Utilisation Utilisation du modèle EDC pour la modélisation de La combustion turbulente

Boussouara Karima¹, Kadja Mahfoud²

1 Université de Constantine, Departement de Génie Mécanique, 25000, Algérie
 2 Université de Constantine, Departement de Génie Mécanique, 25000, Algérie

Résumé-Des modèles de combustion turbulente ont été proposés pour exprimer les taux de réaction moyens en fonction des variables connues, c'est-à-dire des valeurs moyennes elles-mêmes, et Probablement aussi en fonction des caractéristiques de la turbulence. Le but de cette étude est de définir le processus de combustion par l'utilisation d'un modèle de combustion turbulente dans un moteur diesel. Dans la simulation des moteurs diesel, les problèmes sont, en général, beaucoup plus complexes de part, en particulier, le caractère multiphasique des écoulements, les réactions chimiques et le comportement turbulent des fluides. Le modèle EDDY DISSIPATION est utilisé pour nous permettra donc de simuler l'injection du carburant liquide et son interaction avec le gaz contenu dans la chambre de combustion, en tenant compte des mouvements turbulents. Pour notre travail, nous aurons recours au code CFD kiva-3v, il nous permet de résoudre les équations régissant les mouvements turbulents d'un fluide, en dimension 2 ou 3.

Mots-clés : Combustion turbulente, EDC, Kiva-3v, simulation numérique, cinétique chimique

I. INTRODUCTION

La combustion est un processus majeur qui affecte nos vies, et fournit sur 90% de notre énergie utile. Malheureusement, la combustion est aussi la source principale de pollution de l'environnement [1]. L'Amélioration des processus de combustion est par conséquent à une grande importance pour réduire la consommation du combustible et émissions.

Des modèles de combustion turbulente ont été proposés pour exprimer les taux de réaction moyens en fonction des variables connues, c'est-à-dire des valeurs moyennes ellesmêmes, et Probablement aussi en fonction des caractéristiques de la turbulence.

Pour les models qui sont basés sur la solution de l'équation de transport des fractions massiques des espèces, donc il ne peut prend pas en compte les effets de la turbulence. Les termes sources qui apparaissent dans les équations de transport des espèces sont calculés d'après l'expression du taux d'Arrehenius pour les combustions non prémélangée, prémélangée et partiellement prémélangée. Les mécanismes des réactions chimiques seront prédéfinis.

II. LE MODELE DE COMBUSTION EDDY DISSIPATION

Dans le moteur diesel, les deus phases, de pré-mélange et de diffusion sont des phases de mélange contrôlé. Dans la phase de pré mélange, le mélange du combustible évaporé pour former une fraction flammable à la fin du délai d'allumage est très important. Dans la phase de diffusion, la vaporisation du combustible et le mélange du combustible évaporé avec l'air entouré contrôles la combustion. Durant la phase du mélange contrôler, la combustible et la diffusion du combustible dans l'air dépendre des zones de mélange riche et pauvre en combustible respectivement. D'où, l'équation du taux de combustible respectivement. D'où, l'équation EDDY DISSIPATION. Cette équation représenté comme [3]:

$$R_{comb} = A_1 \cdot \frac{\varepsilon}{k} \cdot \min[m_f, \frac{m_{o2}}{(O_2/F)_{st}}, \frac{A_2 \cdot m_{prd}}{1 + (O_2/F)_{st}}]$$
(1)

R_{comb} est en kg/s

Ou, A_1 , A_2 sont des constantes empirique, m_f , m_{o2} , m_{prd} sont la masse du combustible, oxygène et les produits respectivement, k c'est l'énergie cinétique turbulente et ε son taux de dissipation [3].

Ce model est basé sur les travaux de Magnussen et Hjertager [4], dans lequel la chimie est considérée très rapide par rapport à la turbulence. Il permet ainsi d'éviter le calcul des taux cinétiques très onéreux en termes de temps de calcul. Toutefois son domaine de validité se restreint à la combustion turbulente, prémélangée ou non, c'est-à-dire à grand nombre de Damkohler.

$$D_a \approx \frac{\acute{e}chelle\,de\,temps\,de\,m\acute{e}lange}{\acute{e}chelle\,de\,temps\,cin\acute{e}tique}$$
(2)

Le taux de réaction est supposé être déterminé par le taux de mélange réactif-combustible à une échelle moléculaire, c'està-dire par le taux de dissipation des tourbillons. Dans le cas d'une combustion non-prémélangée, la réaction est limitée par le réactif de concentration la plus faible dans le tourbillon.

III. LES EQUATIONS GOUVERNANTES

A. les Equations De La Phase Gazeuse

Dans l'absence des gouttelettes de liquide, les équations de Navier-Stokes pour l'écoulement de gaz peuvent être utilisé [5].

1) Equation de conservation de la masse totale

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho \vec{u}) = \dot{\rho}^s \tag{3}$$

Ou ρ est la densité en phase gazeuse, \vec{u} la vitesse locale du flux gazeux, $\dot{\rho}^s$ le terme source décrire l'échange de masse due à l'évaporation des gouttelettes du liquide.

2) Equation de conservation de la masse des espèces

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + div(\rho_k \vec{u} + \vec{j}_k) = M_k \dot{\omega}_k + \dot{\rho}_k^{\ s},$$

$$(k = 1, \dots, N_s)$$
(4)

Où ; $\rho_k, M_k, \dot{\omega}_k et \dot{\rho}^s_k$ sont la densité, la masse molaire, le taux de production molaire due aux réactions chimique, et les contributions résultantes d'évaporation de la phase liquide à la phase gazeuse de l'espèce k respectivement. N_s est le nombre des espèces réactivés [5].

3) Équation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{u}) + div(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + div(\overline{\overline{P}}) = \rho \vec{g} + \vec{f}^{s} \qquad (5)$$

Ou \overline{P} est le tenseur de pression, \vec{g} est l'accélération gravitationnelle, et \vec{f}^{s} la quantité de mouvement changée par unité de volume due à l'interaction entre les phases gazeuse et liquide.

4) Equation de conservation de la masse totale

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho \vec{u}) = \dot{\rho}^s \tag{6}$$

Ou ρ est la densité en phase gazeuse, \vec{u} la vitesse locale du flux gazeux, $\dot{\rho}^s$ le terme source décrire l'échange de masse due à l'évaporation des gouttelettes du liquide.

5) Équation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{u}) + div(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + div(\overline{\overline{P}}) = \rho \vec{g} + \vec{f}^{s}$$
(7)

Ou \overline{P} est le tenseur de pression, \vec{g} est l'accélération gravitationnelle, et \vec{f}^{s} la quantité de mouvement changée par unité de volume due à l'interaction entre les phases gazeuse et liquide.

6) Equation de conservation de l'énergie

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + div(\rho \vec{u} E + \vec{J}_q) + \overline{\overline{P}}: grad(\vec{u}) = \dot{q}^s + \dot{q}^r \quad (8)$$

Ou, E est l'énergie interne spécifique, $\overline{\overline{J}}_q$ un terme source due au chaleur de conduction, et $\overline{\overline{P}}: grad(\overline{\overline{u}})$ [5] est un terme de changement de l'énergie due aux pression et dissipation visqueuse, \dot{q}^s le taux de la chaleur consommée due à l'évaporation des gouttelettes, et \dot{q}^r est le taux due au Rayonnement.

7) Equations des models de turbulence

Le model standard de turbulence k- ε est utilisé dans KIVA-3v, et il est utilisé largement dans industrie. La version Standard du modèle de la turbulence du k- ε , modifiée pour inclure l'effet de L'expansion volumétrique (dilatation de vitesse) et l'Interactions spray/turbulence [6].

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \nabla .(\rho \vec{u} k) = -\frac{2}{3}\rho k \nabla .\vec{u} + \vec{\sigma} : \nabla \vec{u} + \nabla .\left[\left(\frac{\mu}{\Pr_k}\right)\nabla k\right] - \rho \varepsilon + \dot{W}^s$$
(9)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \nabla .(\rho \,\vec{u} \,\varepsilon) = -(\frac{2}{3}C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3})\rho \,\varepsilon \,\nabla .\vec{u} + \nabla .\left[\left(\frac{\mu}{\Pr_{\varepsilon}}\right)\nabla\varepsilon\right] +$$
(10)
$$\frac{\varepsilon}{k} \left[C_{\varepsilon 1} \vec{\sigma} : \nabla \vec{u} - C_{\varepsilon 2}\rho\varepsilon + C_{s} \dot{W}^{s}\right]$$

Ou, k est l'énergie cinétique turbulente, σ est tenseur newtonien des contraintes visqueuses, ϵ est le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente, \dot{W}^s regroupe les termes sources provenant de l'interaction mélange/spray, $C_{\epsilon l}$, $C_{\epsilon 2}$, $C_{\epsilon 3}$, Pr_k , Pr_{ϵ} sont les constantes usuelles du modèle de la turbulence k- ϵ , μ est un coefficient de viscosité.

B. Les Equations De La Phase Liquide

L'association des termes source entre les phases gazeuse et liquide sont critique pour les simulations diesel et compter dans la description mathématique des spray, cela subit à une séquence des sous-processus inclure Atomisation, le fractionnement et la collision des gouttelettes, la dispersion turbulente, et l'évaporation [5].

IV. LE MODEL DE LA CHIMIE

Les réactions chimiques sont classées en deux classes : celles qui se produisent de manière dynamique et celles qui sont supposées en équilibre permanant. Si les espèces peuvent interagir par réaction chimique, le problème se complique énormément : il y a création (ou disparition) volumique.

V. DEMARCHES NUMERIQUES DU KIVA 3V

La discrétisation des équations qui gouvernent la combustion dans le code KIVA retient une combinaison de la méthode ALE (Arbitrary Lagrangiens Eulerian) pour la discrétisation spatiale et une méthode implicite de discrétisation variable au temps (variable theta methods) [8].

A. Discrétisation spatiale par la méthode ALE



Figure 1. Maille ALE à deux dimentions

La méthode ALE est une méthode de volume finie, pour des hexaèdres arbitraires dans 3D et quatre semis polygones en 2D. les équations de mouvement sont formulé par une vitesse de mouvement U du grille, varie entre 0 et u. donc la formulation varie d'une façon continue entre Eulérienne (U=0) et Lagrangienne (U=u). En deux dimensions, la maille de l'algorithme ALE est définie par un polygone (Figure 1) [8] avec 4 coins, et la cellule de centre et calculer comme :

$$x_{ij}^{\ c} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha}^{4} x_{\alpha}$$

$$y_{ij}^{\ c} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha}^{4} y_{\alpha}$$
(11)

Où α aligne sur tous les 4 noeud de la cellule.

Dans KIVA, cette formulation à deux dimensions est étendue à trois dimensions. Chaque sommet est noté par trios indices i, j, k. les sections deviennent des volumes, tant que les bords deviennent des faces des cellules. KIVA utilise des maillages structurés, constitués d'hexaèdres (mailles à six faces), de sorte que l'on peut décomposer cette relation comme la somme des flux traversant chaque face.

B. Discretisation Temporelle

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

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \approx \frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\Lambda t^n} \tag{12}$$

Chaque cycle est exécuté dans trois étapes (phases) comme suit: Phase A est lagrangienne. Réellement, nous pouvons penser que dans cette phase la maille ne déplace pas et le volume de contrôle ne déplace pas. Donc la cellule paraît comme un volume constant dans le quel la combustion et la spray se produisent. Phase B est aussi une phase Lagrangienne. Dans cette phase le volume de contrôle ce déplace avec le fluide. Phase C est phase du rezonning/remaillage [8]. Dans cette phase le champ de fluide est en "gelé statique ", et la maille déplace à une nouvelle position. Donc nous avons besoin à remailler à une nouvelle maille computationelle. La combinaison de ces trois phases est équivalente au processus quand la maille déplace à une nouvelle position dans un pas du temps Δt , le fluide aussi déplace.

VI. SPECIFICATION DU MOTEUR DIESEL UTILISE POUR LA SIMULATION

A. Paramètres du moteur

Le moteur utilise dans la simulation est un moteur diesel a deux temps, les proprietes du moteur, les conditions de simulation, et tous les parametres concernant le model choisi est represente selon le tableau 1 [9].

Spécification géométrique	
Le diamètre	82.55 mm
La course	95.975 mm
squish	1.8 mm
La longueur de la bielle	162.69 mm
La forme du piston	Mexicaine
Les donnés d'injection	
La température du fuel	350 °k
La durée d'injection	7° CA
Le type du jet	Conne solide
L'angle d'injection	25°
Les conditions d'opération	
La vitesse de rotation	2600 rpm
Le temps d'injection	14° ATDC
La pression d'admission	1.5 bar
Les paramètres de simulation	
La température d'admission d'air	550 k
La masse totale du fuel injecté	0.01 g/cycle
Le fuel	N-heptane

B. La forme du piston et le maillag generé

Le générateur de maille exige seulement un fichier de données sous forme d'un tableau d'information. La forme étudier est la forme mexicaine présenté par la Fig.2 [9]. La figure 3, présente le maillage suivant (x,z) avec la présence des 2 valves.



Figure 2. La géométrie du piston au PMH



Figure 3. Maillage avec valve

VII. LES REACTIONS CHIMIQUES

Les réactions chimiques sont présentées par une réaction globale d'oxydation du carburant injecté (C_7H_{16}) d'après [10]:

$$C_n H_m + (n + \frac{m}{4})O_2 \Leftrightarrow nCO_2 + \frac{m}{2}H_2O$$
⁽¹³⁾

VIII. LES RESULTAS OBTENUE

A. P Résultas de pression, température, Tke, Epsilon, Chaleur Dégagée



1. Courbes

Figure 4. Évolution de la pression et de la Température en fonction des degrés vilebrequin



Figure 5 . Chronologie de la combustion d'après [11]

La Fig.4 présente l'histoire de la variation de pression modélisée dans le cylindre du moteur. Cette figure présente la courbe de pression obtenue par simulation du modèle en fonction de l'angle vilebrequin, entre -180°et 180°vilebrequin. La pression dans le cylindre permet de déterminer le rendement du moteur. On tire aussi de cette grandeur d'intéressantes indications sur le déroulement de la combustion. Les valeurs de pression obtenue par simulation sont élevées prés de la fin de zone d'injection. Noté que le pic de pression est 5.81 Mpa après le PMH. La courbe semble trop symétrique par rapport aux données disponibles dans la littérature, (comparaison des figures 4,5)



Figure 6. Variation de l'énergie Cinétique turbulente et le taux de dissipation avec le mouvement du piston

La Fig.6, représente l'évolution de l'énergie cinétique turbulente avec le mouvement du piston, donc, pour toutes les phases de déplacement du moteur. Pour ce moteur diesel et pour ces conditions, La valeur du TKE augmenté durant la phase de compression, est atteinte une valeur maximale prés du PMH, exactement à -5 atdc, $4.4*10^5$ cm²/s² .La courbe de variation du taux de dissipation aussi présenté par la figure 3. La valeur maximale atteinte est $5.5*10^8$ cm²/s³.



Figure7. Contours de température



Figure8 : contours de pression

Les isothermes et le champ de pression sont schématisés sur les figs. 7, 8

B. Résultas des especes chimique



Figure 9 : évolution de c7h16, N2 en fonction des degrés vilebrequin

La fig.9, présente l'évolution du taux de C_7H_{16} dans le cylindre. La quantité injectée du n-heptane est 0.01g. Le mécanisme d'interaction air-fuel et la location spatiale de début de combustion à été déterminé par le sui de d'injection progresse, vaporisation, auto inflammation et combustion.

La courbe de N_2 présenté par la fig.9, signifie que la quantité initiale de N_2 est constante puis commence à diminuer avec le début de combustion jusqu'à obtention des valeurs minimales.



Figure 10 : évolution de c₇h₁₆, co2 en Fonction des degrés vilebrequin



Figure 11 : évolution de c₇h₁₆, h₂o en fonction des degrés vilebrequin

Le dioxyde de carbone, est un produit de processus de combustion, résulté de l'interaction direct entre le combustible injecté et l'air à comprimé dans le cylindre. Les première traces de co_2 apparut au niveau des degrés d'injection et ça quantité augmenté successivement avec l'augmentation de la masse injecté du n-heptane jusqu'à l'obtention de stabilité. Donc, Pour différents angles de vilebrequin, cette fraction augmente lors de la phase de combustion en vertu de l'équation globale de la réaction. La fig.10 montre l'évolution de la fraction massique du dioxyde de carbone CO2.

La fraction massique du h_{20} produit l'or de la combustion du n-heptane est illustrée sur la fig.11. L'oxygène contenir dans l'air admis dans le cylindre, en premier temps, à une valeur constante, mais au temps d'injection, cette quantité diminuée successivement, parceque se combine avec le combustible injecté.



Figure 12 : contours de c_7h_{16}

Dans un moteur diesel, le mélange air-combustible n'est jamais homogène car le combustible n'est injecté que vers la fin du temps de compression. Le combustible ne peut pas s'enflammer dès que commence son introduction dans le cylindre puisqu'il doit, au préalable, emprunter à l'air comprimé dans la chambre et aux parois la chaleur qui lui est nécessaire pour atteindre sa température d'autoinflammation.



Figure 13. Contours de o_2



Figure 14. Contours de co₂



Figure 15 : contours de h20

Dans un moteur diesel, le mélange air-combustible n'est jamais homogène car le combustible n'est injecté que vers la fin du temps de compression. Le combustible ne peut pas s'enflammer dès que commence son introduction dans le cylindre puisqu'il doit, au préalable, emprunter à l'air comprimé dans la chambre et aux parois la chaleur qui lui est nécessaire pour atteindre sa température d'autoinflammation.

Les figures 12,15 sont prises au niveau du PMH. La fig.12 montre le champ de la fraction massique de fuel. L'allumage se produit vers l'amont de l'injecteur à l'extrémité du jet (la première zone du jet qui se mélange avec de l'air) et la flamme vient juste de commencer son évolution.

Avec les position de piston, on peut conclus l'avantage de la diffusion de la flamme vers l'extérieur du jet. C'est non seulement parceque plus de carburant a été injecté, mais également parceque les températures de la flamme font évaporer le carburant plus rapidement.

IX. CONCLUSION

L'objectif de notre étude est l'utilisation du modèle de combustion EDDY DISSIPATION par une simulation numérique des écoulements réactifs en présence du spray dans un moteur Diesel. Cet objectif émane de la nécessité de comprendre les mécanismes qui régissent ces écoulements, et de maîtriser le code de calcul puissant « KIVA- 3v » utilisé mondialement dans de telles simulations.

Les conditions de fonctionnement du moteur ainsi que les modèles physique et chimique utiliser est très nécessaires pour le mécanisme de fonctionnement des moteurs diesel. La masse injecté du carburant, le type du carburant, les propriétés du carburant et aussi paramètres d'injecteurs, la composition d'ai admis....etc, influent directement sur la température de combustion et la chaleur dégagée et toutes les performances du moteur diesel.

Ce travail nous a permis de :

- Connaître d'une manière approfondie des phénomènes de mélange et de combustion dans un moteur diesel à injection directe, l'évolution du processus de combustion.
- Cerner les éléments fondamentaux pour la simulation numérique de la combustion, notamment les équations qui régissent les écoulements réactifs, les modèles utilisés et la formulation mathématique nécessaire, en vu de l'optimisation des performances énergétiques et environnementales.
- Le modèle de combustion turbulente est un modèle efficace pour la modélisation de la combustion dans un moteur diesel.

REFERENCES

- D. C Amsden, A. A. Amsden. The KIVA Story: A Paradigm of Technology Transfer, IEEE transactions on professional communication, vol. 36, no. 4, 1993
- [2] R. Muriel. Codes de champ : potentialité et limites, INSA, 2000
- [3] T. Bhaskar, S. Pramod, S.Mehta .A multi-zone diesel combustion model Using Eddy dissipation concept, Internal combustion engines laboratory. India. Comodia 1998
- [4] B. F. Magnussen, B. H. Hjertager. On mathematical modeling of turbulent Combustion with special emphasis on soot formation and combustion, sixteenth symposium (international) on combustion, the combustion institute, Pittsburgh, 1977

- [5] Ftao. Governing equations, 2003
- [6] A. A. Amsden, P. J. O'Rourke, T. D. Butler. KIVA-11: A computer program for chemically reactive flows with sprays, Los Alamos National Laboratory report LA-11560-ms, 1989
- [7] Ftao. Kinetic combustion mechanism, 2003
- [8] Ravindra Aglave. CFD Simulation of Combustion Using Automatically Reduced Reaction Mechanisms: A Case for Diesel Engine, Thèse de Doctorat à l'Université de Heidelberg, Germany, 2007
- [9] J. Kim, , R. Reitz. Reduction of NOx and co emissions in stoichiometric diesel combustion using a 3-way catalyst, Engine Research Center, University of Wisconsin-Madison Madison, USA, 2009
- [10] W.Richard, D.Boubel, D Turner. Fundamentals of air Pollution, Third edition, academic press, Sydney, 1994
- [11] P. Sovanna. Moteurs thermiques : combustion et suralimentation, 2004
- [12] Anthony UNG. Cartographie de la pollution atmosphérique en milieu urbain a l'aide de données multisources, Thèse de Doctorat, Université de Paris, 2003
- [13] Axel Vincent. Conception et simulation d'un réacteur fil-cylindre à Décharge couronne avec barrière diélectrique adaptée au traitement des oxydes d'azote dans des effluents marqués par un isotope, thèse de doctorat de l'université paris vi Pierre et marie curie, 2002
- [14] Popovich, M., and Hering, C. Fuels and Lubricants. Oregon State University Press, Corvallis, 1978
- [15] A.Haupais. Combustion dans les moteurs Diesel, Techniques de l'Ingénieur, pp. 1-33, 1994
- [16] Vincent Faivre. Étude expérimentale et numérique du contrôle actif de jets dans des chambres de combustion. Thèse de Doctorat à l'institut national polytechnique de Toulouse, 2003
- [17] J. B. Heywood . Internal Combustion Engine Fundamentals, McGraw-Hill book CO, Singapore, 1988
- [18] N. L. Johnson. The Legacy and Future of CFD At Los Alamos, Proceedings of the 1996 Canadian CFD Conference Invited talk. Ottawa, Canada June 3-4, 1996
- [19] Développement d'un code de calcul pour la Simulation d'écoulements de fluides non Miscibles. Application `a la désintégration Assistée d'un jet liquide par un courant Gazeux, thèse de doctorat à l'ENSA – Toulouse, 2007
- [20] A. A. Amsden, T. D. Butler, P. J. O'Rourke, J. D. Ramshaw. KIVA-A Comprehensive model for 2-D and 3-D engine simulations, S4E Paper 850554, 1985
- [21] A. A. Amsden, J. D. Ramshaw, P. J. O'Rourke, J. K. Dukowicz. KIVA A computer Program for two- and three-dimensional fluid flows with chemical reactions and fuel sprays. Los Alamos National Laboratory Report LA-10245-MS, 1985
- [22] P. J. O'Rourke, A. A. Amsden. Three-dimensional numerical simulations of the UPS- 292 stratified charge engine, SAE Paper 870597, 1987
- [23] A. A. Amsden. KIVA-3 A KIVA Program with Block-Structured Mesh for Complex geometries, Los Alamos National Laboratory report LA-12503-MS, 1993
- [24] A. A. Amsden. KIVA-3V: A Block-Structured KIVA Program for Engines with Vertical or canted Valves, Los Alamos National Laboratory report LA-13313-MS, 1997
- [25] A. A, Amsden. KIVA-3V release 2, improvements to KIVA-3V, Los Alamos National Laboratory report LA-13608-MS, 1999
- [26] R. D. Reitz Computational Fluid Dynamics Modeling of Diesel Engine Combustion and Emissions, Engine Research Center, University of Wisconsin-Madison, 2005