage de diminuer la consommation en carburant des moteurs essence et, grâce à l'homogénéité chimique et thermique de la charge, de limiter les émissions de  $\text{NO}_x$  et de particules des moteurs Diesel. A moyen terme la création d'un seul moteur fonctionnant à l'essence et au gazole, voire avec d'autres carburants alternatifs comme le gaz naturel est peut être envisagé avant 2010.

### **I-3-2- Les systèmes de post-traitement des gaz d'échappement :**

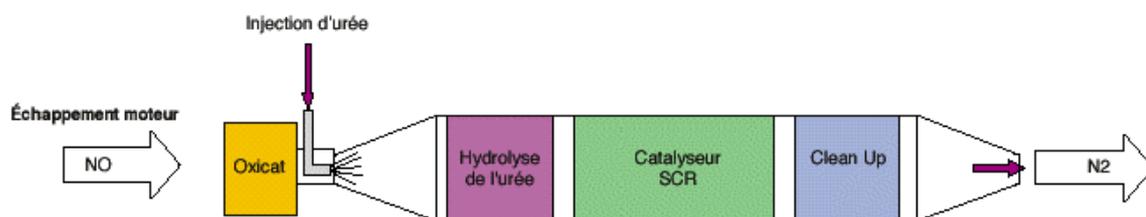
Le post-traitement des gaz d'échappements émis par les véhicules est assuré par des pots catalytiques qui ont été utilisés pour la première fois en France en 1909 . Leur but est de diminuer le taux des émissions des hydrocarbures imbrûlés (HC), CO et  $\text{NO}_x$  par des réactions à basses températures initiées en présence de catalyseurs pour transformer ces produits de combustion en eau et gaz carbonique [4].

Les motoristes se tournent aujourd'hui vers des systèmes de post-traitement des gaz d'échappement ayant pour but d'éliminer les  $\text{NO}_x$  et les particules de suies émises dans les moteurs Diesel. Ce mode de post-traitement des gaz d'échappement est utilisé sur les nouveaux modèles de moteurs à essence depuis une dizaine d'années. Il consiste en l'élimination simultanée des  $\text{NO}_x$ , du CO et des HC. Il permet une élimination quasi-totale de

ces polluants (99%) lorsque le catalyseur est chaud. Inconvénient majeur, le fonctionnement de ce système de post-traitement n'est optimum qu'avec la combustion d'un mélange air-carburant stœchiométrique. Il devient donc beaucoup moins efficace pour les nouveaux modes combustion en mélange pauvre.

Pour la réduction des émissions de  $\text{NO}_x$  deux technologies sont envisagées :

La réduction catalytique sélective et le piège à  $\text{NO}_x$ . La catalyse SCR est surtout envisagée pour les poids lourds. Elle consiste en l'injection d'un agent réducteur, généralement de l'urée pour éliminer tous les  $\text{NO}_x$  **Figure I-3**.



**Figure I-3** : Schéma d'un système SCR [6].

L'autre technologie envisagée est le piège à  $\text{NO}_x$  qui consiste en une alternance entre des périodes de stockage du polluant et celle d'élimination par catalyse trois voies. Cette période de régénération du piège dépend du mode de fonctionnement du moteur et de la température de la voie d'échappement. Il doit donc s'effectuer par contrôle électronique en fonction des paramètres de combustion du moteur (richesse de l'alimentation, température...).

### **I-3-3- Perspectives de recherche sur la formulation des carburants :**

Le concept de carburant propre, c'est-à-dire contribuant à une meilleure protection de l'environnement, s'est développé depuis le début des années 1980, tout d'abord aux États-Unis, puis dans le monde entier. L'amélioration de la formulation des carburants rend essentiel le développement de modèles chimiques de combustion des carburants usuels. Cependant en raison de la complexité de la composition de ces carburants il est quasiment impossible de disposer de modèles contenant toutes les espèces. De nombreuses équipes de chercheurs ont donc tenté de développer des mélanges représentatifs des carburants contenant au plus une dizaine d'espèce appartenant aux grandes familles de molécules présentes dans les carburants (alcanes, cyclanes, aromatiques...).

#### **I-4- Etude bibliographique sur les carburants alternatifs:**

La demande énergétique dans le monde a augmenté ces deux dernières décennies surtout avec la croissance économique de la chine. Les prix des carburants fossiles (d'origine pétrolière) ont flambé et les répercussions écologiques dues aux émissions des gaz polluants CO, CO<sub>2</sub> et NO<sub>x</sub> sont devenues préoccupantes, particulièrement le taux de CO<sub>2</sub> dans l'atmosphère qui ne cesse d'augmenté et qui a pour conséquence le réchauffement de la terre.

La pénurie et l'épuisement des ressources conventionnelles (carburants d'origine pétrolière) sont également un des soucis majeur des pays occidentaux, ce qui a incité les scientifiques à développer des carburants alternatif à savoir **les biocarburants, le gaz de pétrole liquéfié GPL, le gaz naturel véhicule GNV** et enfin **carburants liquides de synthèse**.

**Les biocarburants** sont des carburants d'origine végétale ou animale issus de la biomasse, ils semblent être source d'énergie "plus verte" (plus propre) et sont des combustibles alternatifs pouvant remplacer potentiellement les combustibles fossiles.

L'idée d'utilisée les huiles végétales au lieu du diesel n'est pas récente, elle date de 1928, mais elle a été abandonnée pour l'approvisionnement à bon marché en carburants fossiles.

En 1973, le projet a été relancé pour des soucis environnemental et économique surtout avec la diminution incessante des réserves pétrolière dans le monde et aux deux chocs pétroliers de années 70 [7]. Les biocarburants sont beaucoup moins polluants que les dérivés du pétrole, leur utilisation est particulièrement intéressante du point de vue de la production de CO<sub>2</sub> et de l'effet de serre qu'il implique. Le carbone des biocarburants provient de l'atmosphère et ne fait que retourner d'où il vient lors de sa combustion alors que les carburants fossiles libèrent dans l'atmosphère du carbone initialement stocké sous terre. En effet, M.Y.E. Selim et al. [8] ont entrepris en 2003 une recherche expérimentale de la performance d'un moteur diesel à injection indirecte en utilisant un carburant dérivé de l'huile pure de jojoba (ester méthylique de jojoba) et le comparant avec le carburant diesel en variant la vitesse de rotation du moteur, la charge, la synchronisation d'injection et le rapport de compression. L'huile de jojoba s'est avère un bon carburant alternatif pour les moteurs diesel.

Cependant, les biocarburants ne peuvent pas être considérés comme une solution à long terme. Leur développement restera probablement limité. En effet, il a été estimé que sur la base des consommations mondiales de 2004 [7], il faudrait des surfaces de production couvrant six fois la surface terrestre si l'on voulait remplacer tous les carburants fossiles par des biocarburants. Le coût de production des biocarburants est en passe de devenir inférieur à

celui des carburants pétroliers si ce dernier continue d'augmenter comme en 2006. Toutefois, le Brésil utilise ainsi de la Biomasse depuis 1975 [9], précisément de la canne à sucre transformée en éthanol. Jusqu'à aujourd'hui, ce plan d'alcool, demeure la plus vaste expérience d'exploitation commerciale de la biomasse à des fins énergétiques.

Le problème d'employer les huiles végétales dans les moteurs diesel se trouve dans leur viscosité élevée qui pose un problème pour l'acheminement du carburant jusqu'à l'orifice de l'injecteur. Silvio C.A. de Almeida et al. [10] ont étudié expérimentalement en 2002, la combustion de l'huile de palme dans un moteur diesel. Il a été remarqué que la viscosité élevée de l'huile donne une faible atomisation lors de l'injection, des dépôts de carbone et des difficultés de démarrage dans les basses températures ont été constatés. Quand l'huile est réchauffée à 100°C, sa viscosité diminue, et résulte une meilleure combustion et une diminution des dépôts de carbone. Et O.M.I. Nwafor [11] a fait l'expérience en 2004 d'augmenter la température d'admission de l'huile végétale pour diminuer sa viscosité dans un moteur diesel et d'étudier son effet sur les émissions des gaz. Les résultats d'essai ont montré une nette augmentation du CO et CO<sub>2</sub> à charges élevées que le carburant Diesel et une nette diminution des HC par rapport au carburant Diesel.

**Le gaz de pétrole liquéfié GPL** est un mélange de butane et de propane qui a deux origines : il peut provenir directement des opérations de dégazolinage lors de la production sur champs ou du raffinage de pétrole brut. Il était autrefois considéré comme un résidu de l'extraction du pétrole et directement brûlé au sommet de torchères. Il est dorénavant récupéré par distillation. Considéré comme propre, il préserve les performances du véhicule, réduit l'usure du moteur et sa combustion est plus propre [12]. En 2004, Z.D. Ristovski et al. [13] ont mesuré les taux d'émission de CO<sub>2</sub> et de particules en utilisant le GPL et de l'essence sur un groupe de voiture FORD. IL a été conclu que le GPL est un carburant plus propre avec 80% de moins de particules émises et de 10% à 13% de moins du taux de CO<sub>2</sub> émis par les voitures. Par conséquent, l'utilisation du GPL est valorisée dans le transport et n'apporte rien en matière de production de gaz à effet de serre. Ce carburant est, quoiqu'il en soit, disponible en quantité limitée et ne constituera pas une alternative après le pic pétrolier.

**Le gaz naturel véhicule GNV [14]** est essentiellement du méthane réduit à l'état liquide, son faible contenu en carbone permet des réductions d'émissions de gaz à effet de serre supérieures à 20 % par rapport à l'essence, tout comme pour le GPL, il permet d'atteindre de bons rendements énergétiques pour un véhicule dédié. Cheikh Mansour [15]

**Carburants liquides de synthèse [16]** Les carburants de synthèse sont des carburants liquides fabriqués à partir de gaz naturel, de charbon ou de biomasse. On les appelle GTL, ils sont produits à partir de gaz de synthèse obtenus du gaz naturel, du charbon ou de la biomasse. Le gaz synthétique est transformé en carburant liquide grâce à un procédé spécial qui porte le nom de son inventeur "synthèse Fischer-Tropsch". Les carburants de synthèse sont déjà utilisés : la compagnie sud-africaine SASOL produit aujourd'hui 150 000 barils/jour de carburants à partir du charbon.

### **I-5- Objectif du travail :**

Le code de calcul KIVA II développé par le laboratoire Los Almos aux USA simule les phénomènes de la combustion en combinant les lois de la mécanique des fluides et de la chimie. Ce code est utilisé dans le présent travail pour étudier numériquement les émissions des gaz polluants CO, CO<sub>2</sub>, HC (les hydrocarbures imbrûlés) et NO émanant d'un moteur Diesel pour différents carburants. Une comparaison a été faite entre les différents carburants pour les fractions massiques des gaz polluants et les pressions

### **I-6- Contenu du mémoire :**

Le présent mémoire s'articule en six chapitres :

- 1- Le premier chapitre contient une recherche bibliographique sur les principaux polluants émanant des moteurs à combustion interne et les carburants alternatifs.
- 2- Le deuxième chapitre présente un aperçu sur les principaux hydrocarbures.
- 3- Le troisième chapitre englobe l'interprétation mathématique de la combustion et sa modélisation introduite dans le code KIVA.
- 4- Le quatrième chapitre décrit la méthode numérique utilisée dans le code KIVA.
- 5- Le cinquième chapitre présente l'ensemble des résultats et leur discussion.
- 6- Et enfin une conclusion.

---

## II. LES HYDROCARBURES

---

## **II-1- Introduction :**

Les carburants utilisés à grande échelle sur les moteurs à combustion interne sont des liquides plus ou moins volatils obtenus par les traitements complexes de raffinage du pétrole brut, tel que :

**Les essences** utilisées dans le moteur à allumage commandé par étincelle doivent présenter des propriétés physiques (masse volumique, pression de vapeur) qui permettent leur pulvérisation dans l'air (par injection) avant son introduction dans la chambre de combustion. Le moteur à essence exige que le carburant introduit dans la chambre de combustion ait un pouvoir antidétonant élevé exprimé par l'**indice d'octane**. Cette caractéristique conditionne certaines particularités du moteur (taux de compression, avance à l'allumage) qui, elles-mêmes, agissent directement sur les performances du moteur (consommation de carburant, puissance spécifique). Des carburants plus simples et plus propres peuvent être utilisés dans des moteurs à allumage commandé comme le gaz naturel véhicule GNV et le gaz de pétrole liquéfié GPL (voir paragraphe I-4) qui sont d'origine pétrolière et les biocarburant issus de la biomasse comme l'éthanol(voir paragraphe I-4).

**Le gazole** doit présenter, à l'inverse des essences, une forte tendance à l'auto-inflammation puisque le principe de fonctionnement du moteur Diesel repose sur l'inflammation du carburant injecté sous haute pression dans l'air préalablement comprimé. La qualité du gazole s'exprime ainsi par l'**indice de cétane** qui n'influe pas directement sur les performances du moteur mais agit plutôt sur l'agrément d'utilisation (démarrage à froid, bruit, émissions de polluants, etc.). Le gazole aussi peut être substitué par des carburants issus de la biomasse comme les huiles de jojoba et de palme (voir paragraphe I-4).

Pour l'étude fondamentale de combustion on utilise généralement les hydrocarbures purs.

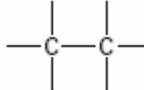
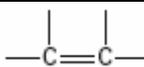
## II-2- Hydrocarbures purs :[9], [16]

Ce sont des composés hydrocarbonés exclusivement constitués de carbone et d'hydrogène.

On distingue trois grandes familles d'hydrocarbures :

- Les hydrocarbures saturés à chaînes ouvertes ou cycliques.
- Les hydrocarbures insaturés à double ou à triples liaisons et qui peuvent être aussi acycliques ou cycliques.
- Les hydrocarbures aromatiques.

Le tableau III-1 illustre clairement les trois familles.

Type de famille	Désignation courante	Désignation officielle	Motif structural	Formule globale
Saturés	Paraffines	Alcanes		$C_nH_{2n+2}$
	Naphtènes	Cyclanes	Cycle à 3,4,5 ou 6 atomes de carbones	$C_nH_{2n}$
Insaturés	Oléfines	Alcènes		$C_nH_{2n}$
	Acétyléniques	Alcynes		$C_nH_{2n-2}$
Aromatiques	Aromatiques			$C_nH_{2n-6}$

**Tableau III-1- :** Classification générale des hydrocarbures.

### II-2-1- Les hydrocarbures saturés :

Les hydrocarbures saturés ne comportent que des liaisons carbone-carbone simples ; ils se divisent en deux catégories :

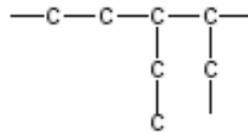
### A- les paraffines ou alcanes à chaînes carbonées ouvertes :

Les **paraffines** ou **alcanes** ont pour formule générale  $C_nH_{2n+2}$  ; elles peuvent être constituées :

- soit de chaînes linéaires :



- soit de chaînes ramifiées :



et sont appelées dans le premier cas paraffines normales (ou **n-paraffines**) et dans le second

cas **isoparaffines**.

### B- Les paraffines à chaîne fermée saturée :

Ce sont des hydrocarbures dits les **naphènes** ou **cyclanes** de formule  $C_nH_{2n}$  dans lesquels les chaînes se ferment sur elles-mêmes pour former des cycles. les plus courants

sont de la famille du cyclohexane  $C_6H_{12}$  représenté par la formule :



**Cyclohexane**

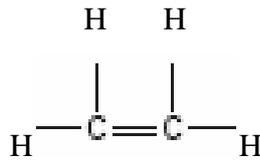
### II-2-2- Les hydrocarbures insaturés :

Les hydrocarbures insaturés se répartissent en deux groupes distincts :

#### A- Les oléfines ou alcènes :

Les **oléfines** présentent une grande activité chimique du fait d'une ou plusieurs doubles liaisons de l'atome C, sont appelées, dans la nomenclature officielle, **alcènes** ou **cyclènes**,

selon qu'elles se présentent sous forme de chaînes ou de cycles.



**Ethylene (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>)**

### B- Les acétyléniques :

Les **acétyléniques** ou **alcynes** caractérisés par l'existence d'au moins une triple liaison ; dans cette famille, les composés cycliques, que l'on appellerait **cyclynes**, sont très rares.

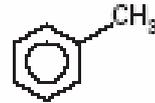


### II-2-3-Les hydrocarbures aromatiques :

Les hydrocarbures **aromatiques** de formule générale C<sub>n</sub>H<sub>2n-6</sub> contiennent un ou plusieurs cycles insaturés à 6 atomes de carbone du même type que celui qui constitue le benzène C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>. Parmi les composés aromatiques très courants, il faut citer : le **benzène** et le **toluène**.



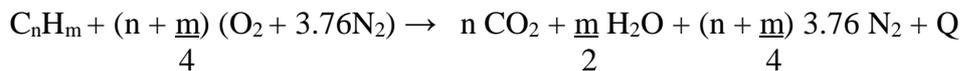
**Benzène C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>**



**Toluène C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>**

### III- Oxydation des hydrocarbures :

Toute combustion est une réaction d'oxydation d'un réactif appelé **combustible**, par un réactif oxydant appelé **comburant**. Dans la plupart des cas le comburant est l'oxygène de l'air. En mélange stœchiométrique ou pauvre l'équation de réaction globale pour un hydrocarbure C<sub>n</sub>H<sub>m</sub>, s'écrit :



Q: est la quantité de chaleur libérée par une mole de combustible brûlé.

---

# **III. FORMULATION MATHÉMATIQUE**

---

### **III-1- Le code KIVA II : [19]**

Le programme KIVA II a été développé par le Laboratoire National de LOS Alamos aux USA en 1989 et est la nouvelle version de KIVA I réalisé en 1985 qui est lui-même une version modifiée de CONCHAS-SPRAY. Le code KIVA II résout les équations de mécanique des fluides réactifs turbulents instationnaires et compressibles en trois dimensions. Il est basé sur une approximation aux volumes finis et a été développé principalement pour des applications aux moteurs à combustion interne, où se produisent des phénomènes extrêmement complexes qui combinent la mécanique des fluides et les processus chimiques, comme, il peut être facilement appliqué à des problèmes plus généraux. L'algorithme numérique permet l'utilisation de géométries générales en utilisant une approche ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian) qui permet une représentation plus aisée des frontières courbées et mobiles. Il peut être utilisé à de nombre de Mach arbitraire, grâce à une méthode de sous-cycle acoustiques. Ce dernier point est tout à fait important pour la modélisation des écoulements internes aux moteurs puisque l'amplitude des vitesses des gaz varie dans de grandes proportions pendant le cycle moteur. KIVA est également capable de traiter la dynamique d'un jet de gouttelettes liquides et son interaction avec le gaz ainsi que la vaporisation et le mélange du combustible, comme il peut traiter un nombre arbitraire d'espèces et de réactions chimiques.

### **III-2- Equations des écoulements réactifs turbulents avec jet :**

Les phénomènes qui se produisent dans les moteurs à combustion interne sont plus complexes, et ils ne pourront être analysés et modélisés que si l'on intègre la globalité du procédé de la caractérisation du carburant, son injection dans la chambre, son allumage et sa combustion en mélange turbulent. En effet le choix du combustible est déterminant quant à sa sortie de l'injecteur pour sa vaporisation, de même que pour la chimie de la combustion et la formation des polluants. Mais la combustion résulte également des influences diverses sur la vaporisation, l'interaction avec l'aérodynamique et la turbulence.

Puisque l'écoulement turbulent réactif est purement aléatoire, il est impossible de calculer les évolutions exactes, instationnaires d'une flamme, puisque celle-ci dépend des détails de conditions aux limites qui sont difficiles à connaître, par conséquent le calcul prédictif ne peut concerner que des quantités moyennes au sens statistique.

La prédiction des propriétés de l'écoulement réactif dues à la combustion des jets de carburant liquide dans les moteurs Diesel doit prendre en considération la phase liquide et la phase gazeuse dans le champ d'écoulement. Plusieurs approches ont été suggérées pour modéliser la discontinuité des phases gaz-liquide. Parmi elles, l'approche statistique Eulérienne-Lagrangienne [20][21], qui est utilisé dans le code Kiva II, et qui consiste à décrire le champ d'écoulement de la phase gazeuse dans les coordonnées Eulerienne par les équations de Navier-Stocks moyennées et les équations pour modéliser l'écoulement turbulent. Alors que le champ des gouttelettes liquides est décrit dans une formulation Lagrangienne qui a pour intérêt de pouvoir prendre en compte les températures et les quantités de mouvements d'échantillon représentatifs de toutes les gouttes différentes possédant les mêmes caractéristiques (position, vitesses, tailles, température,...etc.), ce qui permet d'éviter la modélisation de coefficients de diffusion effectifs de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie du liquide. L'influence de la phase liquide sur la phase gazeuse est traitée en introduisant les termes sources dû au couplage de la phase gaz-liquide dans les équations de bilan de la phase Eulerienne.

### III-2-1- La phase gazeuse :

Les équations de bilan sont considérées continues quand la plus petite échelle de turbulence est plus grande que le parcours libre de la molécule [22]. Ces équations décrivent la conservation des masses des espèces et du mélange, la quantité de mouvement, l'énergie et le modèle K – ε de la turbulence.

#### III-2-1-1- Equation de continuité pour l'espèce m :

$$\frac{\partial r_m}{\partial t} + \underbrace{\text{div}(r \mathbf{r})}_{\text{transport convectif}} = \underbrace{\text{div}\left[rD\nabla\left(\frac{r_m}{r}\right)\right]}_{\text{transport diffusif}} + \mathcal{R}_m + \mathcal{R}d_{m1} \quad (\text{III.1})$$

Où  $r_m$  est la masse volumique de l'espèce  $m$ ,  $r$  est la masse volumique du mélange,  $D$  le coefficient de diffusion (*loi de Fick*  $\Gamma_\phi = rD$ ) où il est assumé que toutes les espèces ont le même coefficient de diffusivité [4][20],  $\mathcal{R}_m$  regroupe les termes sources d'origine chimique,

$\mathbf{r}^s$  regroupe les termes sources provenant du spray. Le terme source n'est appliqué que pour le carburant (isp=1 dans le code KIVA) et  $d_{m1}$  vaut 1 si  $m = 1$  et 0 sinon, l'espèce 1 correspondant au carburant.

### III-2-1-2- Equation de continuité pour le mélange :

La somme des équations (III.1) sur toutes les espèces,  $\mathbf{r} = \sum_m \mathbf{r}_m$  mène à une équation totale de conservation de masse du mélange. La masse ne peut pas être détruite ou produite dans les réactions chimiques, seulement le terme source dû à la somme des masses injectées.

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{r}\mathbf{u}) = \mathbf{r}^s \quad (\text{III.2})$$

### III-2-1-3- Equations de conservation de quantité de mouvement :

L'équation de quantité de mouvement est :

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \text{div}(\rho\vec{u}\vec{u}) = \text{div}\vec{\sigma} - \text{grad } p + \vec{F}^s + \rho\vec{g} \quad (\text{III.3})$$

Avec  $p$  est la pression du mélange,  $\vec{g}$  est l'accélération due à la gravité et  $\vec{F}^s$  Représente le taux de gain ou de perte de quantité de mouvement dû au spray par unité de volume  $\sigma$  est le tenseur des contraintes visqueuses pour un fluide Newtonien tel que :

$$\mathbf{s} = \mathbf{m}[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T] + \mathbf{I}.\text{div}\mathbf{u}Id_3 \quad (\text{III.4})$$

Où l'exposant T correspond au transpose de la matrice est  $Id_3$  est la matrice identique.

La méthode PGS (the pressure gradient scaling) [19] est utilisée dans le code KIVA pour les écoulements à faible nombre de Mach (où la pression change lentement) en ajoutant le terme  $1/a^2$  qui est une quantité sans dimension au terme de pression. La forme finale de la quantité de mouvement devient alors :

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \underbrace{\text{div}(\rho \mathbf{u} \mathbf{u})}_{\text{transport convectif}} = - \underbrace{\frac{1}{\rho} \nabla p}_{\text{forces dues au pression}} - A_0 \underbrace{\nabla \left( \frac{2}{3} \rho k \right)}_{\text{forces generees par laturbulence}} + \underbrace{\text{div} \sigma}_{\text{forces de viscosites}} + \mathbf{F}^s + \rho \mathbf{g}$$

(III.5)

Avec :  $k$  est l'énergie cinétique turbulente.

$$A_0 = \begin{cases} 0 & \text{régime laminaire} \\ 1 & \text{régime turbulent} \end{cases}$$

### III-2-1-4- Equation de conservation de l'énergie :

L'équation de conservation de l'énergie interne spécifique  $I$  qui est la forme générale du premier principe de la thermodynamique est :

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

(III.6)

Avec

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

(III.7)

$I$  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.

### III-2-1-5- Equation de transport de l'énergie cinétique turbulente :

Le model de turbulence implémentée dans KIVA-II est le modèle  $k-\epsilon$  [26]. 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 :

$$\frac{\partial(rk)}{\partial t} + \underbrace{div(\mathbf{r}k)}_{\text{transport convectif}} = -\frac{2}{3}rk\mathbf{div}\mathbf{u} + \underbrace{\rho\epsilon}_{\text{taux de production}} + \underbrace{div\left(\frac{m}{Pr_k}\nabla k\right)}_{\text{transport diffusif}} - \underbrace{\rho e}_{\text{taux de destruction}} + \mathcal{W}^e \quad (\text{III.8})$$

### III-2-1-6- Equation de transport du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente :

$$\frac{\partial(re)}{\partial t} + \underbrace{div(\mathbf{r}e)}_{\text{transport convectif}} = -\left(\frac{2}{3}C_{e1} - C_{e3}\right)\mathbf{r}e\mathbf{div}\mathbf{u} + \underbrace{div\left(\frac{m}{Pr_e}\nabla e\right)}_{\text{transport diffusif}} + \frac{e}{k}\left(C_{e1}\mathbf{s}:\nabla\mathbf{u} - C_{e2}\mathbf{r}e + C_s\mathcal{W}^e\right) \quad (\text{III.9})$$

Le terme source  $\mathcal{W}^e$  apparu dans les deux équations de transport (III.8), (III.9) 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 :

$$e \geq \left[ \frac{C_m}{Pr_e(C_{e2} - C_{e1})} \right]^{1/2} \frac{k^{3/2}}{L_{SGS}} \quad (\text{III.10})$$

Où  $L_{SGS}$  est une échelle de longueur donnée par le SGS et sa valeur est prise égale à  $4\delta x$ . et  $\delta x$  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 :

$$\left\{ \begin{array}{l} m = m_{air} + rC_m \frac{k^2}{e} \\ l = A_3 m \\ K = \frac{mC_p}{Pr} \\ D = \frac{m}{rSc} \end{array} \right. \quad (III.11)$$

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

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

$$m_{air} = \frac{A_1 T^{3/2}}{T + A_2} \quad (III.12)$$

Où  $A_1$  et  $A_2$  sont des constantes valant respectivement  $1.457 \times 10^{-5}$  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.

### III-3-Réactions chimiques : [23]

Pendant la réaction chimique, une espèce peut se transformer en une ou plusieurs espèces, résultant un terme source de masse  $\dot{\mathcal{R}}_m^c$  dans l'équation (III-1) de conservation de masse des espèces.  $\dot{\mathcal{R}}_m^c$  dépend du taux de  $\dot{w}_r$  pour chaque réaction n°r comme suit :

$$\dot{\mathcal{R}}_m^c = W_m \sum_r (b_{mr} - a_{mr}) \dot{w}_r \quad (III-13)$$

tel que la réaction r est de la forme :

$$\sum_{m=1}^{nsp} a_{mr} C_m \rightleftharpoons \sum_{m=1}^{nsp} b_{mr} C_m \quad (\text{III-14})$$

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.

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

$$\sum_{m=1}^{nsp} (a_{mr} - b_{mr}) W_m = 0 \quad (\text{III.15})$$

avec  $W_m$  est la masse molaire de l'espèce  $m$ .

Le terme source de chaleur  $\mathcal{Q}^c$  qui est introduit dans l'équation de l'énergie (III-6), résulte de la chaleur libérée pendant le produit chimique cinétique, tel que :

$$\mathcal{Q}^c = \sum_r Q_r \dot{w}_r \quad (\text{III-16})$$

avec  $Q_r$  est la chaleur négative au zéro absolu de la réaction n° $r$ . Celle-ci s'exprime par :

$$Q_r = \sum_{m=1}^{nsp} (a_{mr} - b_{mr}) (\Delta h_f^0)_m \quad (\text{III.17})$$

### III-3-1-Mécanisme de la réaction globale :

Le mécanisme de la réaction globale nous simplifie le mécanisme chimique d'un mécanisme chimique qui contient quelques étapes non-élémentaires, qui peut être représenté par un seul taux de combustion selon la loi d'Arrhenius. En pratique le processus de combustion est représenté par la réaction suivante :



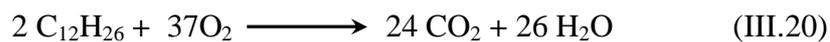
Dans le code KIVA II une palette des constituants chimiques disponibles est représentée dans le **Tableau III-1**. On choisit un hydrocarbure (et un seul) parmi les 12 disponibles, et d'autres constituants entrant dans les réactions chimiques nécessaires à l'étude (tableau *idsp* du fichier

de données). L'ordre de déclaration des constituants est indifférent, sauf pour le carburant qui est obligatoirement le premier.

Hydrocarbures		Autres constituants	
CH <sub>4</sub>	méthane	O <sub>2</sub>	oxygène
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	propane	N <sub>2</sub>	azote
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	heptane	CO <sub>2</sub>	dioxyde de carbone.
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	iso-octane	H <sub>2</sub> O	eau
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	dodécane	CO	monoxyde de carbone
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	tridécane	H <sub>2</sub>	hydrogène
C <sub>14</sub> H <sub>30</sub>	tetradécane	NO	monoxyde d'azote
C <sub>16</sub> H <sub>34</sub>	hexadécane	H	radical libre d'hydrogène
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	acetylene	O	radical libre d'oxygène
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	éthylène	N	radical libre d'azote
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	benzène	OH	radical libre
Df2	diesel 2	R	radical libre d'hydrocarbure

**Tableau III-1** : Constituants chimiques disponibles dans le Code KIVA II [19]

Dans la présente étude, quatre carburants ont été choisis : le C<sub>14</sub>H<sub>30</sub> n-tetradécane, le Df2 diesel #2 qui est représenté par le C<sub>12</sub>H<sub>26</sub> dodécane dans la réaction chimique, le C<sub>7</sub>H<sub>16</sub> n-heptane et enfin C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> iso-octane. Leurs réactions chimiques globales sont :



Le code KIVA II prend en considération les deux types de réactions chimiques: les réactions dites « d'équilibre » et les réactions dites « cinétiques ».

### III-3-2- Les réactions d'équilibre :

Le mécanisme de combustion est très largement simplifier, on supposant que l'équilibre est atteint instantanément, sans tenir compte d'une cinétique. Par conséquent les espèces sont soit consommées soit produites. Dans ce cas, les masses volumiques de chaque constituant obéissent à la loi d'action de masse :

$$\prod_{m=1}^{nsp} \left( \frac{r_m}{W_m} \right)^{b_{mr} - a_{mr}} = K_r(T) \quad (\text{III.23})$$

Où  $K_r(T)$  est la constante d'équilibre de la réaction  $n^{\circ}r$ , supposée ne dépendre que de la température :

$$K_r = \exp \left( A_r \ln T_A + \frac{B_r}{T_A} + C_r + D_r T_A + E_r T_A^2 \right) \quad (\text{III.24})$$

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

Dans la présentes étude, on a considéré sept réactions (**nre = 7**) d'équilibre entrant dans la formation des polluants en activant le sous-programme **CHEMEQ**. Le tableau ci-dessous illustre les réactions utilisées avec leurs constantes **A<sub>r</sub>**, **B<sub>r</sub>**, **C<sub>r</sub>**, **D<sub>r</sub>** et **E<sub>r</sub>** correspondant respectivement aux variables **as**, **bs**, **cs**, **ds** et **es** du fichier **ITAPE**.

Réaction n° r	A <sub>r</sub>	B <sub>r</sub>	C <sub>r</sub>	D <sub>r</sub>	E <sub>r</sub>
H <sub>2</sub> ↔ 2H°	0.990207	-51.7916	0.993074	-0.343428	0.0111668
O <sub>2</sub> ↔ 2O°	0.431310	-59.6554	3.503350	-0.340016	0.0158715
N <sub>2</sub> ↔ 2N°	0.7947009	-113.2080	3.168370	-0.443814	0.0269699
O <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> ↔ 2OH°	-0.652939	-9.8232	3.930330	0.163490	-0.0142865
O <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O ↔ 4OH°	1.158882	-76.8472	8.532155	-0.868320	0.0463471
O <sub>2</sub> + 2CO ↔ 2CO <sub>2</sub>	0.980875	68.4453	-10.5938	0.574260	-0.0414570
O <sub>2</sub> + N <sub>2</sub> ↔ 2NO	0.000000	-10802	0.14	7.2 10 <sup>-5</sup>	0.0000000

**Tableau III-2-** Valeur des coefficients des constantes d'équilibre des réactions d'équilibre.[33]

### III-3-3- 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  $v_r$  qui est donné par la loi d'Arrhénius (cinétique chimique pure) ou par le modèle de Magnussen.

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

$$v_r = k_{fr} \prod_{m=1}^{nsp} \left( \frac{r_m}{W_m} \right)^{a_{mr}} - k_{br} \prod_{m=1}^{nsp} \left( \frac{r_m}{W_m} \right)^{b_{mr}} \quad (\text{III.25})$$

Avec

$$k_{fr} = A_{fr} T^{\zeta_{fr}} \exp(-E_{fr}/T) \quad (\text{III.26})$$

$$k_{br} = A_{br} T^{\zeta_{br}} \exp(-E_{br}/T) \quad (\text{III.27})$$

$k_{fr}$  et  $k_{br}$  sont les constantes de vitesse(ou taux) de réaction respectivement pour les deux sens de réaction n°r.

$E_{fr}$  et  $E_{br}$  sont les températures d'activation respectivement pour les sens directe(forward) de la réaction n°r et inverse(backward).

$A_{fr}$  et  $A_{br}$  sont les constantes du facteur pré exponentiels respectivement pour les sens directe et inverse de la réaction chimique n° r.

$\zeta_{fr}$  et  $\zeta_{br}$  sont les exposants du facteur pré exponentiels respectivement pour les sens directe et inverse de la réaction n° r.

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

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 façons 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  $t_{cut}$  en dessous de laquelle aucune cinétique chimique n'est calculée.

Le **Tableau III-3** donne, les valeur pour certains carburants, la constante du facteur exponentiel  $A_{f1}$  (désigné par  $\mathbf{cf}_1$  au fichier des données « ITAPE », les indices ' $f$ ' et ' $1$ ' indiquent respectivement le sens direct et le numéro de la réaction chimique), les coefficients stoechiométriques des réactifs et produits,  $O_2$ ,  $CO_2$ , et  $H_2O$  respectivement désignés par  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $n_3$  et  $n_4$ . Les deux dernières colonnes donnent les exposants des molarités des réactifs  $a_{mr}$  et  $b_{mr}$  désignés par  $AE_f$  et  $AE_0$  respectivement.

TABLE II. Suggested Input Data for Single-Step Oxidation Reactions							
Fuel	CF	$n_1$	$n_2$	$n_3$	$n_4$	$AE_f$	$AE_o$
CH <sub>4</sub>	$8.3 \times 10^5$	1	2	1	2	-0.30	+1.30
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	$1.1 \times 10^{12}$	2	7	4	6	+0.10	+1.65
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	$8.6 \times 10^{11}$	1	5	3	4	+0.10	+1.65
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	$7.4 \times 10^{11}$	2	13	8	10	+0.15	+1.60
C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	$6.4 \times 10^{11}$	1	8	5	6	+0.25	+1.50
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	$5.7 \times 10^{11}$	2	19	12	14	+0.25	+1.50
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	$5.1 \times 10^{11}$	1	11	7	8	+0.25	+1.50
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	$4.6 \times 10^{11}$	2	25	16	18	+0.25	+1.50
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	$4.2 \times 10^{11}$	1	14	9	10	+0.25	+1.50
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	$3.8 \times 10^{11}$	2	31	20	22	+0.25	+1.50
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	$3.0 \times 10^{11}$	2	37	24	26	+0.25	+1.50
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	$2.6 \times 10^{11}$	1	20	13	14	+0.25	+1.50
C <sub>14</sub> H <sub>30</sub>	$2.2 \times 10^{11}$	2	43	28	30	+0.25	+1.50
C <sub>16</sub> H <sub>34</sub>	$1.4 \times 10^{11}$	2	49	32	34	+0.25	+1.50
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	$2.0 \times 10^{12}$	1	3	2	2	+0.10	+1.65
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	$4.2 \times 10^{11}$	2	9	6	6	-0.10	+1.85
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub>		1	12	8	8		
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	$2.0 \times 10^{11}$	2	15	12	6	-0.10	+1.85
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	$1.6 \times 10^{11}$	1	9	7	4	-0.10	+1.85
C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	$1.2 \times 10^{11}$	2	21	16	10	-0.10	+1.85
CH <sub>3</sub> OH	$3.2 \times 10^{12}$	2	3	2	4	+0.25	+1.50
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	$1.5 \times 10^{12}$	1	3	2	3	+0.15	+1.60
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	$6.5 \times 10^{12}$	2	5	4	2	+0.50	+1.25
Gasoline	$4.6 \times 10^{11}$	4	49	32	34	+0.25	+1.50
Kerosene	$3.0 \times 10^{11}$	4	71	48	46	+0.25	+1.50
Jet A	$3.0 \times 10^{11}$	4	71	48	46	+0.25	+1.50
DF2	$3.0 \times 10^{11}$	2	37	24	26	+0.25	+1.50
DI	$3.0 \times 10^{11}$	4	75	52	46	+0.25	+1.50

**Tableau III-3-** Les valeurs utiles pour les constantes  $A_{f1}$ , coefficients stœchiométriques, et exposants des molarités des réactifs. [24]

- Pour le modèle de *Magnussen*, le taux de réaction  $\bar{w}_r$  est contrôlé par le temps turbulent  $\tau$  et par les concentrations des espèces (réactif-carburant ou oxydant et gaz brûlés, nécessaires pour enflammer le mélange des gaz frais), est donnée par la relation suivante :

$$\bar{w}_r = \frac{A_{mag}}{t_t} \frac{1}{a_{C_m H_n} W_{C_m H_n}} \min \left( \bar{r}_{C_m H_n}, \frac{\bar{r}_{O_2}}{s}, B_{mag} \frac{\bar{r}_{br}}{1+s} \right) \quad (\text{III.28})$$

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  $t_{cut}$

Dans cette étude la loi Arrhénius est utilisé pour définir les taux de réaction  $\bar{w}_r$ .

Le mécanisme chimique de Zeldovich [5] pour la formation de NO est pris en considération, en introduisant les coefficients et les constantes d'équilibre dans le code KIVA II des réactions chimiques suivante :

Réaction n° r	Les constantes de vitesse de réaction $k_{fr}$ et $k_{br}$
$O_2 + 2N_2 \rightleftharpoons NO + 2N$	$k_{fr} = 1.558.10^{14} \exp(6.76.10^4/T)$ $k_{br} = 7.500.10^{12}$
$N_2 + 2 O_2 \rightleftharpoons 2NO + 2O$	$k_{fr} = 2.648.10^{10} \exp(5.94.10^4/T)$ $k_{br} = 1.600.10^9 \exp(1.96.10^4/T)$
$N_2 + 2OH \rightleftharpoons 2NO + 2 H$	$k_{fr} = 2.132.10^{14} \exp(5.70.10^4/T)$ $k_{br} = 0.0$

**Tableau III-4-** Valeur des coefficients des constantes de vitesse de réaction.

Donc en plus de la réaction globale le nombre total des réactions du mécanisme chimique cinétique est quatre ( en plus de réaction globale) ( $\mathbf{nrk} = 4$ ), le sous-programme **chem** est activé.

### III-4- La phase liquide : [19] [25]

La dynamique de spray est modélisée par la formulation probabilistique (the droplet distribution function method (ddf)) [21], en utilisant **la fonction de densité de probabilité (PDF)** (PDF pour Probability Density Fonction). Chaque goutte discrétisée représente un groupe de gouttes. Cette fonction  $f$  dépend des variables suivantes :

- des trois coordonnées spatiales,  $\mathbf{x}$
- des trois composants de vitesse,  $\mathbf{v}$
- du rayon (c'est le rayon que doit avoir la goutte si elle est sphérique),  $r$
- de la température,  $T_d$
- de la déformation de la sphéricité de la goutte,  $y$
- du taux de variation de  $y$ ,  $\mathbf{\&}$

La fonction de densité de probabilité est définie comme suit :

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, r, T_d, y, \mathbf{\&} t) d\mathbf{v} dr dT_d dy d\mathbf{\&} \quad (\text{III-29})$$

elle 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  $\mathbf{\&}$  et  $\mathbf{\&} + d\mathbf{\&}$

L'évolution de la fonction  $f$  dans le temps est obtenue en résolvant l'équation du jet :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f\mathbf{v}) + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (f\mathbf{F}) + \frac{\partial}{\partial r} (fR) + \frac{\partial}{\partial T_d} (fT_d) + \frac{\partial}{\partial y} (f\mathbf{\&}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{\&}} (f\mathbf{\&}) = \mathbf{\&}_{coll} + \mathbf{\&}_{bu} \quad (\text{III-30})$$

$\dot{F}$ ,  $R$ ,  $\dot{T}_d$ , et  $\dot{g}$  représentent les taux de variation par rapport au temps de la vitesse, du rayon, de la température, et de la vitesse d'oscillation  $\dot{g}$  de chaque gouttelette.

$J_{coll}$  et  $J_{bu}$  sont des termes sources dus aux collisions et aux fractionnements des gouttelettes.

### III-4-1- Collision : [19] [25]

Il peut avoir une collision seulement entre deux gouttes (d'indices 1 et 2) qui ont le même numéro de cellule. Il y'a deux sortes de collisions :

- Les deux gouttes peuvent coalescer pour donner une goutte. La température et la vitesse peuvent être calculer par la masse moyennée et la taille de la goutte par son volume.
- Pas de masse ni d'énergie transférées entre les deux gouttes. Elles gardent leurs tailles et leurs températures mais changent de vitesses.

Dans le but de savoir quelle collision a lieu, le paramètre  $b$  d'impact de collision est comparé au paramètre d'impact de collision critique  $b_{cr}$  qui est donné par la formule :

$$b_{cr} = (r_1 + r_2)^2 \min(1.0, 2.4 f(g) / W_{e_l}) \quad (\text{III.31})$$

avec :

$$f(g) = g^3 - 2.4g^2 + 2.7g \quad (\text{III.32})$$

$$\text{et} \quad g = \frac{r_2}{r_1} \quad \text{où} \quad r_1 \leq r_2 \quad (\text{III.33})$$

Où le nombre Weber  $W_e$  est donné par :

$$W_{e_l} = r_d |v_1 - v_2| r_1 / a(\bar{T}_d) \quad (\text{III.34})$$

$$\text{avec :} \quad \bar{T}_d = \frac{r_1^3 T_{d_1} + r_2^3 T_{d_2}}{r_1^3 + r_2^3} \quad (\text{III.35})$$

Tel que  $\rho_d$  est la densité liquide et  $\alpha_d$  est le coefficient de la tension superficielle liquide. Si le paramètre  $b$  d'impact de collision est inférieur à la valeur critique  $b_{cr}$ , les gouttelettes coalescent et si  $b$  est supérieure au  $b_{cr}$ , les gouttelettes maintient leurs tailles et températures mais elles subissent des changements de vitesses.

Donc, la fonction de densité de probabilité de collision  $S$  donne 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. Tel que :

$$\begin{aligned}
s &= \frac{b_{cr}^2}{(r_1 + r_2)^2} d[r - (r_1^3 + r_2^3)] d\left[v - \frac{r_1^3 v_1 + r_2^3 v_2}{r_1^3 + r_2^3}\right] d\left[T_d - \frac{r_1^3 T_{d_1} + r_2^3 T_{d_2}}{r_1^3 + r_2^3}\right] d(y - y_2) d(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) \\
&+ \frac{2}{(r_1 + r_2)^2} \int_{b_{cr}}^{r_1 + r_2} \left[ d(r - r_1) d(v - v'_1) d(T_d - T_{d_1}) d(y - y_1) d(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) + \right. \\
&\left. d(r - r_2) d(v - v'_2) d(T_d - T_{d_2}) d(y - y_2) d(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) \right] b db
\end{aligned} \tag{III.36}$$

Où

$$v'_1 = \frac{r_1^3 v_1 + r_2^3 v_2 + r_2^3 (v_1 - v_2) \frac{b - b_{cr}}{r_1 + r_2 - b_{cr}}}{r_1^3 + r_2^3} \tag{III.40}$$

et

$$v'_2 = \frac{r_1^3 v_1 + r_2^3 v_2 + r_1^3 (v_2 - v_1) \frac{b - b_{cr}}{r_1 + r_2 - b_{cr}}}{r_1^3 + r_2^3} \tag{III.41}$$

Le terme source du à la collision est donné par :

$$\begin{aligned}
f_{coll} &= \frac{1}{2} \iint f(x, v_1, r_1, T_{d_1}, y_1, \mathbf{x}_1, t) f(x, v_2, r_2, T_{d_2}, y_2, \mathbf{x}_2, t) p(r_1 + r_2)^2 |v_1 - v_2| \\
&\{ \mathcal{S}(v, r, T_d, y, \mathbf{x}, v_1, r_1, T_{d_1}, y_1, \mathbf{x}_1, v_2, r_2, T_{d_2}, y_2, \mathbf{x}_2) - d(v - v_1) d(r - r_1) d(T_d - T_{d_1}) d(y - y_1) d(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \\
&- d(v - v_2) d(r - r_2) d(T_d - T_{d_2}) d(y - y_2) d(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) \} dv_1 dr_1 dT_{d_1} dy_1 d\mathbf{x}_1 dv_2 dr_2 dT_{d_2} dy_2 d\mathbf{x}_2
\end{aligned} \tag{III.37}$$

### III-4-2- Breakup (fragmentation) : [19] [25]

L'injection du carburant s'effectue à travers un pulvérisateur en forme de cône. Ce qui provoque l'atomisation du liquide en gouttelettes beaucoup plus petites que le diamètre du bec d'injecteur. La fragmentation est provoquée par l'instabilité des surfaces vagues par le mouvement relatif entre la gouttelette et l'air qui l'entoure.

La fonction de probabilité de transition de fragmentation  $B$  est définie de sorte que  $B dv dr dT_d dy d\mathbf{x}$  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 plusieurs 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 :

$$w = \frac{1}{2} r_1 \quad (III.38)$$

. La forme précise de  $B$  est :

$$B = g(r) d(T_d - T_{d_1}) d(y) d(\theta) \frac{1}{2p} \int d[v - (v_1 + wn)] dn \quad (III.39)$$

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

$$\theta = \frac{2}{3} \frac{r}{r_d} \frac{(u + u' - v)^2}{r^2} - \frac{8a(T_d)}{r_d r^3} y - \frac{5m_l(T_d)}{r_d r^2} \theta \quad (III.40)$$

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

L'équation (II.38), 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

$$r_{32} = 3\bar{r} = \frac{r_1}{\frac{7}{3} + \frac{1}{8} \frac{r_d r_1^3}{a(T_{d_1})}} \quad (III.41)$$

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 :

$$g(r) = \frac{r^3}{6\bar{r}^4} e^{-r/\bar{r}} \quad (\text{III.42})$$

Le terme source du à la fragmentation est donné alors par :

$$J_{bu} = \int f(x, v_1, r_1, T_{d_1}, \mathbf{r}_1, t) B(v, r, T_d, y, \mathbf{r}, v_1, r_1, T_{d_1}, \mathbf{r}_1, x, t) dv_1 dr_1 dT_{d_1} d\mathbf{r}_1 \quad (\text{III.43})$$

On définit maintenant la fonction de l'accélération  $\mathbf{F}$  des gouttelettes due à la traînée et la force de gravité. Elle est définie comme suit :

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

Avec

$r_d$  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 :

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

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 :

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

### III-4-3- 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 en vapeur de carburant, l'évaporation a toujours lieu et le rayon de la gouttelette est réduit. 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) :

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

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

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

$T_d$  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 :

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

Où le nombre de transfert de masse est :

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

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

$y_1^*$  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.

$$\text{Le nombre de Schmidt est : } Sc_d = \frac{m_{air}(\hat{T})}{rD_{air}(\hat{T})} \quad (\text{III.52})$$

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

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

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 :

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

Où :

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

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

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

Avec

$C_p$  est la chaleur spécifique du gaz à pression constante et au 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 :

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

#### III-4-4- Termes interaction gaz-jet :

Les termes sources  $\mathcal{M}^s$ ,  $\mathcal{F}^s$ ,  $\mathcal{Q}^s$  et  $\mathcal{W}^s$  définis dans la section III-2-1 obtenus en sommant les taux de variation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie de toutes les gouttelettes a la position  $\mathbf{x}$  et au temps  $t$ .

$$\mathcal{M}^s = - \int f \rho_d 4\pi r^2 dv dr dT_d dy d\mathbf{x} \quad (\text{III.59})$$

$$\mathcal{F}^s = - \int f \rho_d \left( \frac{4}{3} \pi r^3 \mathbf{F}' + 4\pi r^2 R \mathbf{v} \right) dv dr dT_d dy d\mathbf{x} \quad (\text{III.60})$$

$$\mathcal{Q}^s = - \int \left\{ f \rho_d 4\pi r^2 R \left[ I_l(T_d) + \frac{1}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right] + \frac{4}{3} \pi r^3 \left[ C_p T_d + \mathbf{F}' \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u} - \mathbf{u}') \right] \right\} dv dr dT_d dy d\mathbf{x} \quad (\text{III.61})$$

$$\mathcal{W}^s = - \int f \rho_d \frac{4}{3} \pi r^3 \mathbf{F}' \cdot \mathbf{u}' dv dr dT_d dy d\mathbf{x} \quad (\text{III.62})$$

Ou  $\mathbf{F}' = \mathbf{F} - \mathbf{g}$  (III.63)

$I_l(T_d)$  est l'énergie interne du combustible a l'état liquide

#### III-5- Equations d'état :

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

$$p = R_0 T \sum_m \frac{r_m}{W_m} \quad (\text{III.64})$$

$$I = I(T) = \sum_m \frac{r_m}{r} I_m(T) \quad (\text{III.65})$$

$$C_p = C_p(T) = \sum_m \frac{r_m}{r} C_{p_m}(T) \quad (\text{III.66})$$

$$h_m = h_m(T) = I_m(T) + R_0 \frac{T}{W_m} \quad (\text{III.67})$$

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.

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

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

### III-6- Conditions aux limites :

Dans les moteurs à combustion interne, la loi de la vitesse turbulente de la paroi ( turbulent law-of-the-wall velocity) pour la condition aux limites de la vitesse sur la paroi rigide et avec une température fixe de la paroi.[19]

Les conditions aux limites pour les équations la phase gazeuse introduites dans le code KIVA II pour une paroi rigide est comme suit :

#### III-6- 1-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  $\Delta t : t_{paroi} \times \text{surface} \times \text{l'incrément de temps}$ .

La vitesse normale des gaz sur la paroi est assumée égale à la vitesse normale de la paroi  $W_{wall}$  dans la direction  $Z$ , tel que :

$$u.n = W_{wall} . k. \quad (\text{III.68})$$

La vitesse tangentielle des gaz sur la paroi

$$t_{paroi} = r_w (u^*)^2 \quad (\text{III.69})$$

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

$$\frac{u}{u^*} = \begin{cases} \frac{1}{k} \ln \left[ C_{lw} \left( \frac{yu}{n_l} \right)^{7/8} \right] + B & \frac{yu}{n_l} \geq R_c \\ \left( \frac{yu}{n_l} \right)^{1/2} & \frac{yu}{n_l} \leq R_c \end{cases} \quad (\text{III.70})$$

$n_l$  est la viscosité cinématique laminaire.

$u$  est la vitesse tangentielle à la paroi

Pour le modèle k- $\epsilon$ , nous acceptons généralement les valeurs des constantes suivantes tel que :

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

:

### III-6- 2-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:

$$\begin{cases} \frac{T}{T_w} = 1 + \frac{J_w Pr u^*}{C_p t_w T_w} \left[ \frac{u}{u^*} + R_c^{1/2} \left( \frac{Pr_l}{Pr} - 1 \right) \right] & \frac{yu}{n_l} > R_c \\ \frac{T}{T_w} = 1 + \frac{J_w}{K_l T_w} y = 1 + \frac{J_w Pr u^*}{C_p t_w T_w} \frac{u}{u^*} & \frac{yu}{n_l} \leq R_c \end{cases} \quad (\text{III.71})$$

Avec

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

**III-6- 3-Condition pour l'énergie cinétique turbulente  $k$  :**

$$\frac{\partial k}{\partial y} = 0 \quad (\text{III.72})$$

**III-6- 3-Condition pour du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente  $e$  :**

$$e = \frac{1}{k} \frac{(u^*)^3}{y} = \frac{C_m^{3/4}}{k} \frac{k^{3/2}}{y} \quad (\text{III.73})$$

---

---

# **VI. MODEL NUMERIQUE**

---

---

#### IV-1- Introduction :

Ce chapitre décrit les méthodes numériques employées dans le code KIVA II pour résoudre les équations différentielles non-linéaires du chapitre III. Les équations sont résolues aux approximations des différences finies et sont discrétisées dans le temps et l'espace.

#### IV-2- Discrétisation temporelle : [19]

La discrétisation temporelle est une séquence de temps discrète  $t^n$  ( $n=0,1,2,\dots$ ). L'intervalle de temps  $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$  est le pas de temps et  $n$  est le nombre de cycle. Dans le code KIVA II, le cycle s'effectue en trois étapes ou phases. La **phase A** et la **phase B** constituent le calcul Lagrangien où 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 ces deux premières phases aucun des termes convectifs des équations de l'aérodynamique n'est pris en compte. Dans la **phase C**, le champ d'écoulement est gelé et les nœuds du maillage sont ramenés aux nouvelles positions prescrites par l'utilisateur dans le but de calculer la compression et la détente. Ce remaillage est réalisé en transportant par convection les différentes quantités au travers des frontières des volumes de contrôles lorsque celles-ci sont déplacées vers leurs nouvelles positions.

**La phase A** contient le calcul des termes de collision et de breakup des gouttelettes du jet et les termes sources de masse et d'énergie résultant des réactions chimiques et du jet. Le calcul des propriétés des gouttelettes est fait progressivement, prendre toujours les propriétés les plus récentes de la gouttelette pour calculer les changements dus au prochain effet physique. Les oscillations et la fragmentation des gouttelettes sont calculées en premier, suivit par le calcul des collisions des gouttelettes. Le calcul de la **phase A** est complété par la mise à jour des rayons et des températures des particules dues à l'évaporation et à l'addition de terme d'accélération gravitationnelle au vitesses des particules. La méthode de calcul de la phase A est totalement explicite, donc elle est conditionnellement stable. Il faut que le pas de temps  $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$  ne soit pas plus grand que la plus petite échelle de temps due à la chimie.

**La phase B** calcul d'une façon plus ou moins implicite les gradients de pression dans l'équation de la quantité de mouvement, les termes de la vitesse de dilatation dans les

équations de masse et d'énergie, les termes source dues au spray dans les équations de quantité de mouvement de turbulence et des termes diffusifs de masse de quantité de mouvement et d'énergie. La phase B est résolue par la méthode **SIMPLE** (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) [27]. C'est une méthode itérative où la pression est fixée et les autres quantités telle que la vitesse et la température sont déduites. Ces termes sont à leur tour gelés et le champ de pression est déduit. Les champs de pression sont alors comparés et le processus est répété jusqu'à convergence.

**La phase C** est la phase Eulerienne où le transport convectif associé est calculé. A la fin de la phase, les températures et les pressions dans nœuds sont calculées à partir des équations d'état et la densité est calculée en sommant les densités des espèces.

#### **IV-3- Maillage et topologie :[19]**

La discrétisation spatiale utilisée dans le code KIVA-II est basée sur la méthode ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian). Le domaine de calcul est découpé en un certain nombre de cellules hexaédrales. L'ensemble de ces cellules constitue le maillage qui est supposé structuré. Les sommets des cellules peuvent assigner à des positions arbitraires dans le temps, permettant une description Lagrangienne ou Eulerienne ou mixte. Le maillage peut épouser la forme curviligne des frontières et peut se déplacer dans la géométrie de la chambre afin de suivre le changement de la combustion. Les cellules sont repérées par les nombre entiers  $(i,j,k)$ , qui peuvent 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 :

$$\dot{\mathbf{u}}_{ijk} = \dot{\mathbf{u}}(x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk}) \quad (\text{IV-1})$$

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.

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

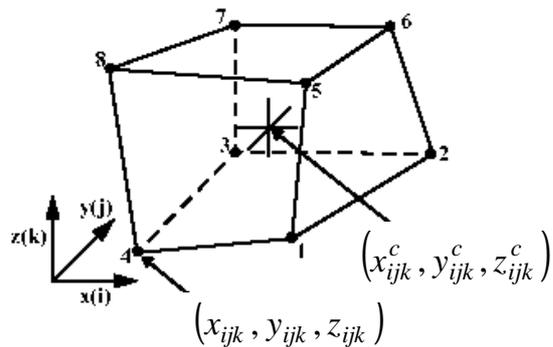
Où

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

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

#### IV-3-1- Cellule de base :

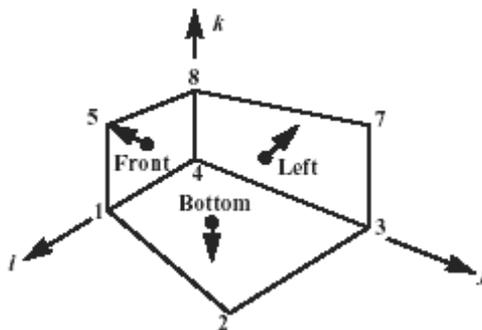
La **figure (IV-1)** représente une cellule de base du maillage. La numérotation des sommets étant celle réellement utilisée dans le code.



**Figure IV-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 (IV-2)**.

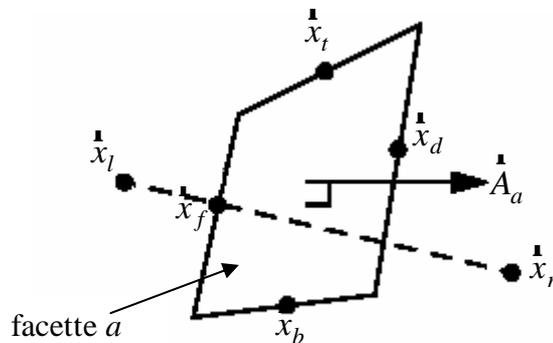


**Figure IV-2-** : les faces de la cellule  $(i, j, k)$ .

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

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

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



**Figure IV-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:

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

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

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

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

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  $a$ .

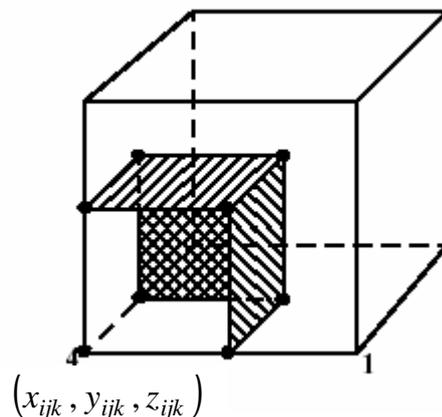
La masse  $M_{ijk}$  contenue dans la cellule  $(i, j, k)$  est estimée par :

$$M_{ijk} = \mathbf{r}_{ijk} \cdot V_{ijk} \quad (IV-6)$$

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.

#### IV-3-2- 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 IV-4**). Cette cellule a pour but de calculer la vitesse au sommet de la cellule de base.



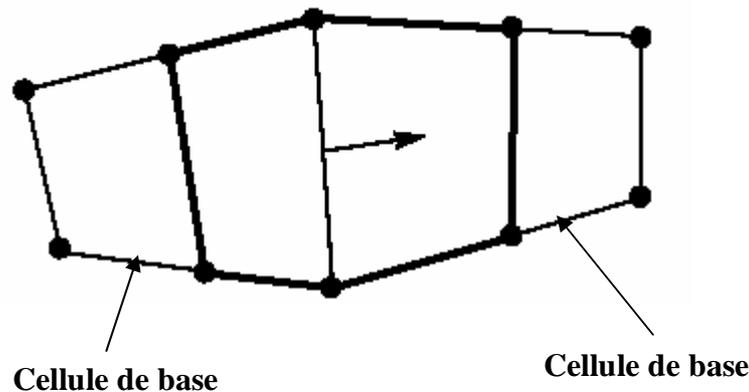
**Figure IV-4** : Partie de la cellule auxiliaire centrée au nœud  $(x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk})$  appartenant à la cellule  $(i, j, k)$ . Les trois facettes hachurées font partie des 24 facettes constituant la cellule auxiliaire

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 reposants 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 IV-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 positionné l'inconnue de vitesse en question.



**Figure IV-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  $2rk/3$ .

#### IV-4- La phase Lagrangienne (phase A et B) :

##### IV-4-1- Phase A (explicite):

##### IV-4-1-1-Equation de conservation de la masse :

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

$$\frac{(r_m^A)_{ijk} - (r_m^n)_{ijk}}{\Delta t} = (s_m^c)_{ijk} + s_{ijk}^s \quad (IV-7)$$

Où  $s_{ijk}^s$  est le terme source qui donne le taux de masse ajouté au gaz par unité de volume dû à l'évaporation des gouttelettes.

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

$r_d$  est la densité du liquide

$N'_p$  et  $r'_p$  sont respectivement 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.

#### IV-4-1-2-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 :

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

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

et

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

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 :

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

#### IV-4-1-3- 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 :

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

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

$$\mathcal{Q}_{ijk}^s = -\frac{1}{V_{ijk}^n \Delta t} \sum_{pc(i,j,k)} N'_p r'_d \frac{4}{3} P \left\{ \begin{aligned} & (r_p^A)^3 I_l(T_{d_p}^A) - (r'_p)^3 I_l(T'_{d_p}) + (r_p^A)^3 (v_p^t - v'_p) \cdot (v_p^t - u_{lmn}^n - u'_p) \\ & + \frac{1}{2} [(r_p^A)^3 - (r'_p)^3] (v_p^t - u_{lmn}^n)^2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{IV-12})$$

$r'_p$ ,  $T'_{d_p}$  et  $v'_p$  sont respectivement des rayons de la gouttelette, des températures, et des vitesses qui ont été dues partiellement aux collisions et fragmentations des gouttelettes.

$T'_{d_p}$  est la température de la gouttelette calculée dans la phase A.

#### IV-4-1-4- 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 :

$$\frac{M_{ijk}^A k_{ijk}^A - M_{ijk}^n k_{ijk}^n}{\Delta t} = W_{ijk}^s V_{ijk}^n \quad (\text{IV-13})$$

$$\frac{M_{ijk}^A e_{ijk}^A - M_{ijk}^n e_{ijk}^n}{\Delta t} = C_s W_{ijk}^s V_{ijk}^n \frac{e_{ijk}^A}{k_{ijk}^n} \quad (\text{IV-14})$$

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

$$W_{ijk}^s = -\frac{1}{V_{ijk}^n \Delta t} \sum_{pc(i,j,k)} N'_p r_d \frac{4}{3} \rho (r_p^A)^3 (v_p^t - v_p') u'_p \quad (\text{IV-15})$$

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

$$\frac{v_p^t - v_p'}{\Delta t} = D_p (u_{lmn}^n + u'_p - v_p^t) \quad (\text{IV-16})$$

#### IV-4-1-5- Technique Stochastique de particule :

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

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

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

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  $\xi_p$ .

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 de Monte Carlo est utilisée dans le sens où nous prélevons aléatoirement des distributions assumées probables qui gèrent les propriétés des gouttelettes à l'injection et au comportement des gouttelettes 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  $f(x)$ .

#### IV-4-2- Phase B (implicite):

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 couplées et traitées par l'algorithme itératif prédicteur- correcteur de type *SIMPLE*. On traite en dernier les équations de transport du modèle de turbulence *k-e*.

#### IV-4-2- 1-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 :

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

Où

$$\begin{cases} (Y_m^A)_{ijk} = (\mathbf{r}_m^A)_{ijk} / (\mathbf{r}^A)_{ijk} \\ (Y_m^B)_{ijk} = (\mathbf{r}_m^B)_{ijk} / (\mathbf{r}^B)_{ijk} \end{cases} \quad (IV-56)$$

On note dans l'équation (IV-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 :

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

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

$$C_d = \frac{m}{r} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (IV-58)$$

$\Delta x$  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 (IV-55) devient quasiment explicite. En revanche, lorsque  $C_d$  est grand devant 1,  $f_D$  est proche de 1 et le système (IV-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 (IV-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.

#### IV-4-2- 2-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:

$$\begin{aligned} \frac{(M')_{ijk}^B \mathbf{u}_{ijk}^{\mathbf{r}_B} - (M')_{ijk}^n \mathbf{u}_{ijk}^n}{\Delta t} = & -\frac{1}{(a^n)^2} \sum_{facesb} [f_p p^B + (1-f_p) p^n]_b \cdot (\mathbf{A}')_b^n - \sum_{facesb} \frac{2}{3} \mathbf{r}_b^A k_b^A \cdot (\mathbf{A}')_b^n \\ & + \sum_{facesb} [f_D \mathcal{S}(\mathbf{u}^B) + (1-f_D) \mathcal{S}(\mathbf{u}^n)]_b \cdot (\mathbf{A}')_b^n \\ & - \frac{\mathbf{R}'_{ijk} + S'_{ijk} \mathbf{u}_{ijk}^{\mathbf{r}_B}}{\Delta t} + (M')_{ijk}^n \mathbf{g} - (M')_{ijk}^n \frac{ANC_{ijk}}{\Delta t} \end{aligned} \quad (IV-59)$$

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 (IV-32) la présence du paramètre d'implication  $f_p$  dans le terme de gradient de pression. Celui-ci est calculé pour chaque cellule  $(i,j,k)$  du maillage par la relation :

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

Où

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

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 :

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

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 :

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

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

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

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

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 (IV-67) nous donne :

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

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 :

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

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

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

Ou bien :

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

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

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

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

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

### Equation de changement de volume

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

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

### IV-4-2- 3- Equation de conservation de l'énergie :

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

$$\begin{aligned} \frac{M_{ijk}^B I_{ijk}^B - M_{ijk}^n I_{ijk}^n}{\Delta t} = & -\frac{p_{ijk}^n + p_{ijk}^B}{2} \frac{V_{ijk}^B - V_{ijk}^n}{\Delta t} + \sum_{facesa} K_a^n \nabla [f_D T^B + (1-f_D)T]_a \cdot (\mathbf{A})_a^n \\ & + \sum_{facesa} (rD)_a^n \left\{ \sum_m h_m (T_a^n) \nabla [f_D Y_m^B + (1-f_D)Y_m^A]_a \right\} \cdot (\mathbf{A})_a^n \\ & + M_{ijk}^B \mathbf{e}_{ijk}^A + V_{ijk}^n (\mathcal{Q}_{ijk}^c + \mathcal{Q}_{ijk}^s) \end{aligned} \quad (\text{IV-75})$$

- Détermination de  $\dot{T}$  :

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

$$M_{ijk}^B \frac{I_{ijk}^t - I_{ijk}^A}{\Delta t} = M_{ijk}^B \mathbf{e}_{ijk}^B + \sum_{facesa} (rD)_a^n \left\{ \sum_m h_m (T_a^n) \nabla [f_D Y_m^B + (1-f_D)Y_m^A]_a \right\} \cdot (\mathbf{A})_a^n \quad (\text{IV.76})$$

b)- A pression constante, on peut écrire :

$$\Delta h = (C_p)^n (T_{ijk}^A - T_{ijk}^n) \quad (\text{IV-77})$$

Où

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

c)- Par définition, on a :

$$h_{ijk}^n = I_{ijk}^n + \frac{P_{ijk}^n}{r_{ijk}^n} \quad (\text{IV-79})$$

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

$$T_{ijk}^A = T_{ijk}^n + \frac{1}{(C_p)^n} \left[ I_{ijk}^t - I_{ijk}^n + P_{ijk}^n \left( \frac{1}{r_{ijk}^A} - \frac{1}{r_{ijk}^n} \right) \right] \quad (\text{IV-80})$$

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 (IV.25),(IV.76) et (IV.80) :

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

#### IV-4-2-4-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 :

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

Et

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

Où le paramètre  $f_{ijk}$ , donné par :

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

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

#### IV-4-2-4- Equations d'état :

Les équations d'état (III.64) et (III.65) sont approximées par les relations suivantes :

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

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

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

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

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

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

#### IV-4-2-4- 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 :

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

#### V-4-2-5- 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 :

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

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 (IV-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

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

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

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

$$V_{ijk}^p = \frac{M_{ijk}^B}{p_{ijk}^p} R_0 \left[ \sum_m (Y_m)_{ijk}^B / W_m \right] T_{ijk}^p \quad (\text{IV-92})$$

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'.

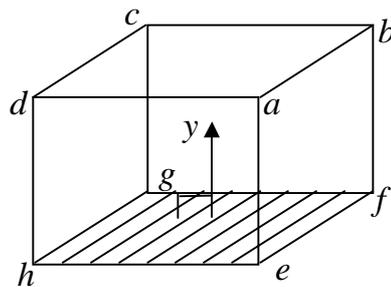
#### IV-4-3- Phase C (explicite) :

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

#### IV-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 IV-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 IV.12 :** Cellule adjacente à la paroi

La distance  $y$  de la paroi est donnée par :

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

avec  $A_a$  est le vecteur de la surface de la cellule qui s'applique sur la paroi

Pour évaluer le tenseur de contrainte de cisaillement, nous devons connaître la vitesse turbulente tangentielle  $u$  sur la paroi à une distance  $y$  de la paroi et la viscosité cinématique laminaire tel que :

$$u = \left[ \frac{1}{4} (u_a + u_b + u_c + u_d) \right] \quad (\text{IV-94})$$

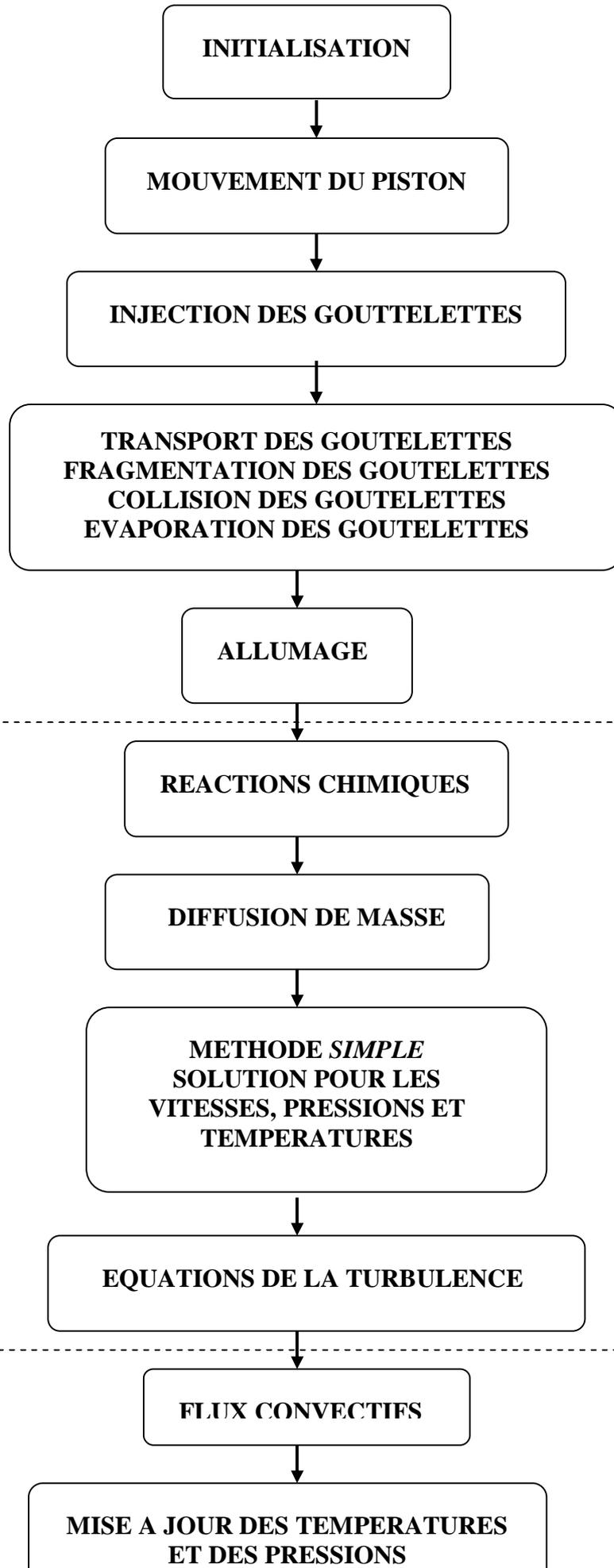
et

$$\nu_l = \frac{\mu_{air}(T)}{\rho}$$

$\nu_l$  est la viscosité cinématique laminaire.

#### **IV-6- Organigramme de calcul du code KIVA-II :**

L'organigramme du code KIVA-II est représenté d'une façon simple et générale dans la figure ci-dessous. Pour l'algorithme détaillé avec sousroutines, voir le manuel de KIVA II [19].



**PHASE A**

**PHASE B**

**PHASE C**

---

# V. RESULTATS ET DISCUSSIONS

---

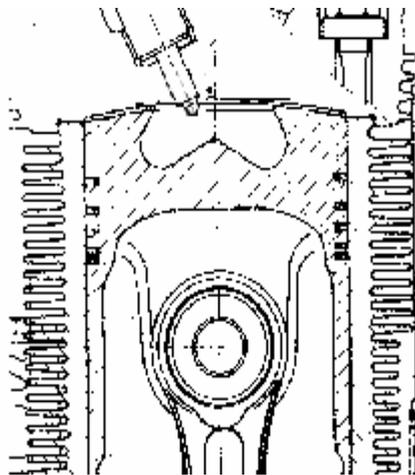
### V-1-Introduction :

Dans ce chapitre, il sera exposé premièrement, les valeurs nécessaires pour la simulation, les conditions initiales et le maillage généré. Les résultats obtenus de la simulation numérique en utilisant le code KIVA II , des gaz polluants CO, CO<sub>2</sub>, NO et HC émis par le moteur diesel choisi pour les différents types de carburants seront présentés.

### V-2- Spécification du moteur :

La simulation a été appliquée sur la chambre de combustion du moteur Diesel de marque CMT type FL912 qui est monté sur le tracteur CIRTA C6807 (**Figure V-1**). Sa puissance est de 68 KW atteinte à une vitesse de rotation de 2300 tr/min. Pour le travail actuel, nous avons utilisé le régime du moteur qui est de 1600 tr/min où le couple est maximum. Les détails du moteur sont donnés dans le **Tableau V-1**.

Les parois sont maintenues à des températures constantes, le pas de temps initial  $dti = 10^{-7}s$ , les tolérances pour la convergence de la méthode des résidus conjugués pour les termes implicites diffusion de gradient de pression  $epsp = 10^{-4}$ , des espaces chimiques  $epsy$ , de la quantité de mouvement  $epsv$ , de la chaleur  $epst$  et de l'énergie cinétique  $epsk$  sont toutes égales à  $10^{-3}$ .



**Figure V-1:**Coupe du cylindre du moteur FL912.

diamètre du cylindre	100 mm
Course de piston	120 mm
Espace entre la culasse et le plat du piston au PMH (squich)	1.8 mm
Longueur de la bielle	216 mm
Diamètre de l'injecteur	0.285 mm
Régime du moteur	1600 tr/min
Dure de l'injection	12°
Mode d'injection	Injection suivant une demi sinusoïdale
Débit d'injection	50 cm <sup>3</sup> /s
Pression d'injection	400 bars
Température d'injection	313°K (40°C)
Température d'aire	400 k
Nombre totale des particules injectées	2000
Angle d'inclinaison de l'orifice d'injecteur	60°
Angle d'épaississement du jet du combustible	10°
Température des parois du cylindre	400k
Température des parois du piston	400k
Température de la culasse	400k
Masse volumique initiale de l'oxygéné	2.4257x10 <sup>-4</sup> g/cm <sup>3</sup>
Masse volumique initiale de l'azote	7.9851x10 <sup>-4</sup> g/cm <sup>3</sup>

**Tableau V-1-:** caractéristiques du moteur

### V-3- Paramètres physiques des carburants utilisés :

Pour les quatre carburants choisis les paramètres nécessaires pour la simulation sont illustrés dans le tableau ci-dessous :

Carburant	$\rho_{hop}$ :Masse volumique ( $\text{g}/\text{cm}^3$ ) à $P=400\text{bars}$ et $T=40^\circ$ [24]	tspmas : masse totale injectée (g)	Ca inj :Avance à l'injection (degrés)
$\text{C}_{14}\text{H}_{30}$ n-tetradecane	0.78167	0.048854375	-20
Df2 diesel #2	0.770618	0.048163625	-20
$\text{C}_7\text{H}_{16}$ n-heptane	0.683197	0.0426998125	-18
$\text{C}_8\text{H}_{18}$ iso-octane	0.75256	0.047035	-18

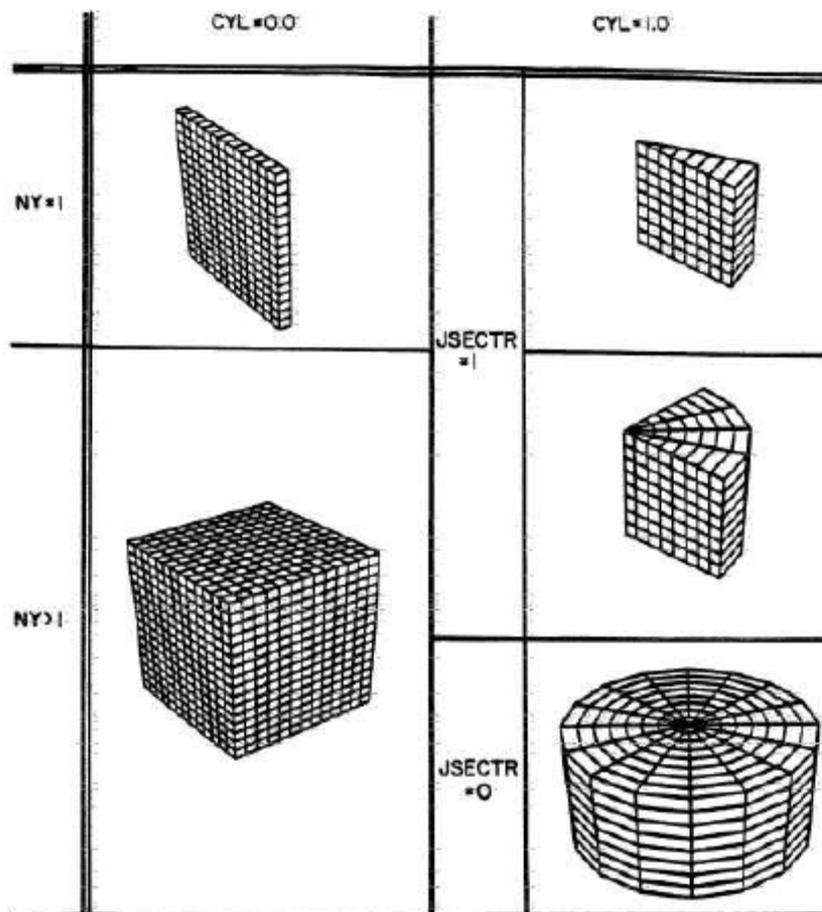
**Tableau V-2:** Paramètres physiques des différents carburants.

### V-4-Génération du maillage

Le code KIVA II est basé sur une formulation cartésienne des équations (repère (O, i, j, k) et est applicable à des géométries cylindriques (paramètre **CYL = 1**) ou cartésiennes (**CYL = 0**) en bidimensionnel ou tridimensionnel **Figure V-2** grâce au sous programme **SETUP**.

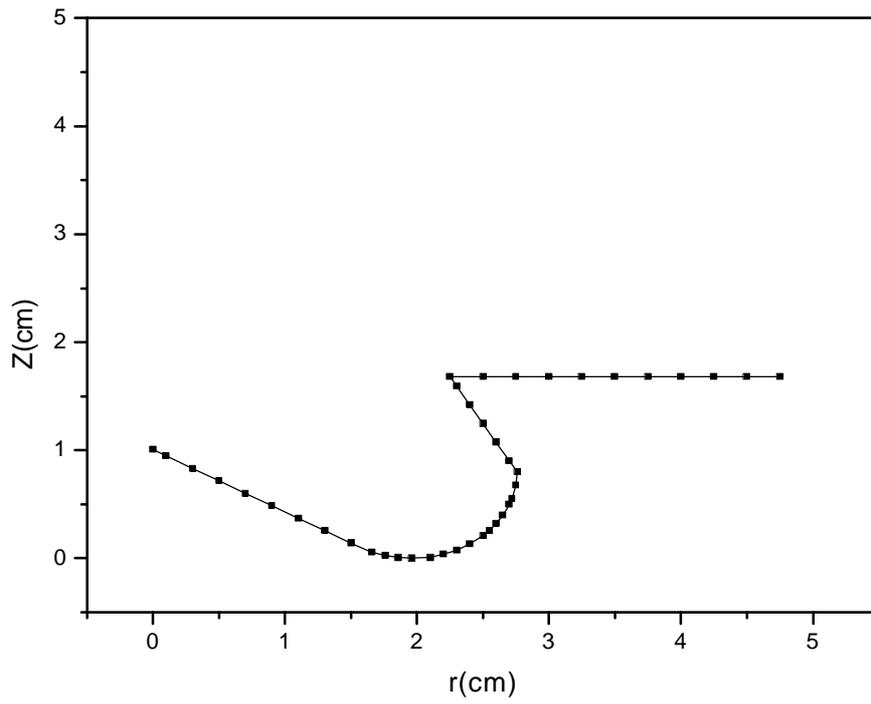
Le maillage est composé de blocs de cellules de dimensions suivantes : **NX** cellules dans la direction i, **NY** dans la direction j et **NZ** dans la direction k. Grâce à ce formalisme, on peut dégager cinq types de traitement des symétries (voir **Figure V-2**) :

- domaine de calcul bidimensionnel cartésien (**NY = 1, CYL = 0**) ;
- domaine de calcul tridimensionnel cartésien (**NY > 1, CYL = 0**) ;
- domaine de calcul bidimensionnel cylindrique (**NY = 1, CYL = 1, JSECTR = 1**) ;
- domaine de calcul tridimensionnel cylindrique à symétrie de révolution (**NY > 1, CYL = 1, JSECTR = 1**);
- domaine de calcul tridimensionnel cylindrique (**NY > 1, CYL = 1, JSECTR = 0**).



**FigureV-2** : Les 5 types du maillage valables au Code KIVA II

Dans la présente étude, l'axe de la chambre de combustion et l'axe du piston sont supposés concentrique **OFFSET=0** et le profil de la culasse est supposé plat **nho=0**. Le profil de la chambre de combustion (**FigureV-3**) est dessiné en introduisant les coordonnées (**rpo,zpo**) correspondant au coordonnées (**r,z**) des points **npo**, voir **tableau V-2..**

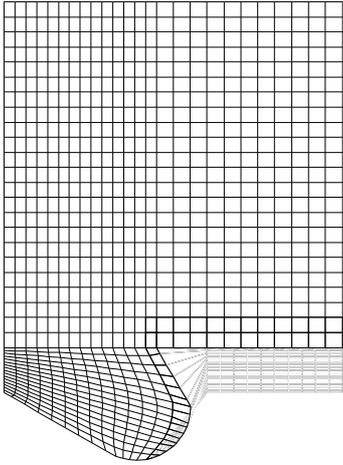


**FigureV-3-** :Profile de la chambre de combustion représenté par les points utilisé par le générateur de maillage du code KIVA II

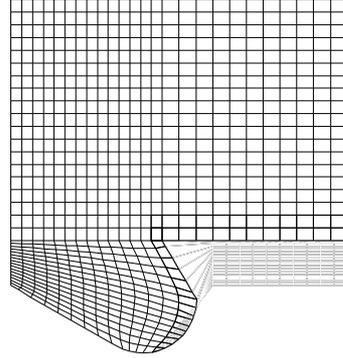
npo 42			
nunif 0			
ipo	kpo	rpo	zpo
1	1	0.0	1.007
2	1	0.100	0.94926
3	1	0.300	0.83379
4	1	0.500	0.71832
5	1	0.700	0.60285
6	1	0.900	0.48738
7	1	1.100	0.37191
8	1	1.300	0.25644
9	1	1.500	0.14097
10	1	1.659	0.05838
11	1	1.759	0.02540
12	1	1.859	0.00627
13	1	1.959	0.00000
14	1	2.100	0.00886
15	1	2.200	0.03716
15	2	2.300	0.07631
15	3	2.400	0.13252
15	4	2.500	0.21066
15	5	2.550	0.26081
15	6	2.600	0.32133
15	7	2.650	0.39686
15	8	2.700	0.49847
15	9	2.720	0.55326
15	10	2.750	0.68033
15	11	2.759	0.80000
15	12	2.700	0.90219
15	13	2.600	1.07539
15	14	2.500	1.24860
15	15	2.400	1.42180
15	16	2.300	1.59501
15	17	2.250	1.68161
16	17	2.500	1.68161
17	17	2.750	1.68161
18	17	3.000	1.68161
19	17	3.250	1.68161
20	17	3.500	1.68161
21	17	3.750	1.68161
22	17	4.000	1.68161
23	17	4.250	1.68161
24	17	4.500	1.68161
25	17	4.750	1.68161
26	17	5.000	1.68161

**Tableau V-2-** : ipo, kpo, rpo et zpo des différents points du profil de la chambre de combustion.

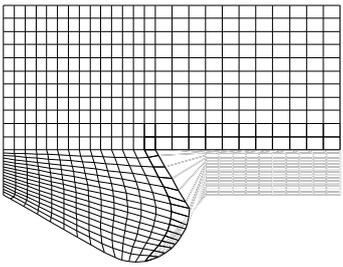
Le maillage numérique de l'étude contient 25 cellules dans direction radial ( $NX=25$ ), 1 cellule dans la direction azimutale ( $NY=1$ ) et 40 cellules dans la direction axiale ( $NZ=40$ ). Au début du calcul (à  $-90^\circ$ ), le maillage démarre avec 40 cellules dans la direction axiale ( $NZ=40$ ). Lors de la phase de compression, les cellules sont comprimées au fur et à mesure que le piston s'approche du **PMH**. Jusqu'à un nombre minimal de cellules qui est de 2 entre la culasse et le plat du piston. Le mouvement du piston est assuré par le sous programme **PISTON** en mettant **rpe** égale au régime (**Figure V-4**).



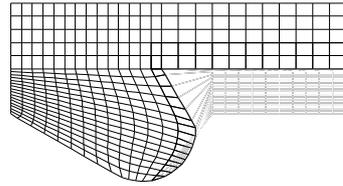
1) 75degrés avant PMH



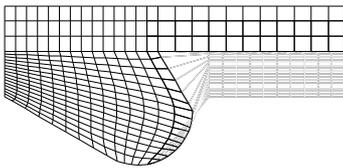
2) 60degrés avant PMH



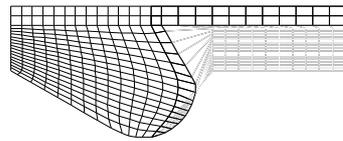
3) 45degrés avant PMH



4) 30degrés avant PMH

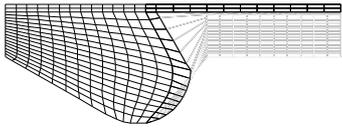


5) 25degrés avant PMH

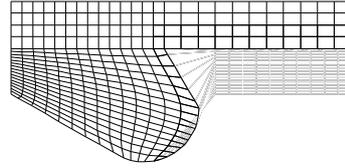


6) 15.59degrés avant PMH

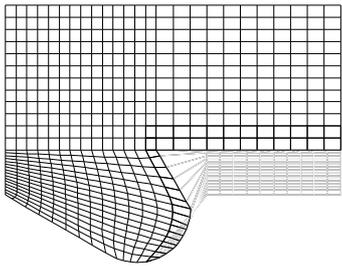
**Figure V-4-** : Les maillages générés à différentes positions du piston



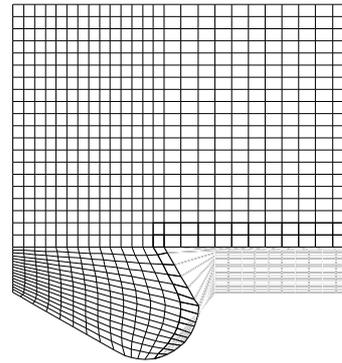
7) 0.0068 degrés avant PMH



8) 25 degrés après PMH



9) 45 degrés après PMH



10) 60 degrés après PMH

**Figure V-4- :suite**

## **V-5-Discussion des résultats :**

La simulation numérique des espèces polluantes CO, CO<sub>2</sub>, NO et HC et de l'oxydant O<sub>2</sub> pour différents carburants a été effectuée en fonction du paramètre temps (angle de rotation du vilebrequin).

### **V-5-1-Formation des polluants :**

#### **Hydrocarbures imbrûlés :**

L'allure de la consommation du combustible (**Figures V-9**) par l'oxygène est la même pour les différents carburants. Le carburant commence à s'évaporer dès les premières gouttes injectées dans la chambre de combustion à partir de l'angle de l'avance à l'injection jusqu'à évaporation d'une partie du fluide qui correspond au maximum de la courbe où là commence à se former les premiers radicaux libres pour provoquer l'explosion instantanée du carburant aux environs du **PMH**. L'allure à ce moment décroît puis devient asymptotique à une valeur qui correspond au hydrocarbures imbrûlés qui sont dû à la courte durée de la combustion qui est de 12° (**Figures V-9**) qui est plus courte que le délai d'autoinflammation nécessaire au carburant pour s'oxyder complètement et par l'adhérence des gouttelettes aux parois de la chambre de combustion qui sont à une température inférieure (**Figures V-18**). Ces imbrûlés sont ensuite chassés par les gaz d'échappement.

#### **Dioxyde de carbone (gaz carbonique):**

L'allure de la formation du CO<sub>2</sub> (**Figures V-10**) est la même pour les cinq combustibles. Le gaz carbonique commence à se former dès l'explosion du carburant (**Figures V-5 à V-8**) dans la zone de flamme (**Figures V-17**) par le mécanisme chimique cinétique de l'oxydation de l'hydrocarbure à 12° avant **PMH** (**Figure V-10**). La masse totale du CO<sub>2</sub> augmente rapidement jusqu'à la fin de l'explosion, puis continue de se former d'une façon moins rapide par le mécanisme chimique d'équilibre de l'oxydation du CO et la dissociation du CO<sub>2</sub> en CO pendant la phase de détente jusqu'à une valeur maximale (**Figures V-5 à V-8**).

### **Monoxyde de carbone :**

L'allure de du CO (**Figures V-11**) est la même pour les cinq carburants. Le monoxyde carbone se forme bien loin du front de flamme (**Figures V-5 à V-8**), par le fait du manque d'oxygène. L'équilibre thermodynamique de la dissociation du CO<sub>2</sub> résultera en une masse qui représente 20% de la masse du carburant au point maximum à 15° après PMH (**Figures V-11**), cette quantité diminuera pendant la phase de détente à cause de sa transformation en CO<sub>2</sub> jusqu'à une valeur négligeable (**Figures V-5 à V-8**).

### **Oxyde d'azote :**

L'allure de formation de NO est la même pour les cinq carburant (**Figures V-12**), sa formation commence à 5° avant PMH (**Figures V-12**) loin du front de flamme à cause du manque d'oxygéné (**Figures V-14 et V-19**). La courbe subit un saut exponentiel (**Figures V-12**) ce qui confirme que la formation du NO relève essentiellement de la cinétique chimique. NO atteint alors une valeur maximale à la fin de la combustion qui restera constante jusqu'à la fin de la fin de la détente. On peut déduire que la formation du NO a lieu à hautes températures (voir **Figures V-14**).

### **V-5-2- Performance du moteur :**

La pression moyenne maximale est atteinte au PMH (**Figures V-13**). L'aire est comprimée d'une façon isentropique jusqu'à 20° avant le **PMH** dans la phase de combustion elle augmente subitement à 70 bars au **PMH** qui est atteinte par les cinq combustibles par conséquent la quantité de carburant injectée pour chaque hydrocarbure est suffisante pour atteindre la puissance voulue. La pression diminue après, jusqu'à la pression initiale par la transformation de l'énergie calorifique de la combustion en énergie cinétique du mouvement descendant du piston, c'est le temps moteur.

### V-5-3-Comparaison des résultats pour les différents carburants :

#### Formation des gaz polluants :

##### a) Hydrocarbures :

Les combustibles injectés (**Figures V-9**)  $C_{14}H_{30}$  (n-tétradécane) et Df2 sont évaporés à 67% et le  $C_8H_{18}$ (isooctane) et le  $C_7H_{16}$  (n-heptane) sont évaporés à 63%. Le  $C_7H_{16}$  (n-heptane) a la moins de masse évaporée non brûlée qui est de 0.011g qui représente 36% de la masse évaporée, alors que le  $C_{14}H_{30}$  (n-tétradécane), le Df2 et le  $C_8H_{18}$ (isooctane) ont presque la même masse évaporée non brûlée qui est de 0.015g. Par conséquent le  $C_7H_{16}$  (n-heptane) émis le moins d'hydrocarbures imbrûlés.

##### b) Gaz carbonique :

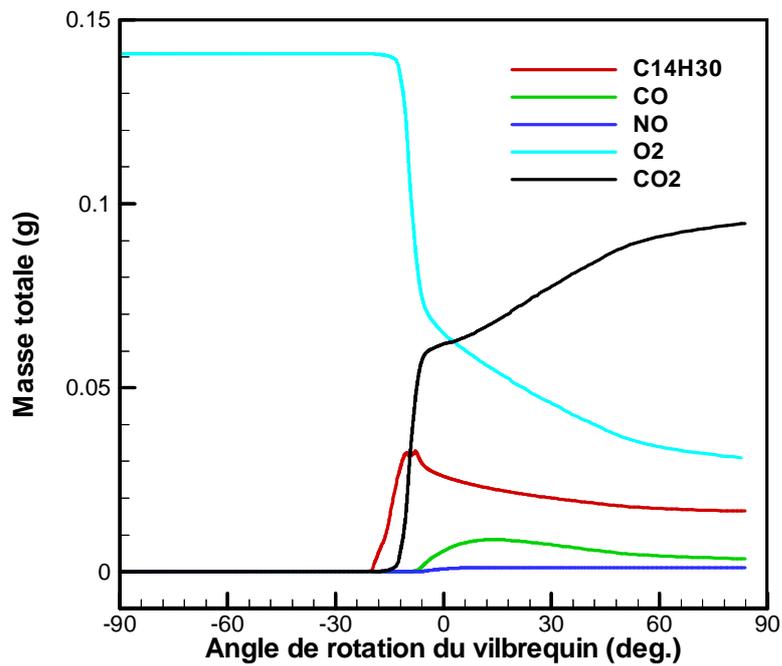
La masse du gaz carbonique  $CO_2$  (**Figure V-12**) émise par les différents carburants est pratiquement la même. La masse totale du  $CO_2$  est entre 0.08g et 0.09g.

##### c) Monoxyde de carbone :

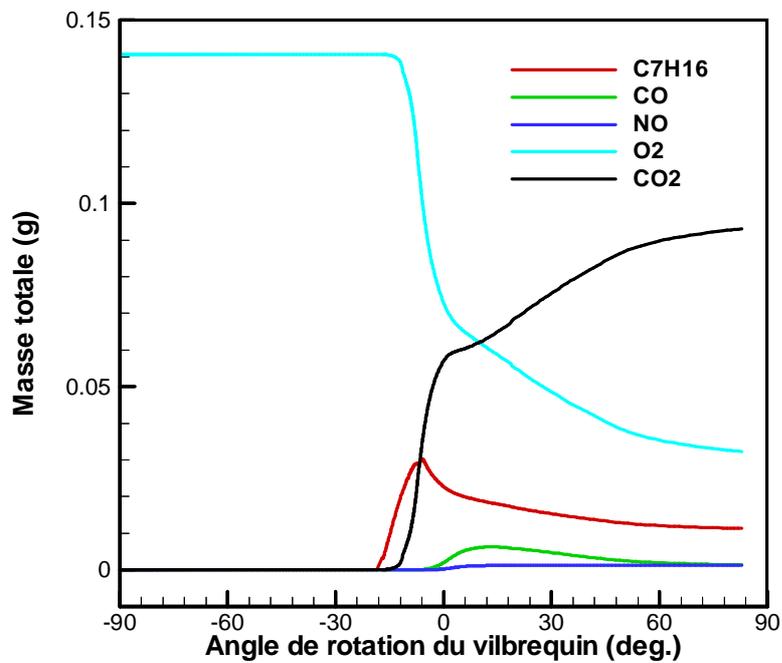
La masse du monoxyde de carbone  $CO$  émise à la fin de la combustion par le  $C_7H_{16}$  (n-heptane) (**Figures V-9**) qui est de 0.0013g est nettement inférieure à celles des autres carburants. On remarque que les courbes de  $CO$  du  $C_{14}H_{30}$  (n-tétradécane), du Df2 et du  $C_8H_{18}$ (isooctane) sont identiques, la masse émise est de 0.003g.

##### d) Oxyde d'azote :

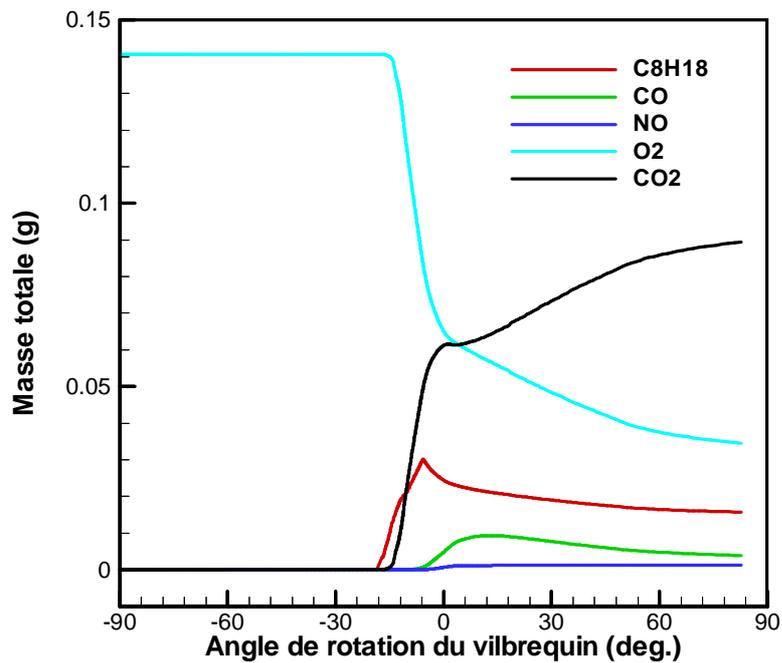
On remarque sur **Figures V-10** que la combustion du  $C_{14}H_{30}$  (n-tétradécane) Df2 émis moins les gaz d'oxyde d'azote  $NO$ , ont chacun une masse de 0.0114g à la fin du cycle alors que la combustion du  $C_7H_{16}$  (n-heptane) produit plus de  $NO$ , sa masse est de 0.00122g.



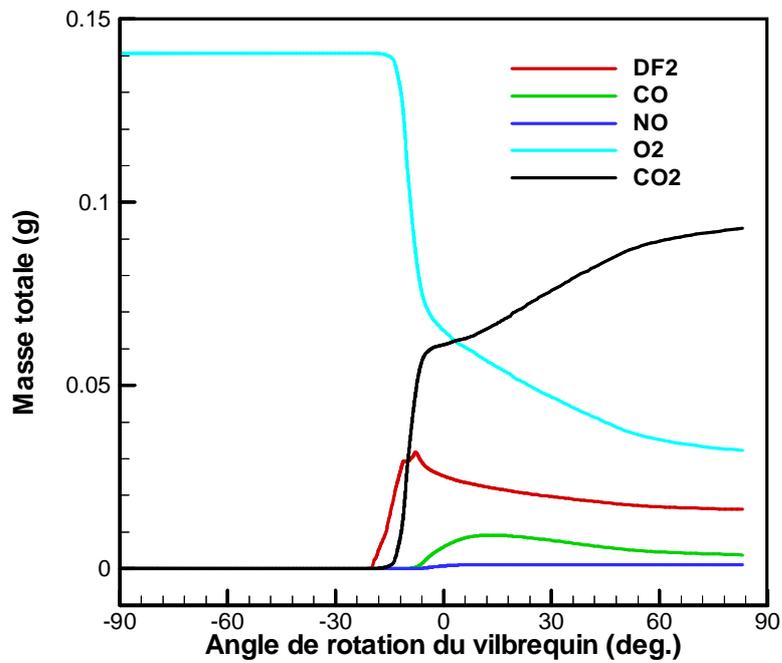
**Figure V-5-** : Evolution des masses totales du carburant et des gaz polluants en fonction de l'angle de rotation du C14H30.



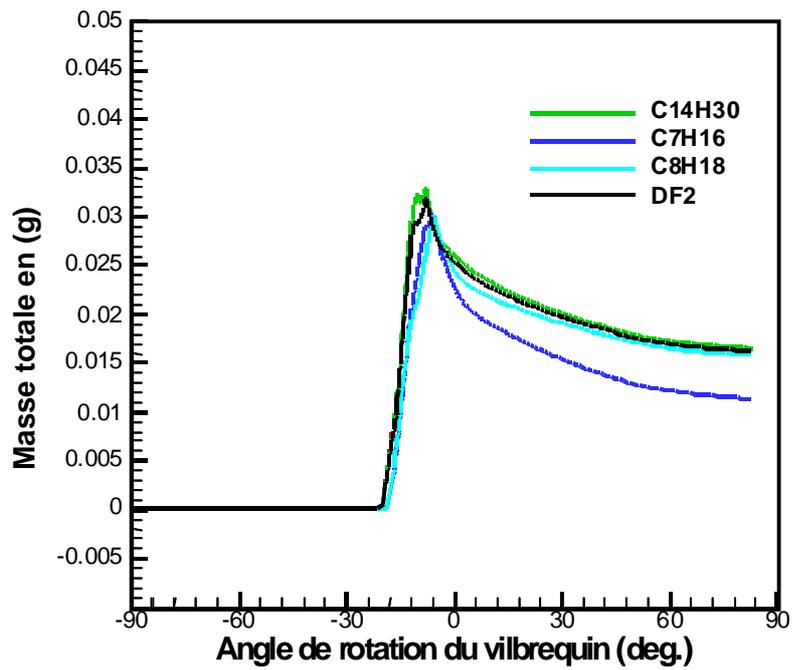
**Figure V-6-** : Evolution des masses totales du carburant et des gaz polluants en fonction de l'angle de rotation du C7H16.



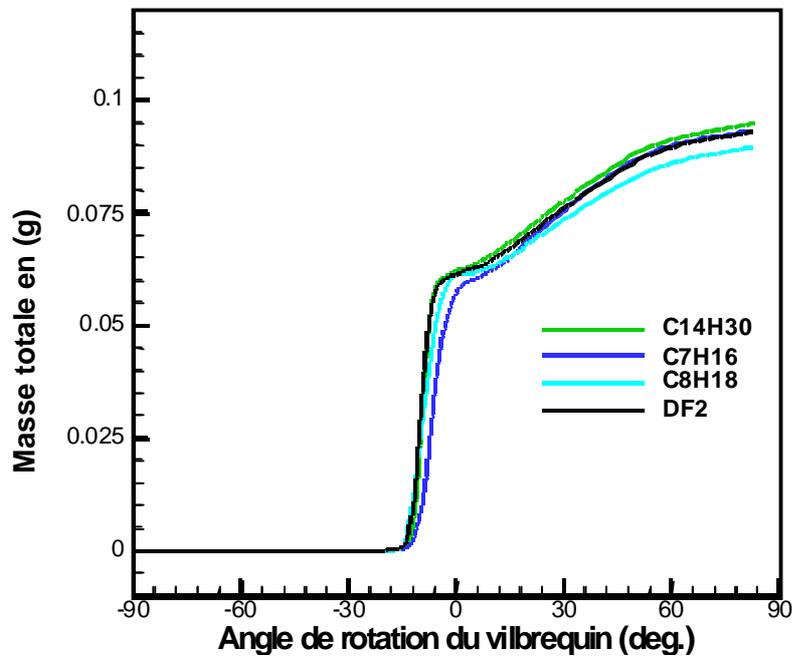
**Figure V-7-** : Evolution des masses totales du carburant et des gaz polluants en fonction de l'angle de rotation du C8H18.



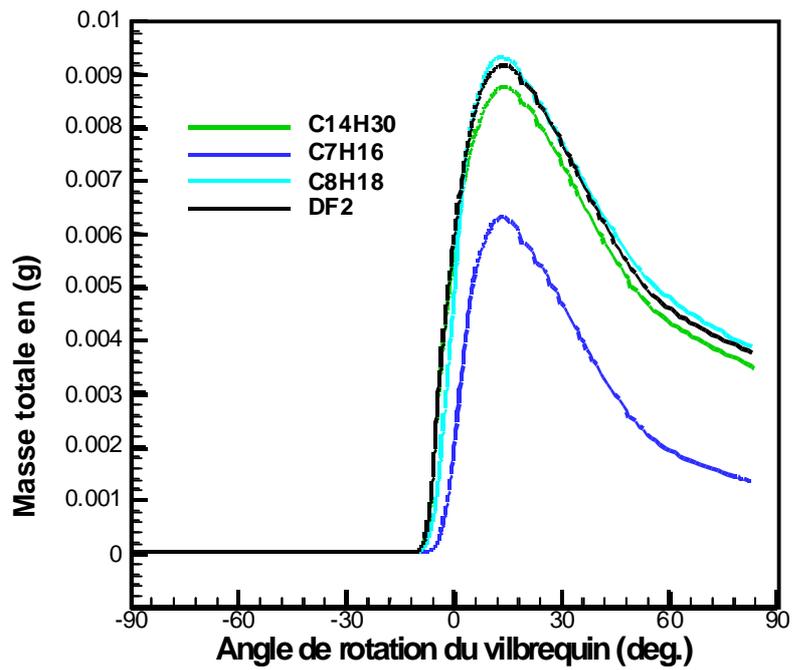
**Figure V-8-** : Evolution des masses totales du carburant et des gaz polluants en fonction de l'angle de rotation du Df2



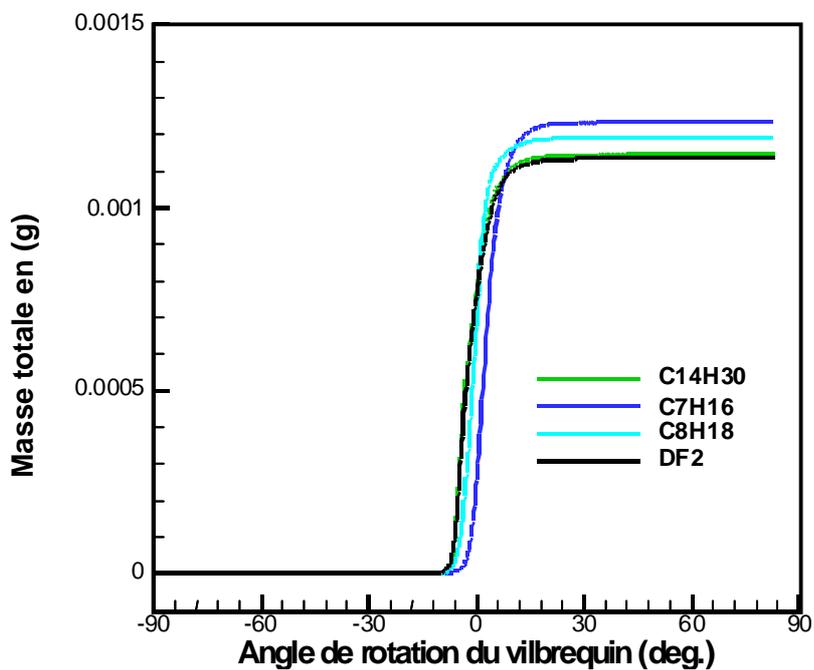
**Figure V-9-** : Evolution des masses totales du fuel en fonction de l'angle de rotation pour les différents carburants



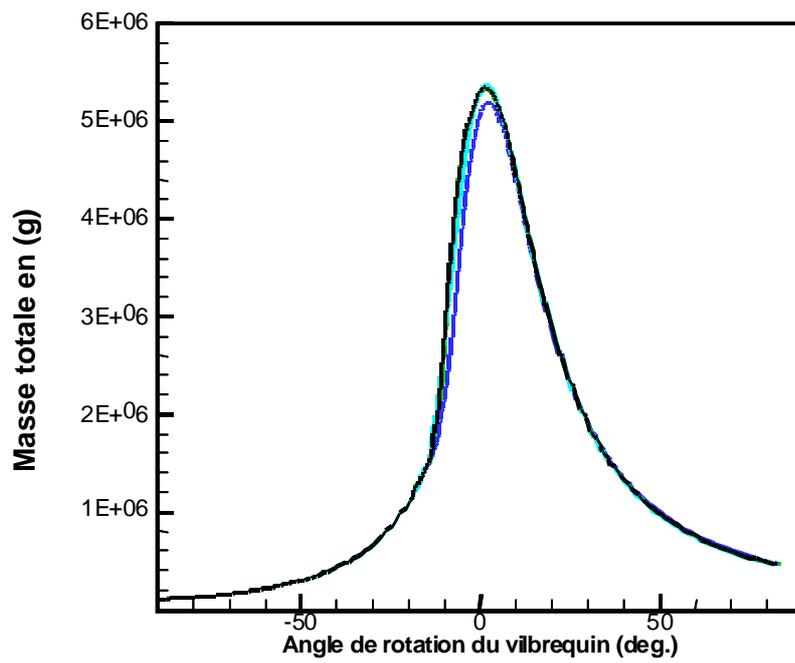
**Figure V-10** : Evolution des masses totales du gaz carbonique en fonction de l'angle de rotation pour les différents carburants.



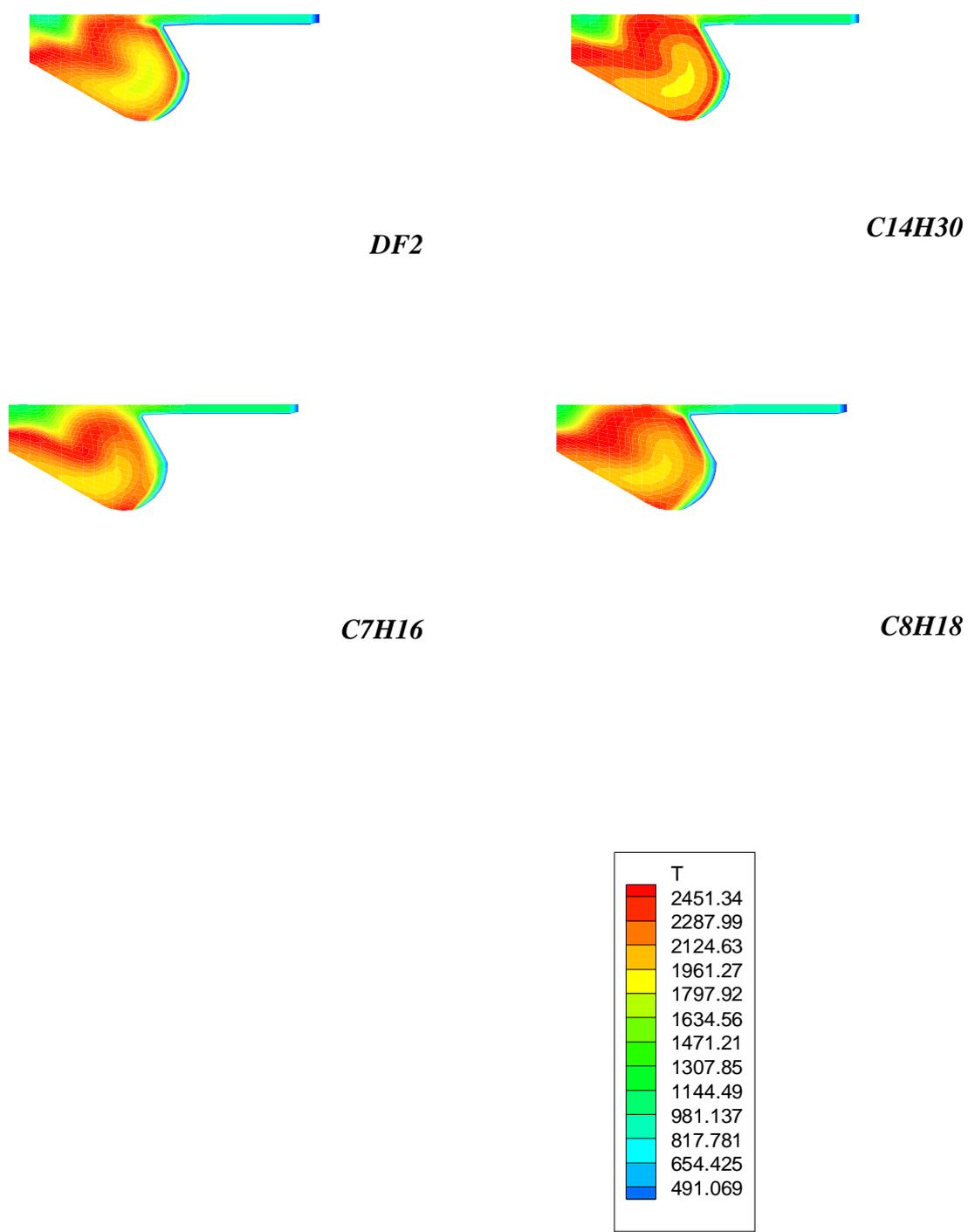
**Figure V-11-** : Evolution des masses totales du monoxyde de carbone en fonction de l'angle de rotation pour les différents carburants



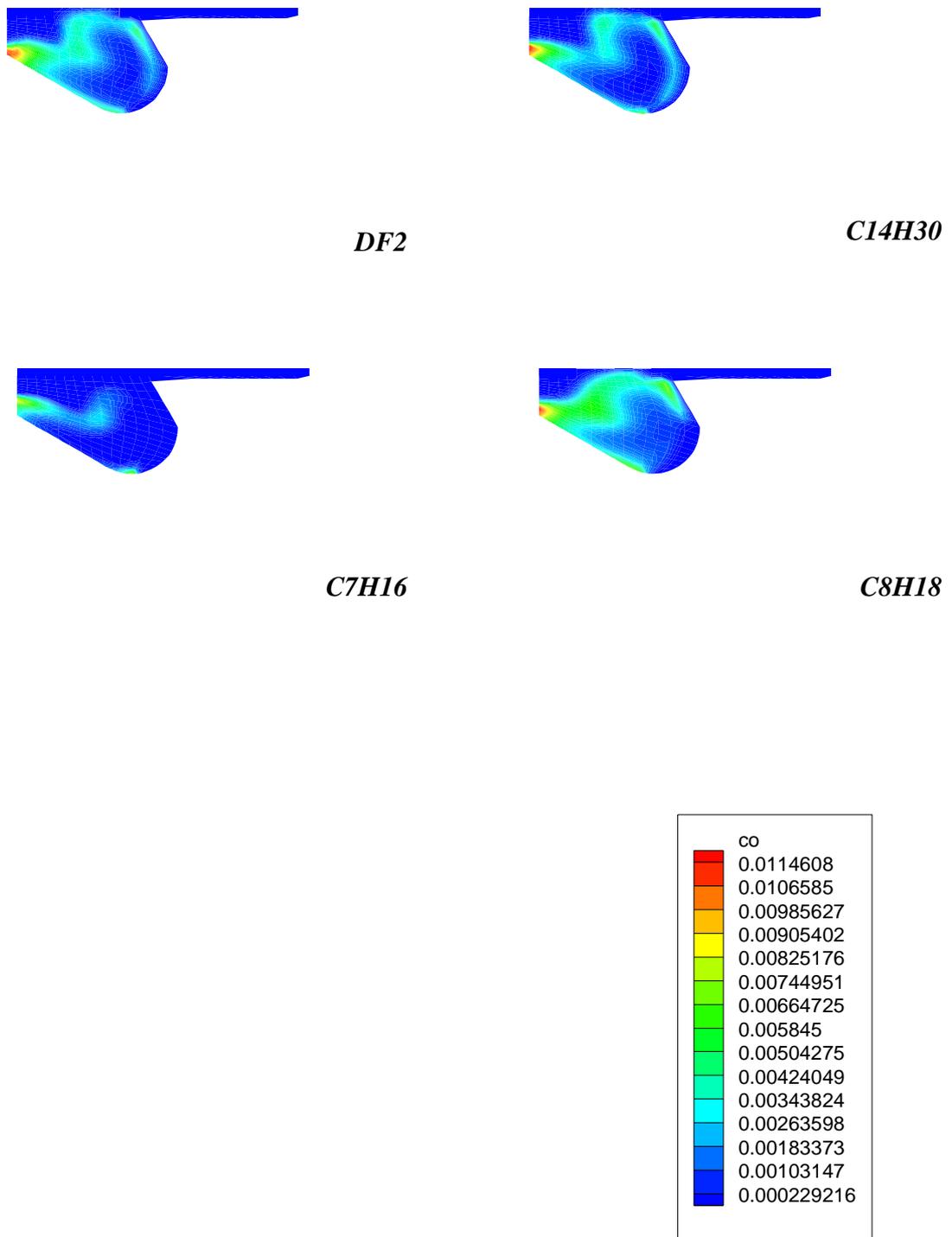
**Figure V-12-** : Evolution des masses totales de l'oxyde d'azote en fonction de l'angle de rotation pour les différents carburants.



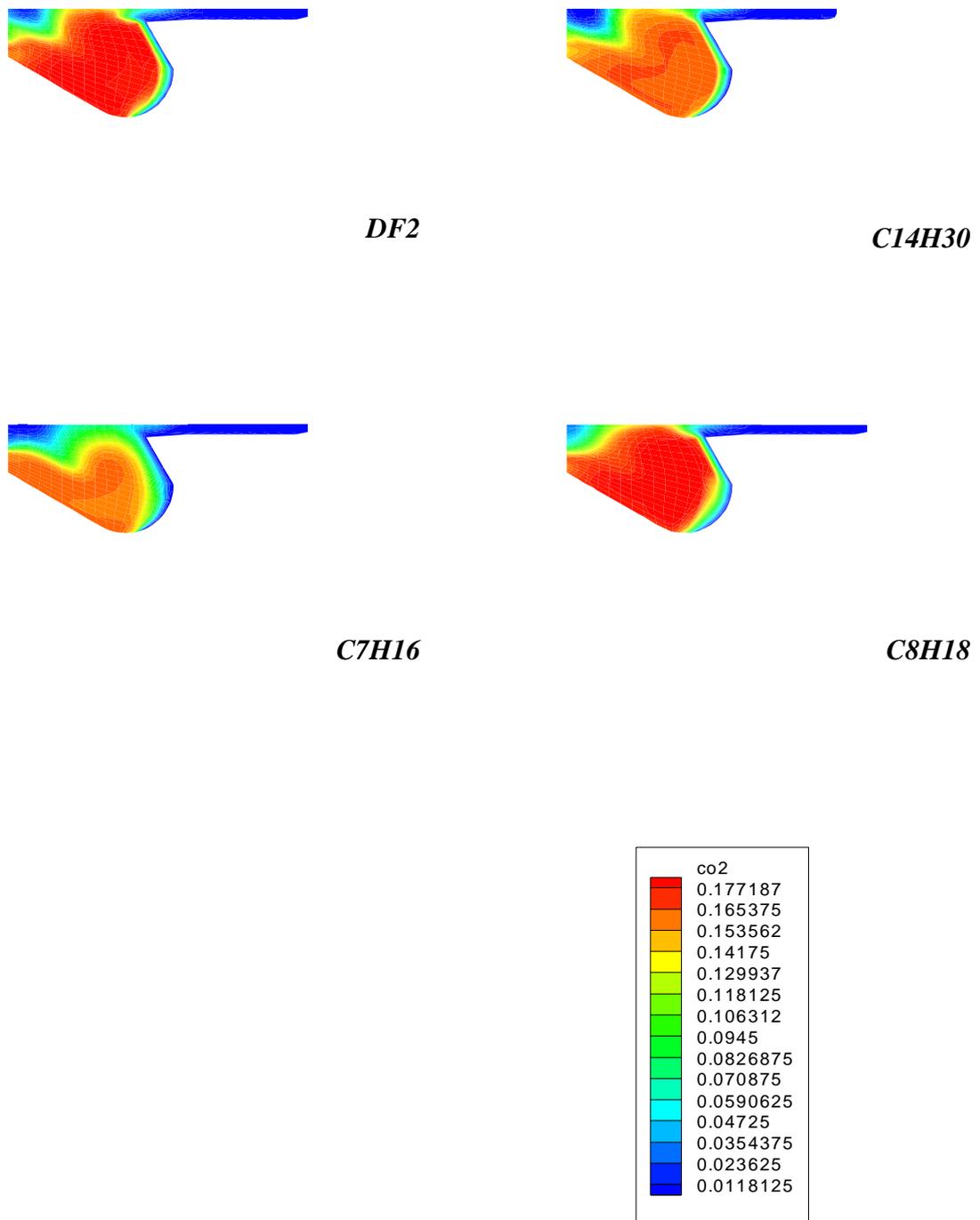
. **Figure V-13-** : Evolution de la pression moyenne en fonction de l'angle de rotation pour les différents carburants.



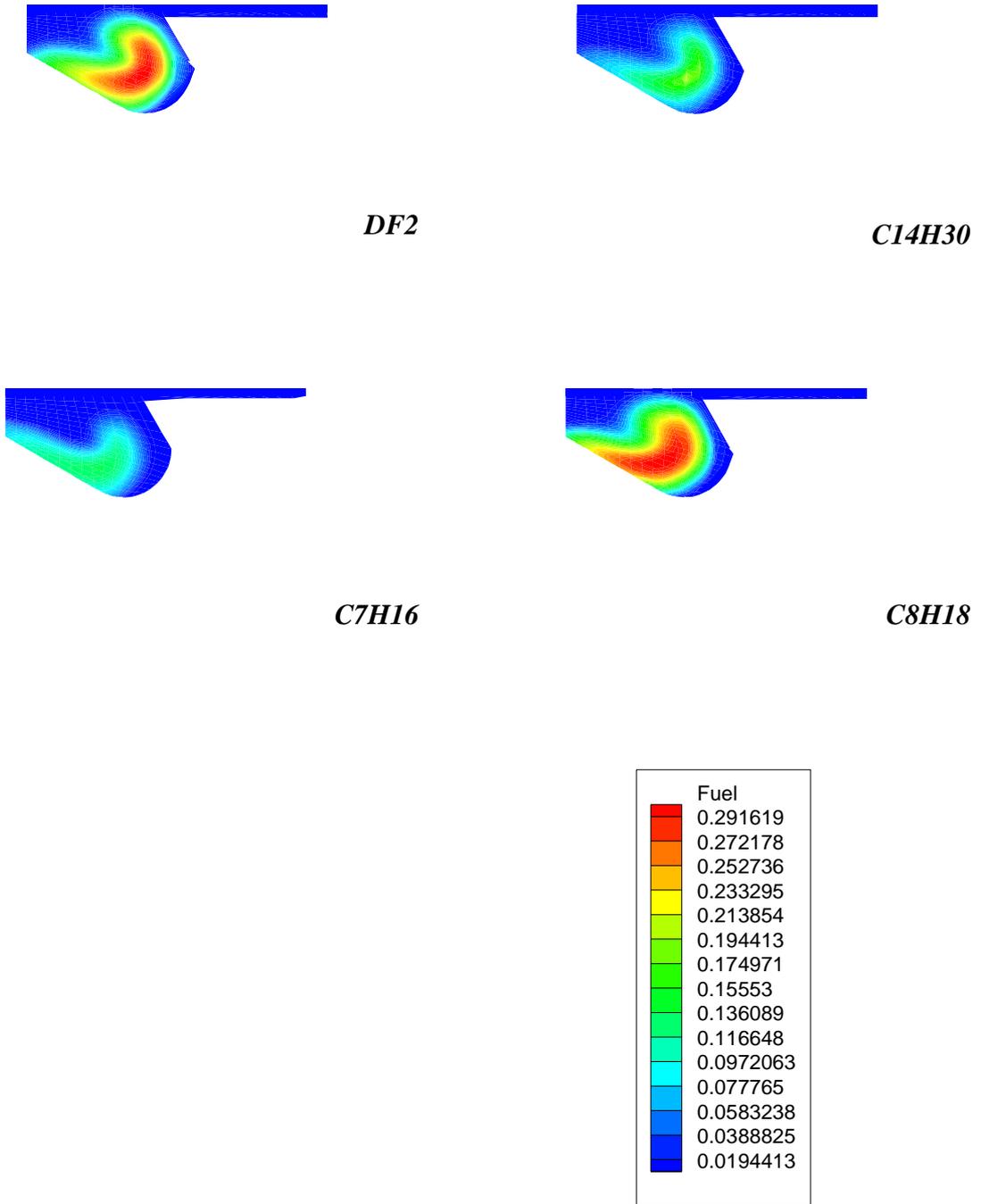
**Figure V-14-** : Isothermes a la position ( $-5^\circ$ ) avant le PMH pour les différents carburants.



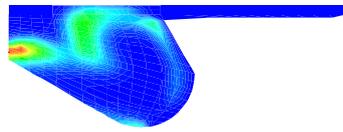
**Figure V-16-** : Les contours des fractions massiques du CO a la position ( $-5^\circ$ ) avant le PMH pour les différents carburants.



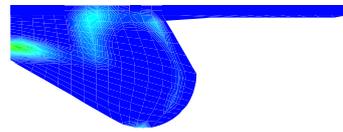
**Figure V-17-** : Les contours des fractions massiques du CO2 a la position ( $-5^\circ$ ) avant le PMH pour les différents carburants.



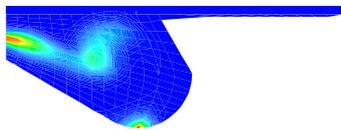
**Figure V-18-** : Les contours des fractions massiques de la consommation du carburant a la position ( $-5^\circ$ ) avant le PMH pour les différents carburants.



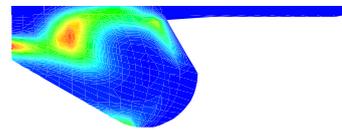
**DF2**



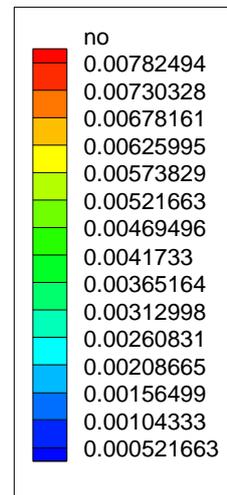
**C14H30**



**C7H16**



**C8H18**



**Figure V-19-** : Les contours des fractions massiques du NO a la position ( $-5^\circ$ ) avant le PMH pour les différents carburants.

---

# V. CONCLUSION

---

## VI. Conclusions

L'étude numérique bidimensionnelle du fait du type de carburant sur les émissions polluantes émanant d'un moteur Diesel a été développée en utilisant le code KIVA II. Les mécanismes chimiques de la cinétique et de l'équilibre de la formation des différents polluants ont été implantés dans le code.

Les résultats obtenus pour les quatre carburants nous donnent l'analyse comparative suivante :

- 1- Les quatre carburants produisent à la fin de la combustion la même masse de gaz carbonique.
- 2- Le  $C_7H_{16}$  (n-heptane) émet moins d'hydrocarbures imbrûlés à cause du faible nombre des atomes de carbone, l'énergie de liaison des atomes est moins importante que les autres carburants.
- 3- Les émissions des gaz polluants  $C_8H_{18}$  (isooctane) ressemblent aux émissions du DF2 et du  $C_{14}H_{30}$  (n-tétradécane) malgré le nombre inférieur des atomes de carbone.
- 4- Les émissions en gaz carbonique pour les quatre carburants sont très proches du fait de la température de combustion finale qui est identique pour tous.
- 5- Les émissions en monoxyde de carbone sont moins importantes pour le  $C_7H_{16}$  (n-heptane).
- 6- Les émissions en oxyde d'azote sont moins importantes pour le  $C_{14}H_{30}$  (n-tétradécane) et le DF2.

---

# **BIBLIOGRAPHIE**

---

## Bibliographie

- [1] Klaus R.G. Hein  
“Future energy supply in Europe-challenge and chances”  
Fuel 84 (2005) 1189–1194
- [2] N. Hochart et al.  
“Present Day Engines Pollutant Emissions: Proposed Model for Refinery Bases Impact”  
Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP, Vol. 58 (2003), No. 1, pp. 7-32.
- [3] Ministère de l’Aménagement du Territoire et de l’Environnement  
« Plan National d’Actions pour l’Environnement et le Développement Durable  
(PNAE-DD) », Janvier 2002.
- [4] P.Arqués  
« Inflammation combustion-pollution »  
COLLECTION TECHNOLOGIE, MASSON 1992
- [5] Roland Borghi, Michel Destriau et Gérard De Soete  
« La combustion et les flammes »  
EDITION TECHNIP, Paris 1995
- [6] Sylvain TOUCHARD  
« Construction et validation de modèles cinétiques détaillés pour la combustion de  
mélange de modèles des essences. », thèse de doctorat, E.N.S.I.C. – NANCY,  
12 Octobre 2005.
- [7] <http://en.wikipedia.org/wiki/Biomass>
- [8] M.Y.E. Selim et al.  
«Combustion of jojoba methyl ester in an indirect injection diesel engine.»  
Renewable Energy 28 (2003) 1401–1420
- [9] Emilio Lèbre La Rovere

- « Vingt-cinq ans d'éthanol au **Brésil** »  
 Biofutur, Volume 1999, Issue 195, Décembre 1999, Pages 20-21
- [10] Silvio C.A. de Almeida,  
 “Performance of a diesel generator fuelled with palm oil”  
 Fuel, Volume 81, Issue 16, 1 Novembre 2002, Pages 2097-2102
- [11] O.M.I. Nwafor  
 “Emission characteristics of diesel engine running on vegetableoil with elevated fuel inlet temperature”  
 Biomass and Bioenergy 27 (2004) 507 – 511
- [12] [http://fr.wikipedia.org/wiki/Gaz\\_de\\_pétrole\\_liquéfié](http://fr.wikipedia.org/wiki/Gaz_de_pétrole_liquéfié)
- [13] Z.D. Ristovski et al.  
 “Particle and carbon dioxide emissions from passenger vehicles operating on unleaded petrol and LPG fuel “  
 Science of The Total Environment, Volume 345, Issues 1-3, 1 June 2005, Pages 93-98
- [14] Institut Français de Pétroles (IFP),  
 Panorama 2006.
- [15] Cheikh Mansour et al.,  
 «Gas–Diesel (dual-fuel) modeling in diesel engine environment » ,  
 International Journal of Thermal Sciences, Volume 40, Issue 4, April 2001,  
 Pages 409-424.
- [16] Institut Français de Pétroles (IFP),  
 Carburants alternatifs,  
<http://www.ifp.fr>
- [17] C. E. Chitour  
 « Les propriétés physiques des hydrocarbures et des fractions pétrolières »  
 O.P.U., 1999
- [18] Jean-Claude Ghibet  
 « Les carburants et la combustion »  
 Technique de l'ingénieur, traiter génie mécanique
- [19] A. A. Amsden, P. J. ÓRourke, T. D. Butler  
 KIVA-II: A Computer Program for Chemically  
 Reactive Flows with Sprays.  
 LA-11560-MS UC-96 Issued: May 1989

- [20] R. Borghi et M. Champion  
« Modélisation et théorie des flammes »  
EDITION TECHNIP, Paris 2000
- [21] T. J. Chung  
« Computational fluid dynamics »  
Cambridge University Press, 2002
- [22] C. Bailly, G. Comte-Bellot  
“Turbulence”  
CNRS EDITION, Paris 2003
- [23] Michael J. Holst  
“NOTES ON THE KIVA-II SOFTWARE AND CHEMICALLY REACTIVE FLUID  
MECHANICS”  
Livermore, California, Août 1992
- [24] A. A. Amsden,  
“KIVA III : A KIVA program with Block-Structured Mesh for Complex Geometries.”  
Los Almos Laboratory, Report LA-12503-MS
- [25] Chrys Correa,  
« Combustion Simulations in Diesel Engines using Reduced Reaction Mechanisms”,  
Doctor of Natural Sciences, University of Heidelberg, Germany, 2000
- [26] P. Chassaing  
« Turbulence en mécanique des fluides »  
POLYTECH, 1999
- [27] Daniel Meyer,  
« Méthodes numériques en mécanique des fluides. »  
Cisi Ingenierie
- [28] J. Servant  
« Mécanisme de formation et moyens de réduction des polluants dus à la combustion »  
EDITION TECHNIP , 1973
- [29] Irvin Classman  
« Combustion »  
ACADEMIC PRESS, Second edition 1987
- [30] G. Lefebvre  
« Notions de chimie du pétrole »  
EDITION TECHNIP, Paris 1986

- [31] G. De soete et A. Feugier  
« Aspects physiques et chimiques de la combustion »  
EDITION TECHNIP, Paris 1976
- [32] Edmont Perthuis  
« La combustion industrielle »  
EDITION TECHNIP ,Paris 1983
- [33] J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble  
« Combustion »  
SRINGER, 1996
- [34] R. Borghi, P. Calvin, A. Liñán  
“Modélisation des phénomènes de combustion”  
EDITION EYROLLES, Paris 1985

