

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

THÈSE

N° d'ordre : 68/TS/2010
N° de Série : 10/GM/2010

Présentée à

L'UNIVERSITÉ DE CONSTANTINE

Pour obtenir le diplôme de

DOCTORAT EN SCIENCE EN GENIE MECANIQUE

Option : Energétique

Par :

KARIMA BOUSSOUARA

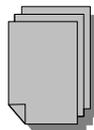
THEME

**ETUDE DES EMISSIONS POLLUANTES
ET DES MOYENS DE DEPOLLUTION DANS
LES MOTEURS A COMBUSTION INTERNE**

Soutenu le 01 / 07 / 2010 devant le Jury composé de :

Mrs.

Ali BOUCHOUCHA	Professeur à l'Université Mentouri, Constantine	(Président)
Mahfoud KADJA	Professeur à l'Université Mentouri, Constantine	(Rapporteur)
Mohamed SIAMER	Professeur à l'Université de Batna	(Examineur)
Zoubir NEMOUCHI	Professeur à l'Université Mentouri, Constantine	(Examineur)
Cherif BOUGRIOU	Professeur à l'université de Batna	(Examineur)



REMERCIEMENTS

*En premier lieu, je souhaite adresser mes remerciements à **Mr. Mahfoud Kadja**, Professeur à l'université Mentouri de Constantine, qui m'a encadré, au jour le jour, avec une grande disponibilité, tout au long de cette thèse réalisée au laboratoire de mécanique. Sa sympathie, son enthousiasme et ses encouragements m'ont été infiniment précieux au cours des années de mon travail. Je le remercie plus particulièrement pour la confiance qu'il m'a accordée durant ces années et d'en avoir amélioré le contenu par la qualité de leur remarque.*

*Merci à **Mr. Bouchoucha Ali**, Professeur à l'université Mentouri de Constantine, d'avoir assumé la présidence du jury, qui m'a encadré pour l'obtention de la mémoire d'ingénieur d'état en génie mécanique.*

*Je voudrais remercier **Mr. Siamer Mohamed**, professeur à l'université de Batna, **Mr. Bougriou Cherif**, Professeur à l'université de Batna, pour avoir accepté de juger ce travail de thèse.*

*Je souhaite remercier **Mr. Nemouchi Zoubir**, Professeur à l'université Mentouri de Constantine, pour leur participation au sein du jury de thèse, son énergie et son expertise scientifique ne peuvent laisser personne indifférent, Merci à lui pour cela.*

Mes remerciements s'adressent également à l'ensemble des personnes qui ont permis la réalisation de cette thèse.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude à mes parents pour m'avoir toujours permis de travailler et de vivre dans les meilleures conditions qui soient. Qu'ils trouvent dans l'accomplissement de ce travail un geste de reconnaissance et de remerciement.

Enfin, je remercie tout particulièrement ma famille et mes amis proches pour leurs encouragements. Les valeurs que j'ai appris d'eux m'ont aidé à franchir cette étape de ma vie, elles m'aideront encore pour celles à venir...

Résumé

Avec la sévèrisation croissante des normes anti-pollution, la prise en compte des moyens de réduction des polluants dans les moteurs à combustion interne devient essentielle. Dans ce contexte, l'objectif de cette thèse est de développer un outil de modélisation permettant l'étude des émissions polluantes et leurs réductions dans un moteur diesel. La diminution des émissions polluantes devient un objectif primordial lors de la conception et de l'optimisation des moteurs Diesel de forte puissance. Le travail présenté dans cette thèse est centré sur ce point important, et sur les conséquences engendrées sur le comportement général des moteurs. Compte tenu de la complexité des moteurs, la simulation est le moyen d'analyse privilégié. Le Diesel connaît de plus en plus de succès. En effet, les moteurs Diesel sont bien connus pour leur robustesse, leur longévité mais également pour leur meilleur rendement de combustion qui implique une faible consommation de carburant. Cependant, les moteurs Diesel émettent de grandes quantités de polluants tels que les NO_x et des particules de suies. L'objectif de cette thèse est donc de modéliser la formation des NO_x et des suies dans ces moteurs. Après une brève introduction, une description des sources fixes des NO_x et les suies et de leurs niveaux d'émissions sera faite. Les problèmes liés à l'environnement et la santé seront aussi évoqués. Par la suite, les règlements et les tendances d'émission sont récapitulés. Après avoir décrit les principaux aspects du problème d'émission des NO_x et suies, les approches pour leur élimination seront passées en revue.

Pour faire les diverses modélisations, le code kiva-3v originalement développé aux USA par le laboratoire national Los Alamos pour le calcul des écoulements réactifs accompagnés de transfert de chaleur à été utilisé comme outil de travail.

Mots clés : Auto-inflammation, moteur diesel, cinétique chimique, NO_x , formation et oxydation de suie, Recirculation des gaz d'échappement, kiva-3v, EDC

Abstract

With the increasing severisation of the anti-pollution standards, taking into account the means of reducing them in the internal combustion engines becomes essential. In this context, the objective of this thesis is to develop a modeling tool allowing the study of the pollutant emissions and their reduction for diesel engines. The reduction of pollutant emissions is now a major concern during the design and optimisation of large Diesel engines. This study deals with this challenge, and with the consequences for general engine behaviour. Due to the size of the engines involved in this study, numerical simulation appears to be the privileged tool of analysis. The use of Diesel engines has greatly increased over recent years due to their reliability, durability and efficiency that implies a low fuel consumption. However, Diesel engines emit a large amount of pollutants that are NO_x and soot particles. The objective of this thesis is therefore to model the formation of NO_x and soot in such engines. After a brief introduction, a description of sources of NO_x and soot and their emission levels will be made. The problems related to environment and health are also discussed. Subsequently, the regulations and emission trends are summarized. After describing the main aspects of the problem of NO_x and soot emissions, the approaches to their elimination will be reviewed. In order to do the various modelings, the kiva-3V code originally developed in the USA by Los Alamos National Laboratory for calculating reactive flows accompanied by heat transfer was used as a working tool

Keywords: Auto-ignition, Diesel engine, chemical kinetics, NO_x , soot formation and oxidation, Exhaust Gas Recirculation, kiva-3v, EDC

ملخص

في وجود معيار أكثر صرامة لمكافحة تزايد التلوث ، الأخذ في الاعتبار الوسائل اللازمة للحد من نسبة الملوثات في محركات الاحتراق الداخلي أمر ضروري. إن الهدف من هذه الدراسة هو استعمال وتطوير أداة نمذجة تسمح بدراسة وفهم البواعث الملوثة لمحركات الديزل وكذلك طرق خفضها. التخفيض في مصدر البواعث أصبح الهدف الرئيسي أثناء تصميم محركات الديزل عالية الطاقة. العمل الذي عرض في هذه الرسالة يركز على هذه النقطة الهامة، و على النتائج التي تترتب على الأداء العام للمحركات. لذا، تعتبر المحاكاة الرقمية أداة مهمة للتحليل. محرك الديزل يعرف نجاحا أكثر فأكثر. في الواقع ، محركات الديزل معروفة جيدا بصلابتها وقدرتها على التحمل ولكن أيضا يستلزم تحسين كفاءة الاحتراق ، مما يعني انخفاض استهلاك الوقود. في حين ينبعث من محركات الديزل ملوثات كثيرة مثل أكاسيد النيتروجين ، الجزيئات الصلبة. سيكون الهدف هو تطوير المشاكل المرتبطة بانبعاث أكاسيد النيتروجين والجزيئات الصلبة ، إمكانيات السيطرة على نسبتها والتخفيض منها أيضا ستقدم. بعد مقدمة موجزة ، ستقدم تعريفات وتحليل لمصادر أكاسيد النيتروجين والجزيئات الصلبة ، ومستويات الانبعاث الخاصة بها. المشاكل المتعلقة بالبيئة والصحة تناقش أيضا بعد ذلك، تطرقا إلى أنواع وأنظمة الانبعاث. وبعد أن أتمنا جميع الجوانب الرئيسية لمشكلة انبعاث أكاسيد النيتروجين، سيتم التطرق و النظر في سبل خفض نسبة.

لإتمام هذه الدراسة، برنامج kiva-3v ألدی طور في مختبر Los Alamos استخدم كأداة لحساب حركة الموائع

كلمات مفتاحية : الاشتعال الذاتي، محركات الديزل، الحركية الكيميائية، أكاسيد النيتروجين، تشكيل وأكسدة الجزيئات الصلبة، EDC , kiva-3v, EGR,

Table des matières

Liste des tableaux	v
Table des Figures	v
Nomenclature	v
INTRODUCTION GENERALE	1
CHAPITRE 1. LES PRINCIPES DE LA POLLUTION DE L’AIR	
1.1 L'histoire de la Pollution D'air	
1.1.1 Introduction	7
1.1.2 Evolution de la pollution atmosphérique	9
1.1.3 Les différents polluants et leur importance historique	9
1.1.4 Historique de la fumée et du gaz sulfureux	10
1.1.5 Historique de l'analyse scientifique de la pollution de l'air..	11
1.1.5.1 avant la révolution industrielle	11
1.1.5.2 la révolution industrielle	12
1.1.5.3 Le vingtième siècle	14
1.1.5.4 Les années 1980	18
1.1.5.5 Les années 1990	19
1.1.5.6 Le future	20
1.2 Sources D'émissions des Polluants Atmosphériques	
1.2.1 Générale.....	20
1.2.1.1 Les sources naturelles	21
1.2.1.2 Les sources anthropiques	22
1.2.2 Combustion	26
1.2.3 Sources fixes	26
1.2.4 Sources mobiles	27
1.3 Principaux Polluants de L'air	
1.3.1 La composition de l'air	28
1.3.2 Caractéristiques des polluants	28
1.3.3 Principaux polluants de l'air	29
1.3.3.1 Les polluants primaires	30
1.3.3.2 Les polluants secondaires.....	34
1.3.4 Les autres polluants	36
1.3.4.1 L'ammoniac NH ₃	37
1.3.4.2 Le sulfure d'hydrogène H ₂ S	37
1.3.4.3 L'acide chlorhydrique HCl	37
1.3.4.4 Les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques HAP.....	37
1.3.4.5 Les pesticides	37
1.3.4.6 Métaux lourds	38
1.3.4.7 Les produits fluorés	39
1.3.4.8 Les dioxines	39
1.3.4.9 Les émissions radioactives	39
1.3.4.10 Les polluants d'origine agricole	39
1.4 Effets de La Pollution D' air	

1.4.1	Impact de la pollution atmosphérique sur les êtres vivants... 40	40
1.4.1.1	Effets sur la Santé de l’homme	40
1.4.1.2	Effets sur les Végétation et les animaux.....	44
1.4.2	Impact de la pollution atmosphérique sur l’environnement..	44
1.4.2.1	Effets locaux des polluants sur l’environnement...	45
1.4.2.2	Effets globaux des polluants sur l’environnement..	46
1.4.2.3	Effets des principaux polluants sur l’environnement.....	49

CHAPITRE 2. TECHNOLOGIES DES MOTEURS A COMBUSTION INTERNE

2.1	Description Des Moteur MCI	
2.1.1	Introduction	51
2.1.1.1	Historique	51
2.1.1.2	Classifications	52
2.1.1.3	Principe de fonctionnement	55
2.1.1.4	Particularités du moteur Diesel	57
2.1.1.5	Comparaison entre moteur Diesel et essence	57
2.1.2	Caractéristiques de la combustion diesel	58
2.1.2.1	Définitions	58
2.1.2.2	Modélisation de la cinétique chimique de Combustion	64
2.1.2.3	Auto-inflammation du carburant	67
2.1.2.4	Les écoulements swirlés.....	69
2.1.2.5	Les types de flammes.....	72
2.1.2.6	Autres types de moteur à allumage par compression	75
2.2	Formation des polluants dans les MCI	
2.2.1	Particules et gaz d’échappement issus d’un moteur Diesel..	78
2.2.1.1	Composition des gaz d’échappement issus d’un moteur Diesel avant traitement	78
2.2.1.2	composition et formation et structure des particules de suie	80
2.2.1.3	Composition des particules Diesel	84
2.2.1.4	Les normes européennes	86
2.2.1.5	Les oxydes d’azote (NOx)	86
2.2.1.6	La production de CO" Le monoxyde de carbone"..	90
2.2.1.7	Les hydrocarbures imbrûlés	91

CHAPITRE 3. LE CODE DE CALCUL CFD KIVA-3V

3.1	L’outil CFD	
3.1.1	Histoire	92
3.1.2	Pourquoi un tel outil ?	93
3.1.3	Principes physiques de CFD	95
3.2	Le code de calcul	
3.2.1	Description générale du code de simulation KIVA 3v	97
3.2.2	Structure standard de KIVA-3V	99
3.2.3	Les différents types des mailles qui peuvent être	

utilisées dans KIVA	99
3.2.4 Modélisation numérique avec KIVA	100
3.3. Le modèle a trois dimensions	
3.3.1 la base de kiva-3v	101
3.3.1.1 Solution de la phase gazeuse	101
3.3.1.2 Modèle de spray	102
3.3.1.3 Le model de la chimie.....	112
3.3.2 Améliorations antérieures	113
3.3.2.1 Le model de la turbulence	113
3.3.2.2 Transfert thermique	114
3.3.2.3 Loi de paroi	114
3.3.3 le Modèle ‘Allumage.....	115
3.3.4 Le modèle de combustion " Modèle de la Combustion Turbulent contrôlé"	116
3.3.5 Le Modèle de Formation de No _x	118
3.3.6 Modèle de formation des suies	120
3.3.6.1 Formation des suies	121
3.3.6.2 Oxydation des suies	123
3.3.6.3. Le modèle de suie implantée dans kiva-3v	124
3.3.7 Démarches numériques du KIVA-3V	125
3.3.7.1 Discrétisation spatiale par la méthode ALE	125
3.3.7.2 Discrétisation temporelle	127
3.3.7.3 Méthode de la solution numérique	127
3.3.8 Les équations gouvernantes	132
3.3.8.1 Les équations de la phase gazeuse	133
3.3.8.2 Les équations de la phase liquide	136

CHAPITRE 4. RESULTAS ET DISCUSSIONS

4.1 Les modèles utilisés pour la simulation numérique utilisant le code kiva-3v	
4.1.1 Modèles physiques utilisés dans la simulation	137
4.1.1.1 Le Spray	137
4.1.1.2 La chimie	137
4.1.2 La turbulence	138
4.1.3 Loi de paroi	138
4.1.4 L’allumage	138
4.1.5 La combustion	138
4.1.6 La formation des NO _x	139
4.1.7 La formation des suies	139
4.2 Spécification du moteur diesel utilisé pour la simulation	
4.2.1 la forme du piston et le maillage généré	139
4.2.2 Paramètres du moteur	140
4.3 Les réactions chimiques.....	140
4.4 Les réactions de formation des NO _x	140
4.5 Les réactions de formation de CO.....	141
4.6 Les réaction de formation et de oxydation de suie.....	141
4.7 Les résultats obtenue	
4.7.1 Résultats de pression, température, tke, epsilon, chaleur dégagée.....	145

4.7.1.1	courbes.....	145
4.7.1.2	contours.....	148
4.7.2	Résultats des espèces chimiques.....	148
4.7.2.1	courbes.....	149
4.7.2.2	contours.....	151
4.7.3	Résultats de suie.....	153
4.8	Effets de différents paramètres sur les performance du moteur et les Produits de combustion	
4.8.1	Excès d'air " excès d'oxygène"	156
4.8.2	Effets de la géométrie du piston	159
4.8.3	Effets de la richesse	161
4.9	Les Cas valides par le code kiva-3v	
1 ^{er}	CAS	165
2 ^{ème}	CAS	166
3 ^{ème}	CAS " comparaison entre les codes kiva-3v et kiva3v-lite"	169
3.1	Validation du code kiva3v-lite	169
3.2	comparaison avec kiva-3v	173
CHAPITRE 5. AUTRES MODELES DE SUIE ET TECHNOLOGIE DE REDUCTION DES NOX		
5.1	modèles de formation et d'oxydation des suies diesel	
5.1.1	Le modèle de Hiroyasu pour la formation et l'oxydation de suie	174
5.1.1.1	Formulations	174
5.1.1.2	Résultats	175
5.1.2	Le modèle de Lindstedt's (1994) pour la formation et l'oxydation de suie	177
5.1.2.1	Présentation du modèle	177
5.1.2.2	Résultats obtenus	178
5.1.2.3	Paramètres influes sur la formation de carbone Solide	180
5.2	Technologie de réduction de NOx	
5.2.1	la combustion retardée.....	185
5.2.2	Recirculation des gaz éjecté (EGR)	187
5.2.2.1	Principe de l'EGR (Exhaust Gas Recirculation)...	187
5.2.2.2	Circuit d'EGR	188
5.2.2.3	Résultats obtenue	189
CONCLUSION GENERALE		194
ANNEXES		
ANNEXE A :	196
ANNEXE B :	198
ANNEXE C :	200
ANNEXE D :	201
ANNEXE E :	204
REFERENCES BLIOGRAPHIQUES		206

Liste des tableaux

1.1	véhicule automobile annuel aux États-Unis
1.2	Composition des gaz d'échappement des véhicules routiers.....
1.3	La composition de l'air sec
1.4	Effets des principaux polluants sur la santé
1.5	Effets des principaux polluants sur l'environnement
2.1	Classement et description des différentes réactions en chaîne radicalaire
2.2	Composition typique des gaz d'échappement issus d'un moteur diesel.....
2.3	Tableau récapitulatif des normes européennes (Journal officiel de L'UE, 2007)
2.4	Composition des particules de suie diesel (Pourcentage massiques)
2.5	Tableau récapitulatif des normes européennes (Journal officiel de l'union Européenne)
2.6	Oxydes d'azote* et ions d'oxyde d'azote (Shriver et Atkins, 1999).....
3.1	Codes CFD (IEA , 1993).....
3.2	Valeurs des constantes utilisées dans les modèles de turbulence k-ε et RNG k-ε
4.1	Spécifications du moteur diesel
4.2	Les réactions dynamiques utilisées dans le modèle décrit la formation de NOx
4.3	Les réactions d'équilibre utilisé dans le modèle
4.4	les constantes pour NGS
4.5	Paramètres du moteur
4.6	Caractéristiques du moteur Caterpillar 3401
4.7	Spécifications expérimentale du système d'injection
4.8	Les différents cas de simulation (Kimura.2001)
4.9	Paramètres du moteur diesel [93]
5.1	Les taux de réactions

Table des figures

1.1	Progression de l'activité technique totale et des recherches dans le domaine de la Pollution atmosphérique
1.2	Évolution de trois branches de la recherche dans le domaine de la pollution Atmosphérique
1.3	Engraving (1876) of a metal foundry refining department in the industrial sear region Of West Germany.....
1.4	Effets des éruptions volcaniques sur l'atmosphère
1.5	Mt.St. Helens during the eruption of May 1980
1.6	Fumées industrielles.....
1.7	Estimation d'émissions personnels pour une famille de state unis pour 4 personnes...
1.8	Evolution des émissions par le transport routier en France
1.9	Contribution des émissions de différentes substances aux réchauffements Climatique.....
2.1	Injection directe
2.2	La chambre de tourbillon d'air.....
2.3	Moteur à chambre de précombustion.....
2.4	Chambre de turbulence " Ricardo".....
2.5	Système Lanova
2.6	Chambre Saurer
2.7	Moteur diesel injection direct à quatre cylindres en ligne.....
2.8	Moteur 2 temps à compression dans le carter
2.9	Cycle à 4 temps.....
2.10	Concentration des produits de combustion en fonction de la richesse du mélange...
2.11	Entraînement d'air par un jet liquide
2.12	Représentation simplifiée d'un jet de gazole
2.13	Structure schématique d'une flamme plate de prémélange
2.14	Photographie d'une tornade
2.15	Expansion brusque générique utilisée pour les études appliquées sur les Ecoulements swirlés.....
2.16	Structure d'une flamme laminaire de diffusion.....
2.17	Structure d'une flamme plate laminaire de prémélange.....
2.18	Comparaison entre le dégagement de chaleur classique dans un moteur diesel.....
2.19	Gamme de température des gaz d'échappement pour un véhicule diesel de moyenne Gamme 1.9 L TDI.....
2.20	Mécanismes de formation de la suie
2.21	Structure élémentaire d'une particule de suie automobile
2.22	Micrographie de suie diesel.....
2.23	Sous-structure d'une particule de suie
2.24	Microstructure des particules de suie diesel
2.25	Structure d'un agrégat de particules de suie et des composés qui lui sont associés ...
2.26	Distribution typique des particules pour un moteur diesel en masse et en nombre en fonction de leur taille.....
2.27	Sources d'émissions des NO _x
2.28	Différentes chemins de formation des NO _x pendant la combustion
2.29	Equilibre thermodynamique entre NO et NO ₂ d'un gaz contenant 500 ppm de NO ₂ , 5% de O ₂ et 10% d'eau
2.30	Evolution de la production de NO-thermique en fonction de la richesse

2.31	Chemins réactionnels de la formation et de la destruction de NO au cours de la combustion du charbon
2.32	Production de CO et NO _x en fonction de la richesse
3.1	Les trois outils à la disposition de l'industriel ou du chercheur pour l'étude de la dynamique des fluides
3.2	Représentation synthétique des liens entre la Réalité et les résultats de simulation
3.3	Structure standard de KIVA-3V.....
3.4	Les différents types de maille utilisée
3.5	Schéma d'un spray orifice montre différents flux (collision, coalescence, atomisation, évaporation) régimes.....
3.6	Oscillation de la goutte liquide autour de son état d'équilibre
3.7	Etude de stabilité d'une colonne de liquide en vue d'une modélisation de type "Wave"
3.8	Désintégration de la goutte mère pendant le temps de rupture τ_{bu} selon le modèle "Wave"
3.9	Etapas de la formation des suies.....
3.10	Maille ALE à deux dimensions
3.11	Discretisation spatiale dans KIVA.....
3.12	Evolutions parallèles du corps étudié et du maillage associé.....
4.1	Maillage avec valve
4.2	La géométrie du piston au PMH
4.3	Modèle de suie.....
4.4	Évolution de pression et de Température en fonction des degrés vilebrequin.....
4.5	Chronologie de la combustion d'après [85].....
4.6	Variation de l'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation avec le Mouvement du piston.....
4.7	Contours de température
4.8	Contours de pression
4.9	Contours de TKE
4.10	Contours de Epsilon.....
4.11	Évolution de c ₇ h ₁₆ , o, h en fonction des degrés vilebrequin.....
4.12	Évolution de c ₇ h ₁₆ , N ₂ , NO en fonction des degrés vilebrequin.....
4.13	Évolution de c ₇ h ₁₆ , co, co ₂ en fonction des degrés vilebrequin.....
4.14	Évolution de c ₇ h ₁₆ , h ₂ O en fonction des degrés vilebrequin
4.15	Évolution de c ₇ h ₁₆ , oh, h ₂ en fonction des degrés vilebrequin
4.16	Contours de c ₇ h ₁₆
4.17	Contours de o ₂
4.18	Contours de N ₂
4.19	Contours de co ₂
4.20	Contours de h ₂ O
4.21	Contours de h ₂
4.22	Contours de oh
4.23	Contours de co
4.24	Contours de NO
4.25	Le taux de dégagement de la chaleur
4.26	Le nombre de concentration noyau principale
4.27	Le nombre de concentration de noyau particule
4.28	Le nombre de concentration d'espèce fictive

4.29	Le nombre de concentration d'hydrocarbure
4.30	Le taux d'oxydation de suie d'après NGS
4.31	Diamètre des particules de suie
4.32	La masse de suie dans le cylindre
4.33	Comparaison de la masse de suie
4.34	Cinétique de formation de suie selon [82]
4.35	La pression Vs degrés vilebrequin pour différents Excès d'air
4.36	La Température Vs degrés vilebrequin pour différents Excès d'air
4.37	Évolution des NOx et la chaleur dégagée avec différents valeurs de pourcentage de O ₂ [108]
4.38	La masse de NOx Vs degrés vilebrequin pour différents Excès d'air.....
4.39	NOx Vs le temps pour différents pourcentage de O ₂
4.40	Évolution de NOx pour différents concentration de O ₂ % [108].....
4.41	TKE Vs degrés vilebrequin Pour différents excès d'air
4.42	La fraction massique de fuel Vs degrés vilebrequin pour différents Excès d'air
4.43	Géométrie 1 au PMH
4.44	Géométrie 2 au PMH
4.45	Géométrie 3 au PMH
4.46	Géométrie 4 au PMH
4.47	Fraction massique de CO ₂ Pour différentes formes de piston
4.48	Fraction massique de C ₇ H ₁₆ Pour différents formes de piston
4.49	Fraction massique de CO Pour différents formes de piston
4.50	Fraction massique de CO Pour la 4 ^{ème} formes de piston
4.51	Le taux de dissipation Pour différents formes de piston
4.52	Énergie cinétique turbulente Pour différents formes de piston
4.53	La pression vs degrés vilebrequin pour $\phi < 0.5$
4.54	La pression vs degrés vilebrequin pour $\phi > 0.5$
4.55	Evolution de pression pour Différents phi selon [109].....
4.56	La température vs degrés vilebrequin pour $\phi < 0.5$
4.57	La température vs vilebrequin pour $\phi > 0.5$
4.58	NO _x vs degrés vilebrequin pour $\phi < 0.5$
4.59	NO _x degrés vilebrequin pour $\phi > 0.5$
4.60	NO _x en fonction de richesse
4.61	Evolution de la production de NO thermique pour plusieurs richesses [Correa, 1992]
4.62	Fraction massique de CO vs degrés vilebrequin pour différents ϕ
4.63	Variation de pression selon A.Agarwal et al [91]
4.64	Variation de pression en fonction des degrés vilebrequin
4.65	Variation de température selon A.Agarwal et al [91]
4.66	Variation de température en fonction des degrés vilebrequin.....
4.67	Géométrie du piston (Patel et al. 2004)
4.68	La concentration des NOx Pour Différents cas de simulation
4.69	Évolution de pression en Fonction des degrés vilebrequin pour Différents cas De simulation
4.70	Évolution de pression en Fonction des degrés vilebrequin pour Différents cas de Simulation d'après [92]
4.71	Evolution de pression d'après [93] à soi = - 9 ATDC
4.72	Évolution de pression vs degrés vilebrequin à soi = - 9 ATDC
4.73	Évolution de pression D'après [93] à soi = - 2 ATDC
4.74	Évolution de pression vs degrés vilebrequin à soi = - 2 ATDC

4.75	Évolution de pression D'après [93] à soi = + 4 BTDC
4.76	Évolution de pression vs degrés vilebrequin à soi = + 4 BTDC
4.77	Evolution de la chaleur dégagée vs degrés vilebrequin
4.78	Évolution de la chaleur dégagée vs degrés vilebrequin d'après [93]
4.79	Distribution du spray (a) et la champs de température dans la chambre de combustion à 0 ATDC (au PMH) d'après [93]
4.80	Distribution du spray (a) et la champs de température dans la chambre de combustion à 0,49 BTDC
4.81	Distribution du spray (a) et la champs de température dans la chambre de combustion à -15 ATDC d'après [93]
4.82	Distribution du spray (a) et la champs de température dans la chambre de combustion à 10.0 BTDC
4.83	Contours des NOx et de suie dans la chambre de combustion à 0 ATDC (au PMH) d'après [93]
4.84	Contours des NOx et de suie dans la chambre de combustion à +0,49 BTDC
4.85	La pression en fonction des degrés vilebrequin pour les deux codes
4.86	NOx en fonction des degrés vilebrequin pour les deux codes
5.1	La densité du c_7h_{16}
5.2	La masse de suie formée
5.3	La masse de suie oxydée
5.4	La masse de suie nette
5.5	Contour de température
5.6	Contours de c_7h_{16}
5.7	Contour de O_2
5.8	Contours du taux de suie formée
5.9	Contours du taux de suie oxydée
5.10	Contours du taux de suie nette
5.11	Fraction massique de h_2o , co_2 , o_2 vs degrés vilebrequin
5.12	Fraction massique de c_7h_{16} , co , suie vs degrés vilebrequin
5.13	Fraction massique de c_7h_{16} , NO_x , Suie vs degrés vilebrequin
5.14	Contours de température
5.15	Contours de co_2
5.16	Contours de h_2
5.17	Contours de co
5.18	Contours de NO
5.19	Contours de NO_2
5.20	Contours de $C(s)$
5.21	Fraction massique de $C(s)$ vs degrés vilebrequin pour différents fuels
5.22	La masse de $c_{14}h_{30}$, NO_x , suie vs degrés vilebrequin
5.23	La masse de df_2 , NO_x , Suie vs degrés vilebrequin
5.24	La 2 ^{ème} géométrie
5.25	La masse de c_2h_2 pour différents modèles de turbulence
5.26	La masse de suie vs degrés Vilebrequin pour différents modèles de turbulence
5.27	La température vs degrés Vilebrequin pour différents modèle de turbulence
5.28	TKE vs degrés Vilebrequin pour différents modèles de turbulence
5.29	Epsilon vs degrés vilebrequin pour différents modèles de turbulence
5.30	Variation de l'énergie cinétique turbulente en fonction degrés vilebrequin Pour deux Modèles de turbulence [111]
5.31	La masse de suie vs degrés vilebrequin pour différentes Rpm du moteur

5.32	Contours de température
5.33	Contours de $c_{14}h_{30}$
5.34	Contours de suie
5.35	Contours de c_2h_2
5.36	Contours de TKE
5.37	Contours de epsilon
5.38	Contours de température
5.39	Contours de $c_{14}h_{30}$
5.40	Contours de suie
5.41	Contours de c_2h_2
5.42	Contours de TKE
5.43	Contours de epsilon
5.44	Contours de température
5.45	Contours de $c_{14}h_{30}$
5.46	Contours de suie
5.47	Contours de c_2h_2
5.48	La pression pour différents Temps d'injection
5.49	La Température pour différents Temps d'injection.....
5.50	Évolution de pression pour différentes valeurs de soi Selon [107]
5.51	Évolution de pression pour différentes valeurs de soi selon [58]
5.52	La concentration de NOx pour différents temps d'injection
5.53	La concentration de CO pour différents temps d'injection
5.54	Evolution de NOx [110]
5.55	Variation de NOx avec soi [107]
5.56	Système d'EGR.....
5.57	La température moyenne Vs Pourcentage de co_2
5.58	La fraction massique de co_2 vs fraction massique de o_2 pour différents valeurs de co_2
5.59	La fraction massique de co vs fraction massique de o_2 pour différents pourcentages De co_2
5.60	Effet de pourcentage de H_2O sur la température moyenne
5.61	Effet de sH sur la température différentes Températures des gaz frais pour un mélange air/méthane [112].....
5.62	La fraction massique de co vs fraction massique de o_2 pour différents pourcentages De h_2o
5.63	La fraction massique de co_2 vs fraction massique de o_2 pour différents pourcentages De h_2o
5.64	La fraction massique de co_2 vs fraction massique de o_2 pour différents pourcentages D'espèces
5.65	La fraction massique de co vs fraction massique de o_2 pour différents pourcentages D'espèces
5.66	La température vs degrés vilebrequin pour différents pourcentages de co_2
5.67	La température vs degrés vilebrequin pour différents pourcentages de h_2o
5.68	La masse de NOx Vs degrés vilebrequin pour différents pourcentages de co_2
5.69	La masse de NOx Vs degrés vilebrequin pour différents pourcentages de h_2o
5.70	Formation de NO pour Différents pourcentages de H_2O pour 1500 RPM [114]
5.71	La fraction massique de NO Vs degrés vilebrequin pour différents % d'espèces
5.72	La fraction massique de co vs degrés vilebrequin pour différents % d'espèces

NOMENCLATURE

LETTRES LATINES :

a	le rayon de gouttelette
A_{fr}	facteur pré-exponentiel
ALE	la méthode arbitraire lagrangienne eulérienne
a_{m,r} , b_{m,r}	Coefficients stœchiométriques intégrales pour la réaction r
ATDC	Avant le pmh
b	Paramètre d'impact de collision
b_{cr}	Paramètre d'impact critique de collision
B_{rd}	Nombre de transport de Spalding
BTDC	Après le pmh
CA	degrés vilebrequin
Cd	Coefficient de perte de charge
C_nH_m	Hydrocarbure non spécifié
CO	Monoxyde de Carbone
CO₂	dioxyde de carbone
COV	Hydrocarbures et composés organiques volatils
C_p	Chaleur spécifique du fluide
CR	le taux de compression
C(s)	carbone solide
dx	pas de discrétisation spatiale
d_s	Le diamètre de suie
E_A	l'énergie d'activation
g	Gravité
HAP	Les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques
H	Radical hydrogène
IC	L'indice de cétane
IVO	ouverture de la soupape d'admission
IVC	fermeture de la soupape d'admission
K	Kelvin
k	Énergie cinétique turbulente
K_A, K_B, K_T, K_Z	constantes des taux empirique du modèle d'oxydation de NSC
L	Échelle caractéristique de longueur
L₀	Longueur de l'orifice de l'injecteur
M_i	masse molaire d'espèces i
m_f	masse de carburant
m_{air}	masse d'air
NO_x	Oxydes d'Azote
NO₃⁻	Nitrates
N_s	nombre des espèces réactivés
O₃	L'ozone
P	pression
PAN	Peroxy-acyl-nitrates
Pinj	Pression d'injection
PMH	Point Mort Haut
PMB	Point Mort Bas
PM10 et PM2,5	Les particules en suspension

Ppm	partie par million
R	Constante universelle des gaz parfaits
RPM	vitesse de rotation du moteur
S	Le nombre de Swirl
S_{ad}	la soupape d'admission
S_L	La vitesse de flamme laminaire
Soi	début d'injection
SMD	Diamètre moyen de Sauter
SO₄²⁻	Sulfates
T	Température
t	Temps
TAI	température d'auto-inflammation
TDC	le point mort haut
u	Composante du vecteur vitesse dans la direction x
v	Composante du vecteur vitesse dans la direction y
w	Composante du vecteur vitesse dans la direction z
Y	Fraction massique
Y_k	fraction massique d'espèce k

LETTRES GRECQUES :

θ	Angle du spray
μ	viscosité dynamique
ν	viscosité cinématique
ρ	masse volumique
σ_{ij}	contrainte
Δt	Pas de temps de calcul
δ	Distribution de Dirac associée à l'interface
δ_{ij}	Symbole de Kronecker
ε	Taux de dissipation d'énergie cinétique turbulente
Ω	Volume de contrôle
τ	Échelle caractéristique de temps
τ_{ij}	Tenseur des contraintes visqueuses
ω_{premix}	le taux de pré mélange
ω_{diffusi}	le taux de diffusion
Φ_s	Le rapport stoechiométrique
φ	la richesse du mélange
λ	le coefficient d'excès d'air
τ_{ai}	le délai d'auto-inflammation
ρ^s	Le terme source à l'évaporation
ρ_s	La densité de suie
W^s	regroupe les termes sources provenant de l'interaction mélange/spray
C_{ε1-3}, Pr_k, Pr_ε	les constantes usuelles du modèle de la turbulence k-ε

NOMBRES SANS DIMENSION :

Oh	Nombre d'Ohnesorge
Pr	Nombre de Prandtl

Re	Nombre de Reynolds
Ta	Nombre de Taylor
We	Nombre de Weber
We_{crit}	Nombre de Weber critique
Le	nombre de Lewis
S_{cd}	nombre de Schmidt
Sh_d	Le nombre de Sherwood
Nu_d	Le nombre de Nusselt
D_a	nombre de Damkohler

ACRONYMES :

CAI	Controlled Auto-Ignition
CFD	Computational Fluid Dynamic
CIDI	Compression ignition Direct Injection
DI	Direct Injection
DISC	Direct Injection Stratified Charge
EBU	Eddy breakup model
EDC	Eddy dissipation concept model
EGR	Exhaust Gas Recirculation
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition

INTRODUCTION GENERALE

Contexte de l'étude

Pour mieux connaître et maîtriser la pollution de l'air, il est nécessaire de savoir quelles sont les sources de pollution, de les identifier et les quantifier. Cette connaissance permet ensuite de prendre des mesures de réduction des émissions à la source. Les inventaires d'émissions sont également une donnée de base nécessaire pour réaliser des évaluations de qualité de l'air et estimer les impacts de cette pollution sur la santé, les écosystèmes ...

Les secteurs de l'industrie et des transports sont responsables d'une grande partie des émissions polluantes dans l'atmosphère, aussi bien au niveau local que global. En 1992, de nombreux pays se sont engagés, dans le cadre du protocole de Kyoto sur les changements climatiques, à réduire l'ensemble de ces émissions. Ces engagements se sont traduits au niveau européen par la mise en place de nouvelles directives imposant les limites d'émissions autorisées pour de nombreux polluants et le durcissement des normes déjà existantes. La prise de conscience collective des dérèglements climatiques a conduit les pouvoirs publics à mener une politique de réduction des émissions de gaz à effet de serre. La nécessité de réduire les émissions polluantes des véhicules à moteur Diesel conduit les constructeurs automobiles à concevoir des procédés d'élimination des particules carbonées. En effet, l'augmentation continue de ce type d'émissions constitue un problème sanitaire et environnemental préoccupant.

Durant le dernier siècle, l'industrialisation et l'essor des transports ont joué un rôle essentiel dans l'évolution de la société. Ces activités étaient synonymes de progrès, de modernité et d'enrichissement. Mais depuis, la prise de conscience quant aux conséquences environnementales n'a cessé de croître. En effet, de grandes quantités de substances chimiques sont relâchées dans l'environnement, la plupart d'entre elles étant considérées comme dangereuses. L'introduction de ces composés implique des risques sérieux non seulement pour l'environnement et les organismes vivants, mais aussi pour la santé humaine. De nombreuses démarches ont été entreprises conduisant à une diminution des émissions. Cependant, beaucoup de travail reste encore à faire pour répertorier ces émissions et mieux comprendre leur devenir, afin d'évaluer leur impact et proposer des solutions.

Derrière le terme de pollution atmosphérique, se cache une grande variété de polluants. Les sources d'émissions polluantes sont multiples (gaz de combustion industrielle, gaz d'échappement automobile, émissions d'usines,...) et évoluent dans le temps. La surveillance s'effectue sur un nombre limité de paramètres physico-chimiques, car les mesures ne peuvent actuellement s'effectuer sur l'ensemble des substances qui se trouvent émises directement ou indirectement dans l'atmosphère. Il a donc été nécessaire d'effectuer un choix de polluants, indicateurs de la pollution atmosphérique, d'origine industrielle, automobile, photochimique... Les plus classiques sont les suivants : le dioxyde de soufre (SO₂), les oxydes d'azotes (NO et NO₂), l'ozone (O₃) et les poussières en suspension. Les particules de suie émises par la combustion des hydrocarbures ont des origines diverses. Elles sont émises au cours d'incendies de tous types mais également, de manière plus contrôlée, par des moteurs et des brûleurs comme dans les secteurs de l'automobile et de l'aéronautique et dans d'autres secteurs industriels. En effet, de grandes quantités de substances chimiques sont relâchées dans l'environnement, la plupart d'entre elles étant considérées comme dangereuses. L'introduction de ces composés implique des risques sérieux non seulement pour l'environnement et les organismes vivants, mais aussi pour la santé humaine.

Plusieurs technologies ont été développées par plusieurs chercheurs pour améliorer le rendement des moteurs diesel. La combustion retardée et la recirculation des gaz d'échappement, comptent comme des solutions de ce problème. La recirculation de gaz d'échappement est une technique utilisée par les fabricants des moteurs diesel pour réduire principalement la formation d'oxydes d'azote (NO_x) au niveau du processus de combustion. Les grands constructeurs ont adopté la technologie EGR depuis 1993 sur les moteurs à essence et diesels afin de satisfaire aux normes d'émission européennes. Ce principe parfaitement anti-mécanique consiste à refaire circuler dans un moteur diesel des gaz chargés de suies et de NO_x .

Aujourd'hui, Les moteurs diesel se sont imposés comme moyen de production d'énergie dominant dans le marché mondial [Benson et Whitehouse (1979), Heywood (1988)]. Spécialement dans le domaine de transport, les moteurs diesel sont considérés comme un des principales sources de propulsion. Cela est dû aux améliorations substantielles de ces moteurs, l'essentiel est l'amélioration du rendement et la réduction des émissions polluantes (principalement oxyde de nitrique et les particules de suie). Des avantages remarquables vers le développement des moteurs diesel plus propres a été accompli, ces dernières années, en suivant plusieurs techniques, tel que par exemple l'utilisation du système « common-rail », comme moyen de contrôle de l'injection du combustible, la recirculation des gaz éjectés, la recirculation des gaz éjectés après traitement, etc [Ferguson (1986), Heywood (1988), Stone (1992)].

Le trafic automobile est devenu un facteur prépondérant dans la qualité de l'air que nous respirons. La volonté du législateur en matière de respect de l'environnement s'est ainsi fortement accrue lors des quinze dernières années, notamment avec l'introduction en Europe des normes EURO (figure 1).

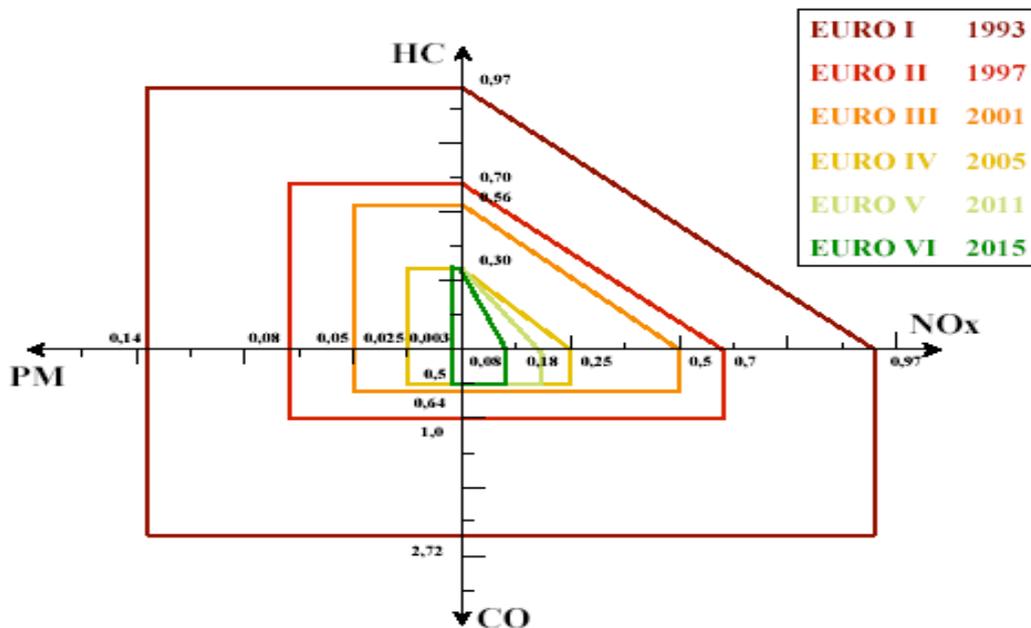


Fig. 1 : Diagramme d'évolution temporelle des normes européennes sur les émissions polluantes des moteurs diesel – HC pour hydrocarbures imbrûlés, NO_x pour oxydes d'azote, CO pour monoxydes de carbone et PM pour particules fines.

Etat de l'art

L'étude de la pollution du trafic routières a déjà fait l'objet de nombreux travaux qui ont permis d'acquérir de précieuses informations sur les origines et le transfert des différents polluants (Legret et al., 1996 ; Legret et Colandini, 1999 ; Legret et Pagotto, 1999 ; Pagotto, 1999).

R. D. Reitz et C. J. Rutland, 1995, ont effectué une investigation expérimentale et une étude numérique sur les moteurs diesel. Une revue détaillée sur le développement des modèles implémentés dans le code KIVA-3 est présenté (les modèles de la combustion, le jet, la turbulence, la formation des NO_x, des suies et l'allumage sont présentés).

Plusieurs chercheurs ont intéressés par le contrôle et la formation des polluants dans les moteurs, parmi les on peut cité ; *W. L.Cheng et al.* 2005, *C.A.Chryssakis, D.N.Assanis.*2005, *T.J.Jacobs et al.*2005, *Haiyong Peng et al.* 2006, *Cenk Sayin et al.*2007, *Ravindra Aglave et al.*2007, *W. Yuan.*2005, *MM. Thomas et Leblanc.*1999, *Antonio pires da cruz,* 1997, *W.P.J. Visser et al.*1998, *Killian Mmiet.*2008, *Chung-Gong Kim et al.* 2004, *Benoît Jeanne.* 2004, *Guillaume Martins.*2006, *Sandra Payet.*2007, *Olivier grondin.* 2004, *Miguel-angel GOMEZ-GARCIA.*2004, *Céline BARANGER.*2004, *Yanbin Mo.*2008

La formation de suie est aussi un objet figurant dans plusieurs recherches, *Faeth et al.* 1998. ont effectué une étude sur l'évolution du diamètre des particules, ils ont trouvé que le diamètre varie entre 1 μ m et 10 μ m pour les premières particules. Les particules de différents diamètres peuvent exister en même temps à l'intérieur de la chambre de combustion et différentes approches ont été implantées pour comprendre les étapes de formation de ces particules.

Un article sur la formation du carbone solide, a été publié en 1957 par Ferguson. Après, Homman and Wagner ont développés ce modèle et interprété le mécanisme de formation de suie dans les flammes de pré-mélange.

Plusieurs études pour développer le modèle de formation de suie ont été réalisées : *Nishiwaki et al.* 1967, *Chakraborty et Long.*1968, *Wersborg et al.*1973, *Magnussen.*1975, *Magnussen et Hjertager.*1977. *Tesner et al.* 1971 ont développé un modèle de suie pour les flammes turbulentes. *Magnussen et al.*1979 ont développé un modèle de nucléation de suie, *D'Alessio et al.* 1975, *Frenklach et Harris.*1986, *Wagner.*1979, *Haynes et Wagner.*1981, *Levy [1982], Calcote.* 1981 ont amélioré le modèle de Tesner par l'utilisation du mécanisme EDC pour flamme d'acétylène turbulente. *Glassman.*1988, *Bockhorn.*1994, *Kennedy.*1997, *Menon et Wu.* 1998 ont développé un modèle pour la nucléation des suies.

Structure du manuscrit

Cette étude est divisée en cinq chapitres. Les deux premiers chapitres concernent une étude bibliographique portant sur la pollution atmosphérique, origine et effets des principaux polluants et les principales technologies des moteurs à combustion interne. Le troisième chapitre concerne une description détaillée du code kiva-3v utilisé pour la simulation numérique après sa validation. Les deux derniers chapitres abordent la modélisation d'un moteur diesel et les solutions pour réduire la formation des NO_x et des suies.

Chapitre 1 : *les principes de la pollution d'air*

Le premier chapitre est essentiellement consacré à la définition de la pollution atmosphérique, les sources de la pollution, présentation des principaux polluants et aussi leurs effets sur la santé et l'environnement.

Chapitre 2 : *technologies des moteurs à combustion interne*

Le second chapitre s'adresse en particulier aux lecteurs peu familiers du fonctionnement des moteurs à combustion interne (essentiellement le moteur à allumage par compression) et des processus physique impliqué. Ce chapitre décrit la constitution du moteur, les indicateurs de performance ainsi que la phénoménologie de la combustion. Toutes les notions abordées seront évidemment utiles dans les chapitres suivants.

Chapitre 3 : *Le code de calcul CFD kiva-3v*

Ce chapitre récapitule les connaissances sur le code de calcul numérique kiva-3v, et donne son historique et son domaine d'utilisation. Aussi, on a présenté les modèles physiques implantés dans le code depuis l'injection du combustible jusqu'à la formation des différents polluants : les modèles de spray, de combustion, de turbulence, de transfert de chaleur, de chimie, de formation de NOx et suie...etc. A la fin de ce chapitre on trouve les résultats de la validation numérique et expérimentale du code kiva-3v à l'aide de quelques cas.

Chapitre 4 : *Résultats de simulation sur un moteur diesel*

Ce chapitre offre une description détaillée sur le moteur diesel utilisé dans la simulation, c'est un moteur diesel à deux temps, et injection directe, avec un piston de forme mexicaine. La simulation numérique a pour but de modéliser la combustion turbulente et la formation de NOx par le mécanisme de Zeldovich élargi, et l'utilisation du modèle de Surovikin pour la formation de suie et le modèle de Nagle et Strikland pour l'oxydation de suie. La dissociation et la formation du CO par des réactions d'équilibre sont aussi prises en considération. Durant cette étude on a investigué l'influence de quelques paramètres sur les performances du moteur par exemple : l'excès d'oxygène, la richesse....etc.

Chapitre 5 : *Autres modèles des suies et technologies pour réduire les NOx*

Dans ce chapitre, on a exploré la modélisation de formation des suies avec d'autres modèles : le modèle de Hiroyasu et le modèle de Lindstedt's. Le premier modèle utilise essentiellement la masse évaporée du combustible et les taux de formation et d'oxydation sont donnés par la formule d'Arrhenius. Pour le deuxième modèle, c'est un modèle chimique. Dans ce modèle l'acétylène est assumé comme une espèce pyrolytique cruciale pour les processus de la nucléation et de croissance de la surface des suies. Dans ce modèle la quantité du combustible vaporisé se transforme en acétylène par réaction. A la fin de ce chapitre, on présente et interprète les résultats obtenus lors de la simulation des technologies de réduction des NOx et suie, e.g. via la recirculation des gaz d'échappement, etc...

Chapitre 1

Les principes de la Pollution de l'Air

Introduction générale

La **pollution de l'air** (ou **pollution atmosphérique**) est un type de pollution défini par une altération de la pureté de l'air, par une ou plusieurs substances ou particules présentes à des concentrations différentes et durant des temps suffisants pour créer un effet toxique ou écotoxique. On compte aujourd'hui des dizaines de milliers de molécules différentes, polluants avérés ou suspectés qui agissent en synergie entre eux et avec d'autres paramètres (UV solaire, ozone, hygrométrie, acides, etc.). Les effets de ces synergies sont encore mal connus. Les seuils de pollution sont mis en évidence par des indicateurs comme l'ozone qui n'est pas classé comme polluant mais comme gaz irritant, puisque étant un élément majeur de la dépollution de l'air. Cette pollution atmosphérique ou intérieure est un enjeu de santé public, au niveau mondial comme individuel [1].

Cette pollution peut être :

- brève ou chronique,
- visible (fumée) ou invisible (pesticides dans l'air)
- émise massivement ou en faible dose
- émise en quantité dispersée (exemple : pollution émise par les centaine de millions de pots d'échappement)
- locale et émise par une source fixe (ex : cheminée, usine...), ou émise par des sources mobiles (voitures, épandeurs de pesticides, transport maritime ou aérien [2], etc.), l'ensemble de ces sources contribuant à une pollution globale intérieure ou extérieure (ex : Augmentation de l'effet de serre due au CO₂ ou Composés organiques volatils dans l'espace domestique) ;

Depuis le 19^{ème} siècle, certaines zones urbaines industrialisées en Europe et dans le monde ont connu de graves problèmes de pollution atmosphérique (Quénel 1997). Les émissions en cause dans la plupart des villes étaient principalement celles de soufre et les fumées noires, dues à l'utilisation du charbon dans les maisons et les industries. Un des épisodes les plus marquants, le grand smog de Londres, survenu au mois de décembre 1952, dura cinq jours et aurait suscité 3500 à 4000 décès (HMSO 1954). C'est à cette période que l'on a commencé à mesurer sérieusement la pollution atmosphérique (Dab & Roussel 2001). Depuis, l'étude de la pollution atmosphérique s'est largement diversifiée pour une meilleure connaissance du phénomène de pollution et une lutte plus efficace : il s'agit d'un problème multidisciplinaire qui mobilise autant les spécialistes épidémiologiques, les spécialistes en modélisation des

transports, en émission et transformation des polluants, que les autorités locales et les industriels. La pollution atmosphérique est aujourd'hui sensiblement réduite par rapport aux situations qui prévalaient il y a quelques décennies, en liaison notamment avec le développement de l'énergie nucléaire, de l'utilisation de combustibles moins chargés en soufre, des systèmes de dépollution des voitures et des cheminées d'évacuation des fumées ainsi que de la délocalisation industrielle dans les zones péri-urbaines.

Les préoccupations sur l'évolution des pollutions portent moins aujourd'hui sur l'industrie que sur le secteur des transports. Du fait de la concentration des populations et des activités en ville, à cause du flux croissant des échanges et de l'accroissement constant du parc et de la circulation automobile, la pollution atmosphérique constitue toujours une préoccupation particulièrement sensible (IPTS 2000). La perception par nos sens (la vue, l'odorat) de la qualité de l'air, la facilité d'accès à l'information, et les éléments intellectuels issus des informations reçues par le biais des médias rendent le public beaucoup plus conscient aujourd'hui qu'hier des enjeux de la pollution (van Staëvel 2000). Ainsi malgré une relative baisse des émissions de polluants, le public considère que la pollution atmosphérique n'a jamais été aussi mauvaise et problématique (Joumard 2003). Les grandes agglomérations craignent d'être asphyxiées par l'automobile (Bourboulon 1997) [3].

La pollution atmosphérique est un phénomène très complexe compte tenu de la diversité des polluants susceptibles d'être présents dans l'atmosphère. Les niveaux de pollution au sol dépendent de la nature et des conditions de rejets polluants ainsi que des conditions atmosphériques qui déterminent le transport, la diffusion et les retombées de ces mêmes polluants. Ces phénomènes ont lieu dans la troposphère (la plus basse couche de l'atmosphère).

Des quantités croissantes de gaz et de particules potentiellement nuisibles sont émises dans l'atmosphère et entraînent des dommages à la santé humaine et à l'environnement. Elles endommagent également, à long terme, les ressources nécessaires au développement durable de la planète.

Pour chacun des polluants, les niveaux atteints sont comparés aux références disponibles. Celles-ci peuvent être des valeurs limites qui doivent obligatoirement être respectées, et dont le dépassement implique l'élaboration de plans de réduction visant à diminuer la pollution. Il existe également des valeurs cibles, aussi appelées valeurs guides, qui sont indicatives, ainsi que des seuils d'alerte, seuils d'information, seuils de protection de la santé et seuils de protection de la végétation.

Le danger relatif, présenté par les différents polluants gazeux et particulaires pour la santé, varie avec la concentration de ces polluants dans le temps et dans l'espace, et ainsi les effets sur la santé de ces polluants peuvent varier d'un pays à l'autre. En conséquence, la surveillance continue, soignée et attentive des concentrations est nécessaire avant qu'une estimation inacceptable des effets soit faite. La situation est encore plus compliquée car certaines combinaisons de polluants ont des effets cumulatifs et parfois synergétiques.

C'est dans le même contexte qu'est conçu l'essentiel de notre chapitre.

1.1 L'HISTOIRE DE LA POLLUTION D'AIR

1.1.1 Introduction

L'homme a besoin pour vivre de respirer de l'oxygène dilué de gaz inertes. Il trouve dans l'atmosphère un mélange convenable d'oxygène et d'azote, mais suivant l'endroit de la surface du sol où il vit. Il respire en outre, inévitablement, divers gaz, vapeurs et aérosols, de composition et de concentrations variables, dont les uns sont physiologiquement inertes et dont les autres provoquent des réactions allant de la gêne légère à l'intoxication Grave.

Il est bien évident qu'aucune atmosphère réellement non polluée n'a jamais existé puisque la décomposition des matières végétales et des débris animaux, les incendies de forêts, etc. émettent des gaz et des particules solides depuis les origines du monde. Cependant, la **pollution atmosphérique** est devenue un problème d'intérêt général avec l'avènement de la technologie. Le premier progrès technique de l'homme a été l'utilisation du feu qui produit du gaz carbonique, de la fumée et des cendres; aussi, dès les premiers temps de la civilisation, l'atmosphère de toutes les agglomérations humaines a-t-elle dû être fortement polluée. Néanmoins, les habitants des villes ne semblent pas L'avènement du charbon comme moyen de chauffage marque le début du mécontentement populaire, noté par les historiens, et l'on peut fixer au début du 7^{ème} siècle la date à laquelle la **pollution atmosphérique** est devenue un problème social. Mais l'historique scientifique et technique de la **pollution** de l'air ne peut guère remonter au-delà de 1850, car auparavant, s'il était fortement question du désagrément causé par la fumée, les connaissances étaient réduites et la lutte contre les polluants ne faisait aucun progrès [4].

En parcourant les cent années qui ont suivi les premières tentatives de l'homme pour comprendre la nature de la **pollution atmosphérique**, on découvre l'intervention de deux processus. D'une part, le développement des techniques a fait apparaître de nouvelles formes de **pollution** dans l'atmosphère, d'autre part, les populations urbaines sont devenues plus intolérantes aux types de pollutions de l'air qu'elles doivent respirer. En même temps qu'augmentait cette aversion pour les polluants, l'intérêt que suscitait l'action de ces substances sur l'homme s'étendait à leurs effets sur la végétation et les animaux, sur les constructions, l'habillement, les œuvres d'art, etc. Bien que ces dernières considérations ne touchent pas immédiatement à la santé publique, l'étude de la **pollution atmosphérique** se doit de ne pas les omettre, car elles influent indirectement sur la santé morale de l'homme, sinon sur sa santé physique.

Il apparaît donc que la **pollution atmosphérique** résulte de la présence dans l'air, en association avec l'oxygène et l'azote, de substances à l'état gazeux ou particulaire, qui sont *a)* toxiques, *b)* irritantes et *c)* gênantes pour l'homme, soit directement, soit par suite de leurs effets nocifs sur les animaux, la végétation ou les biens.

Estimant que des graphiques montrant le développement des activités dans le domaine de la **pollution** de l'air pourraient faciliter l'examen de notre sujet, selon la bibliographie du Bureau des Mines, bien que ce volume renseigne très imparfaitement sur les travaux effectués en Allemagne et en France, et qu'il omette de mentionner bon nombre d'articles publiés en Angleterre. De plus, cette bibliographie cite certaines publications à plusieurs reprises, chaque fois qu'elles traitent d'un sujet inclus dans la classification adoptée par les compilateurs. Cependant il a semblé qu'elle offrait un ensemble de données suffisant pour construire des graphiques susceptibles de donner une image révélatrice de l'historique de la **pollution** de l'air.

Le premier graphique (fig 1.1) représente l'évolution de l'activité mondiale totale sous forme d'un histogramme par moyennes quinquennales [4].

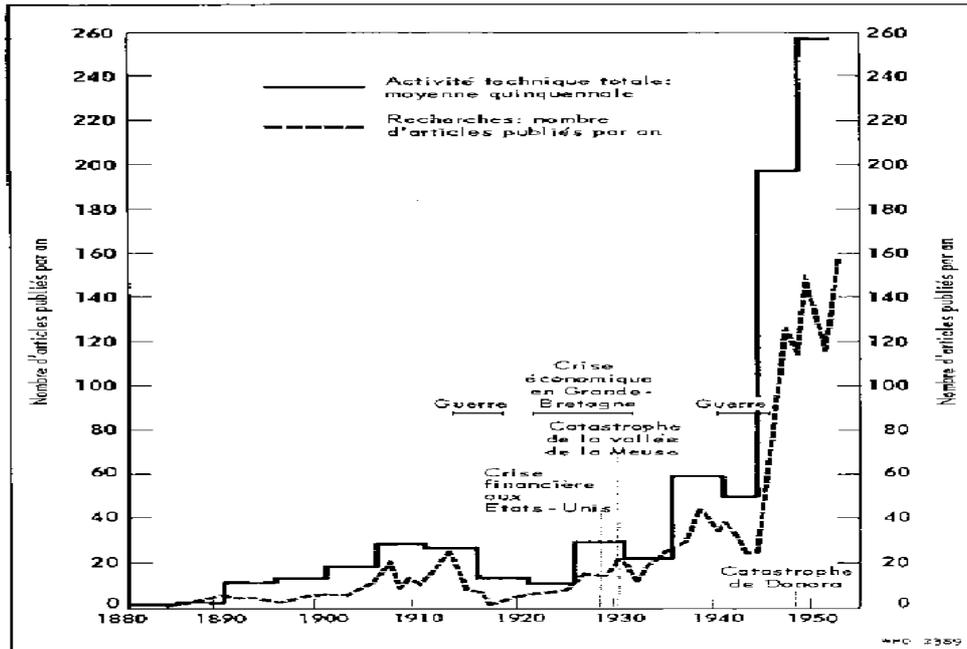
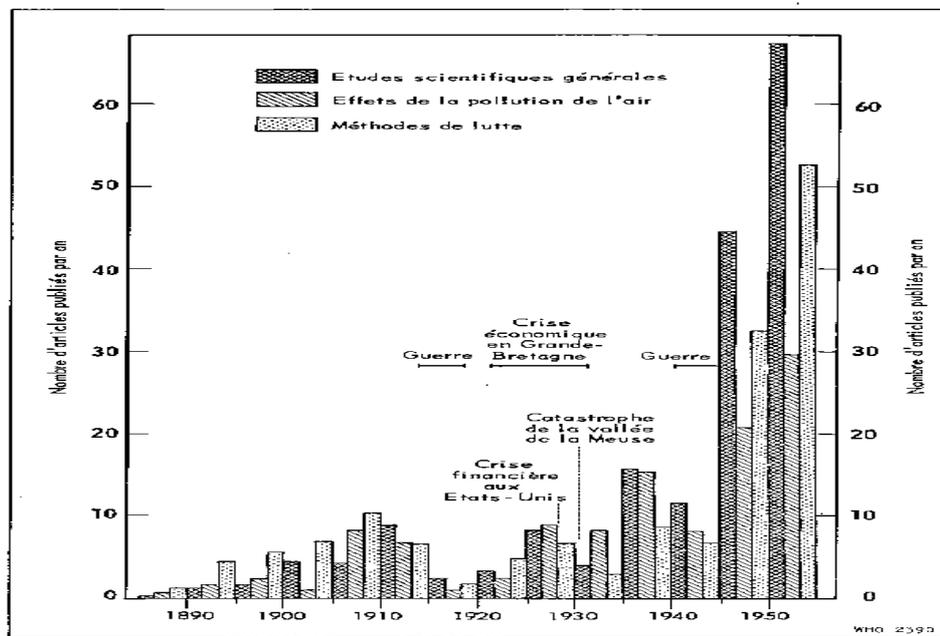


Figure 1.1 : progression de l'activité technique totale et des recherches dans le domaine de la pollution atmosphérique

La courbe en surimpression (trait discontinu) indique le nombre de travaux de recherches effectivement publiés chaque année à la période correspondante. Le deuxième graphique (fig 1.2) [4] montre le développement de l'activité mondiale sous trois rubriques : nature et origine de la pollution, effets (pathogènes ou autres) de la pollution de l'air, méthodes de lutte.



Les trois histogrammes indiquent des moyennes quinquennales. Bien que chaque rectangle n'occupe en abscisses qu'un intervalle d'environ un an, il représente en réalité toute la période quinquennale où il figure.

Figure 1.2 : évolution de trois branches de la recherche dans le domaine de la pollution atmosphérique

Ces graphiques révèlent que: *a)* depuis plus de soixante ans, l'activité scientifique et technique relative à la pollution de l'air s'est développée de façon continue; *b)* surtout médicale et technique avant 1900, cette activité de recherche fait actuellement de plus en plus appel à la physique et à la chimie, dont le rôle est devenu prépondérant; *c)* l'effort de recherche sur la pollution de l'air a davantage souffert des guerres et des crises économiques que les autres formes d'investigation scientifique. Ceci tend à prouver que la recherche sur la pollution de l'air avait un caractère marginal, qu'elle était en quelque sorte un « à-côté » des intérêts publics courants, et n'était pas encore mise au même rang que d'autres branches de l'hygiène publique (telles que celles qui s'occupent de la pollution des aliments et de la lutte contre les épidémies): et *d)* l'activité des études sur la pollution de l'air a augmenté ces dix dernières années à un rythme beaucoup plus rapide que pendant les cinquante années précédentes. Le profil des courbes indique que, vers 1945, a dû intervenir au minimum un facteur nouveau et important. Il n'est pas possible de prolonger les graphiques au-delà de 1952, car la liste des travaux publiés en 1953-1955 est incomplète. Le fichier qu'établit la Librairie de Congrès des Etats-Unis étant loin d'être complet, les renseignements dont nous disposons ne peuvent pas indiquer l'état actuel de la situation.

1.1.2 Evolution de la pollution atmosphérique

Les problèmes liés à la pollution atmosphérique sont devenus préoccupants quand, lors de la révolution industrielle, on est passé d'un système de production essentiellement artisanal à un système de production industriel et de masse. Le développement économique s'est accompagné d'un besoin accru en matière énergétique et, seuls les combustibles fossiles pouvaient y répondre, et plus particulièrement le charbon. L'utilisation de ces combustibles a ainsi engendré un accroissement des quantités de polluants dans l'air.

Les sources énergétiques ont également évolué et le charbon a perdu la place qu'il occupait au profit d'autres combustibles comme les produits pétroliers. Suite aux chocs pétroliers des années 70, l'énergie n'est plus apparue comme gratuite et inépuisable. Le besoin s'est alors fait sentir pour diversifier les sources d'approvisionnement énergétique et surtout pour réduire la facture énergétique par une utilisation plus rationnelle. La diminution de la part du charbon et les économies d'énergie constituent d'autres facteurs positifs dans la réduction de certaines pollutions [5].

L'économie des régions s'est également transformée pour passer d'une économie essentiellement basée sur l'industrie lourde, à d'autres secteurs à plus haute valeur ajoutée et dont l'impact sur la pollution atmosphérique est différent. La part de polluants attribuables aux secteurs industriels est généralement à la baisse. Ainsi, la pollution engendrée par le dioxyde de soufre est beaucoup moins préoccupante qu'il y a trente ans. Malheureusement, d'autres problèmes sont apparus, essentiellement liés à l'augmentation du besoin de mobilité et l'augmentation conséquente du trafic automobile. Les sources dominantes, ainsi que les polluants critiques, ont donc changé. Le plus connu de ces "nouveaux" polluants est, sans conteste, l'ozone. La lutte contre ces polluants constitue un nouveau défi, certainement plus complexe que la lutte contre les pollutions industrielles car, ici, c'est tout notre mode de vie qui est peut être à remettre en cause.

1.1.3 Les différents polluants et leur importance historique

La fumée est le premier polluant qui ait attiré l'attention publique, et son historique remonte au 9^{ème} siècle. La cause immédiate d'une production de fumée assez abondante pour être préjudiciable a été, en Europe, l'épuisement des réserves de bois de chauffage et leur remplacement par le charbon. L'accroissement démographique et les progrès de l'industrie ont

provoqué une telle augmentation des besoins en combustible que les régions forestières ont été rapidement dégarnies. Les très nombreux articles écrits sur ce sujet (Davenport & Morgis, 1954) signalent les conditions régnant à Londres dès 1300, époque à laquelle un édit royal vint interdire l'emploi du charbon dans cette ville; depuis lors, et avant les mesures prises assez récemment, les collectivités n'ont pas cessé de souffrir de la fumée et de la suie.

Le gaz sulfureux est le deuxième polluant à présenter des inconvénients pour la population, car il est produit par la combustion du charbon en même temps que la fumée. Toutefois, pendant près de trois cents ans, son rôle en tant que polluant atmosphérique n'a pas été reconnu, faute de connaissances chimiques. On savait seulement que la fumée avait une odeur déplaisante et irritait la gorge et les muqueuses nasales. Dès 1600, cependant, il était bien connu que le soufre contenu dans le charbon était responsable de ces désagréments; aussi s'efforçait-on de mettre au point des méthodes de cokéfaction pour débarrasser la houille d'une partie de son soufre et de ses Composants volatils [4].

Quant au rôle de l'acide chlorhydrique comme polluant atmosphérique, il n'est apparu qu'après 1800, lorsque l'industrie chimique s'est développée. La préparation du carbonate de soude à partir du sel commun dégageait en effet d'importantes quantités de cet acide, causant des dégâts étendus aux biens et à la végétation.

L'industrie chimique a été également responsable de l'apparition de polluants tels que l'hydrogène sulfuré provenant de la distillation des goudrons, le peroxyde d'azote issu de la préparation de l'acide sulfurique par la méthode des chambres de plomb, l'acide fluorhydrique résultant de la fabrication des superphosphates (et plus tard de la préparation de l'aluminium) ; de son côté, l'industrie métallurgique répandait les vapeurs toxiques ou pestilentielles d'éléments comme le plomb, l'arsenic, le zinc et le cuivre.

Un fait à retenir se dégage de toutes ces considérations: la pollution atmosphérique urbaine fait suite à la pollution de l'air dans les usines, de sorte que la lutte scientifique contre les polluants atmosphériques est une branche annexe de l'hygiène industrielle.

1.1.4 Historique de la fumée et du gaz sulfureux

Jusqu'en 1940 environ, l'expression « pollution de l'air » désignait pour la plupart des gens la fumée et le gaz sulfureux. L'examen des bibliographies générales sur la pollution atmosphérique (Davenport & Morgis 1954; Grande-Bretagne, Department of Scientific and Industrial Research, 1956; Schwartz et al., 1955) révèle que presque toutes les publications scientifiques et techniques rédigées avant cette date traitent de la fumée, de son mode de production, de ses effets, des méthodes à utiliser pour déterminer le débit des cheminées d'usine, et des moyens techniques à adopter pour diminuer l'émission de fumée par les foyers industriels et réduire la teneur de l'air en gaz sulfureux au voisinage des raffineries et des fonderies [4]. Le problème de la fumée et du gaz sulfureux l'emportait alors, et de très loin, sur celui des diverses autres formes de pollution.

La bibliographie mentionne la publication de trente articles sur la nature, la composition et les effets de la pollution de l'air dans la période 1860-1890. Tous traitent des effets de la combustion; ils passent tous sous silence les moyens techniques utilisables pour déterminer la nature et l'intensité de cette pollution. En contrepartie, près de quatre-vingts articles répertoriés sont consacrés à la suppression de la pollution de l'air grâce à de nouvelles méthodes de chauffe et à l'emploi de combustibles sans fumée. Tout ceci montre à quel point le problème était abordé avec un esprit et des méthodes peu scientifiques.

Pour les dix années suivantes, la bibliographie mentionne trente-trois articles sur la composition et les effets de la pollution et quatre-vingt-huit sur les méthodes de lutte ; rien ne figure encore sur les moyens techniques qui permettraient de déterminer la concentration des polluants. Presque toute cette littérature traite de la fumée et du gaz sulfureux, la production

d'autres polluants, acide chlorhydrique et hydrogène sulfuré par exemple, aient déjà considérablement augmenté à la suite du développement de l'industrie chimique. Cependant, comme la fumée était un fléau touchant sensiblement toutes les populations urbaines des Etats-Unis d'Amérique, de Grande-Bretagne et d'autres pays d'Europe, ce problème retenait presque à lui seul l'intérêt des techniciens. Dès 1880, un article du *Journal of the Royal Society of Arts* (Carpenter, 1880) soulignait que la combustion du charbon à basse température dans les foyers domestiques et semi industriels était la cause principale de fumée. En 1897, le *Journal of the Franklin Institute*, analysant avec concision le mécanisme de la combustion du charbon, indiquait qu'à basse température, celle-ci produisait de la fumée en abondance. En 1899, à Londres, (Beilby, 1899) faisait des observations sur les mêmes facteurs: il incriminait la surcharge en combustible, et la combustion à basse température. Discutant de la nécessité des chargeurs mécaniques et des combustibles sans fumée, il montrait que la fumée provenait d'un usage abusif d'appareils de combustion. Ainsi, au début du siècle, presque toutes les connaissances actuelles sur les causes de la fumée et son élimination avaient été énoncées, mais presque rien n'avait été fait pour réduire l'atmosphère enfumée des villes.

Cette analyse de la situation reste valable aujourd'hui. La réduction des fumées dans l'atmosphère dépend de la limitation de leur production. Or, agir sur un très grand nombre de sources est très insuffisant quand les possesseurs des dites sources ne voient pas clairement la nécessité d'une action dirigée contre elles particulièrement, même s'ils sont au total parfaitement convaincus des conséquences fâcheuses d'une atmosphère enfumée.

Pendant la période 1890-1914, un certain nombre d'études ont été faites sur le problème que posait la fumée dans différentes villes. Il était évident que la seule façon d'agir à la source était de fournir un combustible ne pouvant pratiquement pas émettre de fumée.

1.1.5 Historique de l'analyse scientifique de la pollution de l'air

1.1.5.1 avant la révolution industrielle

Les histoires de temps très passés sur les tribus, signifient que il a beaucoup d'odeurs puanteur d'animaux, et des déchets végétaux, ce qu'ils obligent de se déplacer périodiquement loin de ces puanteurs. Quand les membres d'une tribu ont appris à utiliser le feu, ils l'ont utilisé pour des millénaires dans une voie qui a rempli l'air à l'intérieur de leur logement avec les produits de combustion incomplète. On peut toujours voir des exemples aujourd'hui dans certaines des parties plus primitives du monde. Après son invention, la cheminée a enlevé les produits de combustion et les odeurs de cuisants, mais pendant des siècles le feu ouvert dans la cheminée a causé que son émission a été fumeuse [6].

la pollution d'air, associée du bois brûlant à Nottingham, a été considérée "insupportable" par *Eleanor of Aquitaine* la femme du Roi Henry II d'Angleterre, et l'a causée de faire une importance problème et de faire posées des questions au année 1157. 116 années plus tard, c'est interdire de brûler le charbon à Londres; et en 1306, Edward I publier une proclamation royale sur l'utilisation du charbon de mer Dans les chaudières. Par 1661, la pollution de Londres était devenue assez mauvaise.

Les principales industries ont été associées avec la production de pollution de l'air Dans les siècles qui précèdent la révolution Industrielle était : la métallurgie, céramiques, Et la conservation des produits animaux. Dans les périodes d'utilisation du bronze et du fer, les villages ont été exposés aux poussières et vapeurs des plusieurs sources. Le cuivre et l'or ont été forgés. Ces industries et leurs dérivés comme ils existent avant 1556, ont décrit le mieux dans le livre "De Re Metallica" par Georg Bauer, connu aussi par Georgius Agricola [6].

La production de déchets est inhérente aux activités humaines. Dans les temps préhistoriques, la taille des communautés et leur nomadisme faible limite les problèmes liés aux déchets qui sont souvent entassés et abandonnés, pour le plus grand profit des archéologues et des historiens. La première évolution apparaît avec la sédentarisation et l'édification des premières cités. Si dans les campagnes les déchets sont utilisés comme matières fertilisantes, servent à l'alimentation animale ou sont brûlés, le développement des cités interrompt ce recyclage. Le déchet naît sur la scène de l'agglomération urbaine.

Depuis des siècles, les êtres humains ont assez bien appris à s'adapter aux incidences du temps et du climat en harmonisant leur habitat, leur production alimentaire et énergétique et leur style de vie avec les conditions climatiques et environnementales. La prise en compte de la pollution atmosphérique comme une réduction de la qualité de l'air pouvant potentiellement induire un risque pour la santé de l'homme date de bien avant la révolution industrielle. Par exemple, des momies trouvées en Egypte ancienne, ont montré des traces d'anthracosis, probablement dues à une longue exposition à la fumée. Plus tard à Rome, des procès civils ont eu lieu parce que la ville était infestée par des milliers de feu de cheminées déposant de la suie sur les façades des bâtiments.

1.1.5.2 la révolution industrielle

Le problème de la pollution de l'air prédominant du 19^e siècle était la Fumée et les cendres du charbon brûlé ou huile dans les chaudières des Centrales électriques stationnaires, les locomotives. La Grande-Bretagne prend le rôle principal adresser ce problème, et, selon les mots de Sir Hugh Beaver (7):

Par 1819, il y avait des activités suffisante pour Parlement, pour nommer le premier comité pour considérer à quel estimations les personnes qui utilisent des moteurs à vapeur et les chaudières pourraient travailler dans un milieu moins préjudiciable à la santé publique ." Ce comité a confirmé la prévention de la fumée, comme c'est le but de plusieurs comités suivants, mais comme était être une expérience, encore, rien n'a été fait.

En 1843, il y avait un autre Comité Choisi, et en 1845, il y a un troisième. Dans cette même année, un acte de Parlement se débarrassé une fois pour toutes des problèmes des locomotives. L'Acte des Modalités de l'Amélioration de la Ville.

Deux années plus tard, il ont à appliqué la même solution aux chaudières d'usine. Après, en 1853 et 1856 ont témoigné deux actes de Parlement négocié spécifiquement avec Londres et autoriser de mettre en vigueur de vivres contre la fumée des chaudières.

La Fumée et diminution des cendres en Grande-Bretagne ont été considérées comme un problème intéressant de la santé et a été confirmé ainsi par le premier Acte de la Santé Public de 1848 et des années plus tard de 1866 et 1875. La pollution d'air dus à l'industrie chimique a été considérée et interprété d'une manière séparée et a été faite et créée par l'Acte Alcalin de 1863.

Aux États-Unis, la diminution de la fumée (comme contrôle de la pollution de l'air était alors Connue) a été considéré une responsabilité de la ville. Il n'y avait aucun acte fédéral Ou lois de la diminution de la fumée. Les premiers règlements municipaux limitent l'émission de fumée noire et cendres ont paru dans les années 1880 et a été dirigé vers l'industrie, locomotive, plutôt les sources domestiques. A la fin du 12^e siècle, la pollution de l'air dans le monde avait augmenté à un sommet (Fig 1.3) [6].



Figure 1.3: Engraving (1876) of a metal foundry refining department in the industrial saar region of west germany. Source: the Bettmann Archive, Inc.

Depuis la Révolution industrielle, les atteintes à l'environnement de l'homme n'ont cessé d'augmenter, au point de sembler parfois compromettre le devenir des générations futures. L'homme a détruit de nombreuses espèces, provoqué des modifications de climat et dramatiquement menacé sa propre santé. Bien que des recherches soient entreprises pour trouver des solutions écologiques, celles-ci, entravées par de multiples contraintes politiques et économiques, ne permettent guère de faire respecter les lois [8].

Un Nombre de polluants atmosphériques engendrés par la révolution industrielle sont aussi à l'origine d'autres changements climatiques dont nous ressentons actuellement les effets et qui débordent du cadre de la variabilité naturelle imputable aux seuls facteurs d'ordre astronomique et géophysique.

Entre le 13^{ème} et le 13^{ème} siècle, la principale cause de pollution était liée à l'accroissement de l'utilisation du charbon dans les fours à chaux, les forges, les usines de verres et de briques, les brasseries et les maisons individuelles. Pendant la révolution industrielle (1750-1880), la machine à vapeur transforme la production industrielle artisanale en usine, où la production de l'énergie est centralisée.

La période des années 1890-1905 :

Les figures 1.1 et 1.2 mettent en évidence une augmentation constante du nombre des travaux publiés chaque année sur la pollution de l'air pendant cette période. La plupart d'entre eux sont consacrés aux méthodes de lutte contre les sources de fumée (fig1.2). L'examen de ces publications révèle que dans leur ensemble elles visent à supprimer la fumée en recourant au « bon sens » qui caractérise à cette époque (1890) la technique à laquelle la Grande-Bretagne doit faire des réalisations vraiment étonnantes dans l'industrie textile, les chemins de fer et la mécanisation en général, œuvres d'hommes sans formation scientifique, mais remarquablement doués de sens commun. Pendant cette période, l'expression « brûler sa fumée » est courante parmi les ingénieurs, les administrateurs et le grand public, alors que beaucoup de ceux qui l'emploient ignorent sa véritable signification. En fait, la plupart des systèmes imaginés reposent sur la conviction que la fumée portée à température convenable « brûle ». Cette conviction subsiste, bien que le rapport de London Smoke Prevention Exhibition de 1883 (Frankland, 1883) ait, dans sa partie consacrée à la chimie, analysé à fond la nature de la combustion et montré que celle-ci exige non seulement une température élevée, mais aussi un apport suffisant d'oxygène. Mais, les ingénieurs n'ayant pas en général de contact étroit avec les chimistes, on note un net déphasage entre l'analyse approfondie du

mécanisme chimique de la combustion et le début d'application rationnelle des connaissances théoriques à la conception d'appareils assurant une combustion presque totale. Des connaissances théoriques à la conception d'appareils assurant une combustion presque totale [4].

Dans la période antérieure à 1900, parurent cependant plusieurs publications remarquables. Nous en retiendrons quelques travaux sur les dégâts causés aux plantes par le gaz sulfureux, et notamment (Watson, 1899) celui de chercheurs de Kew (près de Londres) qui découvrirent la possibilité d'éviter les dégâts aux plantes en retardant volontairement leur croissance (mise au repos) pendant la durée d'exposition à la fumée — moyen récemment redécouvert en Californie. Autre articles présentés par (Ost & Wehmer, 1899), (Bobrov, 1952).

À cette époque également ont paru l'article original de Ringelmann (1898) décrivant une échelle de détermination de l'opacité des fumées, et le premier article exposant une méthode basée sur l'absorption de la lumière pour doser les fines particules de polluants (Fritzsche, 1898).

1.1.5.3 Le vingtième siècle

1905-1915

Pendant cette période, l'attention portée aux effets de la pollution de l'air croît fortement et les graphiques montrent que les activités de recherche emportent beaucoup sur les activités techniques. L'intérêt médical s'attache alors en grande partie aux aspects cliniques et épidémiologiques. Aussi, et c'était à prévoir, certains articles se contredisent-ils, car les opinions fondées sur de simples impressions cliniques ne peuvent être solides. L'opinion médicale admet en général que la fumée, le gaz sulfureux et les autres polluants ont des effets indésirables, mais elle n'est pas unanime quant au caractère nécessairement toxique de la pollution générale des villes. Un mémoire (*Sci. Amer.*, 1914b) affirme cependant que le cancer est plus fréquent là où l'on utilise du charbon. C'est également à cette époque que des enquêtes sont menées dans la plupart des villes américaines, en vue de rassembler les données préliminaires à l'établissement d'un plan de lutte contre les fumées, tandis que dans les villes anglaises est entreprise une série d'études sur l'état enfumé de l'atmosphère [4].

1915-1925

Les travaux sur la pollution de l'air se ralentissent considérablement pendant la guerre et la période de réadaptation qui a suivi. Presque rien n'est publié sur ce sujet, et les rares articles sur les méthodes de détermination de la pollution, tous d'origine américaine, sont pour la plupart des Compilations.

Sous le rapport des méthodes de contrôle, peu de faits intéressants, mais trois points sont à noter: *a)* les ingénieurs ont fort bien compris que la prévention de l'émission de fumée par les chaudières à vapeur dépend essentiellement d'une meilleure conception du foyer et non de l'addition d'un «brûleur de fumée» lorsque le foyer fonctionne mal (Buell, 1923); *b)* il est fait de plus en plus mention des combustibles pulvérisés et des cendres volantes qu'ils produisent; et *c)* en 1915 est publié le rapport de la Selby Smelter Commission (Holmes, Franklin & Gould, 1915) [4]. Cette dernière date est importante, car c'est celle de l'un des premiers cas d'aide scientifique à une compagnie dont les effluents constituaient un danger sérieux pour l'entourage. Cette aide conduit à la récupération du soufre comme sous-produit, et à l'installation d'instruments enregistreurs continus permettant un contrôle permanent de la concentration du gaz sulfureux dans l'air au voisinage de la fonderie. Selby possède également la cheminée la plus haute du monde (200 m environ), résultat des recherches concernant l'influence de la hauteur des cheminées sur la réduction de la pollution.

1926-1935

L'événement le plus dramatique de cette période est la catastrophe de la vallée de la Meuse, où plus de soixante personnes périssent par suite de la pollution de l'air (Firket, 1931; Haldane, 1931; Van Leeuwen, 1931). Dans le monde entier, c'est le signal de recherches plus actives. Des ouvrages français font leur apparition dans les bibliographies et les dangers de la pollution de l'air sont l'objet de discussions à la Chambre des Députés.

La bibliographie allemande (Schwartz et al., 1955) enregistre pour cette période dix articles sur les effets de la pollution de l'air, dont cinq sont consacrés aux répercussions sur la santé humaine, alors que, pour la période antérieure à 1925, presque tous les articles cités traitaient des effets sur la végétation.

Le travail sur les méthodes de mesure des polluants est illustré par le rapport du British Department of Scientific and Industrial Research qui indique qu'une relation directe a été établie entre la teneur en produits solides du panache de fumée d'une cheminée et la densité optique de ce panache, mesurée à l'échelle de Ringelmann ou autrement. C'est un progrès considérable, car il donne aux techniques graphiques de mesure une autorité supplémentaire qui était bien nécessaire. Aux Etats-Unis, un article de Drinker & Hazard (1934) décrit un appareil pour mesurer la poussière: il se compose d'un ruban transparent, mobile, qui reçoit la poussière soufflée par une buse et donne un enregistrement continu. Dans ce pays et en Allemagne, l'attention commence à être sollicitée par les dangers des gaz d'échappement des moteurs à combustion interne (Florentin, 1928; Sayers et al, 1929). A cette époque, l'accent est mis sur l'oxyde de carbone, car il est prouvé que la teneur de l'air en CO dans les rues des grandes villes approche souvent le seuil de nocivité. En outre, deux articles soulignent que la pollution de l'air augmente beaucoup les dangers de la navigation aérienne (Aldworth 1930; Connolly, 1934). Ce point est important, et il est étonnant que les techniciens de l'aéronautique mondiale n'aient pas fait plus pour appeler l'attention sur cet aspect de la pollution de l'air.

1936-1945

Au début de la période 1936-1945, on note un accroissement notable des activités de recherche et des applications techniques. L'intérêt se porte sur le caractère dangereux des cendres aéroportées qui proviennent des chaudières à vapeur; les tourbillons de poussière du centre des Etats-Unis (*dust bowl*) font naître un intérêt considérable pour les risques que font courir à la santé publique les poussières, notamment celles de silice.

En 1937, paraissent deux articles, dont l'un français, sur la production d'aldéhydes par les moteurs à combustion interne (Maillard, 1937; Pardoe, 1937): la teneur en aldéhyde des gaz d'échappement est quarante fois plus élevée pendant la décélération (admission fermée) que pendant l'accélération ou la marche normale. L'année suivante, quatre nouveaux articles sont consacrés au même sujet (Gründer & Rich, 1938; Maurin & Kling, 1938; Pardoe 1938; Roberts, 1938); l'un d'eux émet l'hypothèse que des effluents semblables pourraient être produits par les chaudières à mazout quand l'admission d'air est excessive et la combustion incomplète. Un article japonais décrit une méthode permettant de mesurer au moyen d'une cellule photo-électrique la densité optique de papiers-filtres renfermant des particules de polluants atmosphériques (Kashiwai, 1938). Au Canada, les recherches sur les émissions massives de gaz sulfureux par les cheminées des fonderies Trail ont commencé en 1929 (ces fonderies ayant causé des dégâts très importants sur le territoire voisin, aux Etats-Unis), mais le rapport préliminaire n'a été présenté par la commission internationale qu'en 1937 et ce n'est qu'en 1941 qu'une décision finale a été prise (Dean & Swain, 1944). Cette étude scientifique de la pollution industrielle a fait date, car c'est la première fois que des méthodes de lutte météorologique ont été spécifiquement appliquées à des polluants industriels, les responsables acceptant d'interrompre certaines opérations, chaque fois que les météorologistes établis au

voisinage des fonderies faisaient savoir que les conditions atmosphériques étaient favorables à la formation de couches d'air qui entraîneraient une fumigation de la vallée au sud des cheminées de la fonderie.

L'année 1942 est marquée par la publication d'un article intéressant sur les effets toxiques des polluants (Easton, 1942); l'auteur suggère que la présence de deux polluants, tous deux à une teneur inférieure à leur concentration maximale admissible, peut provoquer des effets toxiques par sommation des effets. Ce n'est pas la première mention d'une synergie des polluants de l'air, mais certainement une des premières.

1946-1957

Pendant cette période, les recherches s'intensifient très rapidement, comme l'indique le nombre des articles publiés et la variété des sujets étudiés. Aussitôt la guerre finie, on assiste à un brusque déploiement d'activité; mais pendant quelques années le rythme de parution des articles scientifiques et techniques semble se maintenir à 150 par an. Leur nombre est beaucoup trop considérable pour qu'il soit possible de faire un compte rendu général, et il faut se limiter aux publications les plus intéressantes.

La catastrophe de Donora, en 1948, est un événement historique qui stimule davantage la recherche que l'épisode de la vallée de la Meuse; en outre, elle fait naître un intérêt scientifique pour la pollution de l'air en Afrique du Sud, en Australie et dans d'autres pays jeunes, dont le développement atteint le stade où les populations urbaines risquent d'être exposées aux dangers de la pollution. Elle stimule également quantité de recherches physiologiques et épidémiologiques sur la nature des réactions de l'organisme humain aux polluants de l'air; des travaux sur ce sujet sont en cours dans plusieurs universités et instituts d'Amérique et dans de nombreux laboratoires du Canada, de Grande-Bretagne et d'Europe continentale.

L'ère moderne des études et des mesures de réduction de la pollution atmosphérique

On peut fixer à 1945 le début de l'ère moderne des études sur la pollution de l'air. Tout d'abord, c'est l'année qui a vu augmenter si rapidement l'activité générale que le nombre des publications de 1947 est quadruple de celui de 1944. Ensuite, le smog de Los Angeles, qui avait attiré l'attention pour la première fois vers 1940, a atteint en 1945 des proportions graves. Enfin, la catastrophe de Donora, survenue en 1948, a suscité une activité intense du Public Health Service des Etats-Unis. En 1952, la catastrophe de Londres allait confirmer ce fait, mais dès avant cette date le cours des recherches sur la pollution de l'air avait changé aux Etats-Unis, en Grande-Bretagne et en Europe. Celles-ci sont plus intenses, les crédits accordés pour les études et les plans de défense des villes sont considérablement accrus et la conviction est acquise que, de nos jours, les polluants de l'air ne comprennent plus uniquement la fumée, le gaz sulfureux, les cendres et les gaz chimiquement connus qui sont des effluents industriels, mais aussi certaines substances dont on n'avait jamais soupçonné l'existence jusqu'alors dans l'atmosphère normale d'une ville (et qui effectivement ne s'y trouvaient peut-être pas avant 1900). Ces substances, décelées pour la première fois à Los Angeles, existaient à de faibles concentrations dans toutes les villes modernes; un effort concerté pour découvrir quelles sont ces substances caractérise, à l'heure actuelle, la recherche sur la pollution de l'air, car il sera difficile, sinon impossible, de les éliminer sans les avoir identifiées. On a également compris, vers 1946, que la pollution de l'air intéresse une zone tout entière, et non pas seulement une ville. C'est pourquoi les édificateurs du programme anglais ont estimé qu'une législation nationale était la seule façon de faire face à la situation. En somme, de 1945 à 1953 environ, tout le problème de la pollution de l'air a été reconsidéré; depuis cette dernière date, toutes les disciplines scientifiques ont été sollicitées à la fois pour attaquer un problème qui met en

cause, on le voit aujourd'hui, des réactions extrêmement complexes de chimie organique et un grand nombre de réactions physiologiques provoquées par les sous-produits chimiques.

La conférence technique sur la pollution de l'air, réunie à Washington par le Gouvernement américain en 1950 (McCabe, 1952) fut la première tentative de mobilisation des effectifs scientifiques aux Etats-Unis. Les conférences nationales organisées en Californie par le Stanford Research Institute en liaison avec le California Institute of Technology, l'University of California, l'University of Southern California, l'Air Pollution Control Association et l'Air Pollution Foundation (*National air Pollution symposia*, 1949, 1952, 1955) [4] avaient le même objectif.

Un autre sujet d'étude été la dispersion de la radioactivité consécutive à l'explosion d'armes nucléaires. Pendant cette période, cette question constitue une branche spécialisée de la recherche sur la pollution de l'air, qui dépend des services d'organisation de l'énergie atomique de chaque pays; mais le développement de l'énergie nucléaire à des fins industrielles conduira fatalement à confier les problèmes que posent la dispersion, la surveillance et l'élimination des effluents radioactifs à des savants qui s'occupent de la pollution de l'air en général.

1955-1980

La législation fédérale initiale a été expliquée et étendu plusieurs fois Entre 1960 et 1980, fortement augmenté l'autorité fédérale, en particulier, dans la région de contrôle. L'automobile a continué à proliférer (Tableau 1.1) [6].

Year	Total	Year	Total
1900	4,192	1945	725,215
1905	25,000	1950	8,003,056
1910	187,000	1955	9,169,292
1915	969,930	1960	7,869,221
1920	2,227,347	1965	11,057,366
1925	4,265,830	1970	8,239,257
1930	3,362,820	1975	8,985,012
1935	3,971,241	1980	8,067,309
1940	4,472,286	1985	11,045,784
		1990	9,295,732

* Data include foreign and domestic sales for trucks, buses, and automobiles.

Tableau 1.1: véhicule automobile annuel aux États-Unis

Au cours des années 1960-1980 les pluies acides et la pollution soufrée ont provoqué l'acidification et la dégradation de nombreux lac et forêts, tant en Europe (notamment dans les pays scandinaves) qu'en Amérique du nord (notamment au Canada). La France n'a pas été épargnée et au cours de cette période, dans la région de Vosges, jusqu'à 25 % des arbres ont été touchés par des troubles et des dépérissement anormaux liés à l'intervention de la pollution de l'air et d'autres facteurs de stress (sécheresses et insectes pathogènes,...). Les travaux scientifiques ont permis de déterminer des valeurs de dépôts acides au-delà desquels des dommages irréversibles peuvent se produire sur les écosystèmes. Ces dépôts sont qualifiés de "charges critiques" et certaines régions en Europe demeurent encore soumises -malgré les progrès accomplis- à des dépassements de ces seuils jugés nocif. Des risques pour la santé humaine sont également mentionnés (contamination des eaux par les métaux lourds et corrosion des conduites d'eau).

Dans la plupart des pays industrialisés, les premières mesures des niveaux de pollution datent des années 1960. À cette époque, la pollution atmosphérique était perçue comme un

phénomène de dimension locale, essentiellement d'origine industrielle et de type acido-particulaire (liée aux poussières et aux gaz acides). Ses conséquences sanitaires étaient jugées comme peu importantes, sauf pour les populations résidant dans le voisinage immédiat des installations industrielles à l'occasion d'épisodes de niveaux élevés de pollution. À partir des années 1970, la création de ministères de l'Environnement accéléra ce processus. Ainsi, dans la plupart des pays industrialisés, les progrès technologiques réalisés dans les années 1960, les normes de rejets imposées dans ce secteur et les changements de sources énergétiques dans les années 1970 ont permis de réduire considérablement la pollution résultant des émissions industrielles et du chauffage. De 1970 au début des années 1990, dans tous les pays industrialisés, une augmentation importante de la circulation automobile. En France, par exemple, on a observé, au cours de cette période, un doublement du trafic des véhicules de particuliers et une hausse de 70 % du trafic routier de marchandises, alors que simultanément le trafic par voie ferrée baissait de 27 % et celui par voies d'eau, de 37 %.

1.1.5.4 Les années 1980

Dans les années 1970 et 1980, les pluies acides et le trou dans la couche d'ozone ont, pour la première fois, alerté sur les dégâts majeurs provoqués par la pollution atmosphérique. Les pluies acides proviennent de la rencontre entre des nuages de dioxyde de soufre ou d'oxydes d'azote et des nuages d'humidité. Au cours des années 1980-1990, de nombreuses publications scientifiques ont montré que des niveaux faibles de pollution atmosphérique avaient un impact à court terme sur la santé. En France, avec le vote de la loi sur l'air qui affirme le droit de chacun à respirer un air qui ne nuise pas à sa santé, ce problème est désormais une préoccupation majeure. Traditionnellement en économie de l'environnement, la pollution de l'air est considérée comme une externalité négative. Les économistes préconisent pour rétablir l'optimalité de procéder à son évaluation monétaire afin que les agents puissent l'intégrer dans leurs calculs.

Les pluies acides sont à l'origine de l'attention portée aux problèmes de la pollution de l'air à longue distance. Elles ont conduit en 1979, dans le cadre des Nations-Unies, à l'adoption de la convention de Genève sur la pollution atmosphérique transfrontalière et à longue distance. Cet accord a conduit à une baisse importante des émissions de SO₂ (de l'ordre de 50% en Europe). Ces mesures produisent leurs effets et on observe actuellement une tendance à restauration de la qualité de lacs et cours d'eau qui présentaient une forte acidification au cours des années 1970. Les pluies acides ont donc perdu de l'importance au regard d'autres formes de pollution de l'air. Du moins dans nos régions.

1.1.5.5 Les années 1990

Les pluies acides ont été une des sources principales de préoccupation écologique ces dernières décennies surtout en Europe et en Amérique du Nord (Rodhe et autres, 1995) et, plus récemment, en Chine (Seip et autres, 1999). Certains bassins versants en Europe présentent toutefois une sensibilité potentielle très élevée aux dépôts acides (cas en France des Ardennes, des landes, du massif central,...) et l'on note encore des dépôts atmosphériques excessifs dans certaines zones en Europe. Ceci incite à la vigilance sur l'évolution future des rejets liés aux combustibles fossiles ou à l'intensification de certaines pratiques agricole (émission d'ammoniac). À l'aube des années 1990, apparaît un nouvel effet néfaste de la pollution atmosphérique. Des chercheurs démontrent que l'émission de certains gaz provoque un effet de serre additionnel empêchant la chaleur terrestre de sortir de l'atmosphère. Un phénomène qui pourrait entraîner, à terme, une modification du climat.

En l'absence d'outils précis et adéquates pour la surveillance de la pollution dans une ville entière, les différents acteurs concernés par la gestion de la qualité de l'air utilisent actuellement des cartes de concentration de polluants obtenues par interpolation/extrapolation de mesures ponctuelles (Frangi *et al.* 1996, Carletti *et al.* 2000, Ionescu *et al.* 1996).

L'étude de la variabilité spatio-temporelle des concentrations de polluants n'est pas aisée dans la mesure où la pollution est le résultat d'interactions complexes entre, d'un côté, les émissions dans l'atmosphère des polluants et, de l'autre, les conditions environnementales du lieu considéré responsable de leur diffusion. Ces interactions sont aujourd'hui modélisées. Des techniques de simulation numérique existent permettant de suivre les concentrations de polluants dans l'espace et dans le temps (Moussiopoulos *et al.* 1996). Elles décrivent mathématiquement les émissions, le transport, la dispersion des polluants dans l'atmosphère et leur évolution chimique. Les modèles développés dans ce cadre sont actuellement en cours de validation, à l'aide de campagnes de mesures détaillées : par exemple le programme ESCOMPTE. Les résultats de ces modèles sont des cartes de distribution de polluants qui permettent une surveillance de la pollution en terme de pronostic (prévision) pour l'information quotidienne du public ou en terme de diagnostic *a posteriori* de la pollution pour mieux cerner les phénomènes enjeux [3].

Les préoccupations sur l'évolution des pollutions portent moins aujourd'hui sur l'industrie que sur le secteur des transports. Du fait de la concentration des populations et des activités en ville, à cause du flux croissant des échanges et de l'accroissement constant du parc et de la circulation automobile, Les grandes agglomérations craignent d'être asphyxiées par l'automobile (Bourboulon 1997) [3]. La pollution atmosphérique constitue toujours une préoccupation particulièrement sensible (IPTS 2000). La perception par nos sens de la qualité de l'air, la facilité d'accès à l'information, et les éléments intellectuels issus des informations reçues par le biais des médias rendent le public beaucoup plus conscient aujourd'hui qu'hier des enjeux de la pollution (van Staëvel 2000). Une étude menée par Künzli *et al.* (2000) conduite sur la Suisse, l'Autriche et la France s'est intéressé aux effets à long terme de la pollution automobile (essentiellement en PM10) sur la santé publique. Elle évalue le nombre de décès à 40 000 par ans pour ces pays) [3]. L'organisation mondiale de la santé (OMS, 2000) estime que la pollution atmosphérique serait responsable de 1,4 à 6 millions de décès par an dans le monde. Les organismes en charge de la qualité de l'air sont intéressés par l'obtention de cartes montrant la distribution spatiale des polluants sur toute la ville, voire l'agglomération. Telles études visent non seulement à améliorer nos connaissances sur la pollution atmosphérique mais aideront à consolider les directives en faveur de la qualité de l'air. Ajouté à cela, une carte détaillée de pollution permettrait d'indiquer les lieux où mener les efforts d'antipollution. Elle pourrait être utilisée comme aide pour l'implantation de futures stations de surveillances dans des sites stratégiques. Enfin elle constituerait une information de qualité et facilement compréhensible pour les citoyens (Basly 2000).

En l'état actuel des connaissances, la question de santé publique reste ouverte et des recherches sont nécessaires afin de renforcer les connaissances en matière d'exposition réelle de la population à la pollution atmosphérique. L'évaluation de cette exposition consiste à croiser les données de répartition géographique de la population et les données de concentrations de polluants (Cassadou 2002). Il est alors nécessaire d'améliorer nos connaissances des comportements de déplacements de la population et aussi d'acquérir une estimation précise de la pollution atmosphérique dans l'espace et dans le temps.

Les résultats épidémiologiques mettent en lumière les effets nocifs de la pollution de l'air sur la santé publique (Cassadou *et al.* 2002). Ainsi malgré une relative baisse des émissions de polluants, le public considère que la pollution atmosphérique n'a jamais été aussi mauvaise et problématique (Joumard 2003) [3].

1.1.5.6 Le Future

Les problèmes de la pollution de l'air du futur sont affirmés sur l'utilisation de plus en plus de fossile et des combustibles nucléaires quand la population du mondiale augmente. Pendant les années prochaines, les recherches concentrés sur des sources d'énergie solaire, géothermique, des combustibles non fossile (hydrogène et biomasse), et océanique. Encore, beaucoup des décisions de l'environnement des prochaines décennies impliqueront un choix entre les combustibles fossile et les sources d'énergie nucléaire, et l'épuisement des combustibles de future réservoirs pour les présents besoins. Autres problèmes concernant les systèmes de transport, et de la recirculation, les priorités nationales, économies internationale, emploi contre la qualité de l'environnement. Les choix auront être fait, idéalement [6].

1.2 SOURCES D'EMISSION DES POLLUANTS ATMOSPHERIQUES

Les sources de pollution de l'air sont presque aussi nombreuses que les grains de sable. En fait, les grains de sables eux-mêmes sont des polluants de l'air à la présence du vent. Les sources de la pollution atmosphérique sont de différents types. Il existe sources générales, sources de combustion, sources fixes, sources mobiles [6].

1.2.1 Générale

Les sources générales de la pollution atmosphérique sont de deux types. Il existe une pollution naturelle et une pollution anthropique. Ces sources peuvent être naturelles ou liées à l'activité humaine, ce qui à une importance certaine sur leur répartition globale autour de la planète. Toutefois, comme l'atmosphère est un système dynamique extrêmement complexe, et malgré le grand nombre d'études menées sur le sujet, les estimations des émissions à l'échelle de la planète sont parfois divergentes, ce qui rend difficile l'estimation de la part naturelle et de la part anthropique de la pollution. Il est néanmoins évident que cette dernière est beaucoup plus importante à proximité des zones très peuplées.

1.2.1.1 Les sources naturelles

La pollution d'air naturelle, c'est une pollution qui est toujours avec nous. Tout d'abord, l'émission dans l'atmosphère de polluants gazeux ou particuliers peut être d'origine naturelle (volcans, érosion des roches, remise en suspension de poussières du sol, embruns marins, feux de brousse, ...). Elle génère par exemple du soufre, du dioxyde d'azote, du dioxyde de carbone, ...etc. Nous les classerions comme pollution d'air naturelle, qui est toujours été avec nous. Les sources naturelles de pollution de l'air sont définies comme sources ne causées pas par les gens dans leurs activités. Ces sources naturelles de pollution sont responsables, selon les estimations du "United Nations Environment Programme" de 1983 de l'émission de 80 à 288 millions de tonnes d'oxyde de soufre par an (contre 79 millions pour les sources anthropiques) et de 20 à 90 millions de tonnes d'oxydes d'azote par an (contre 22 millions pour les sources anthropiques) [5]. De plus, 10 à 15 % de l'ozone que l'on retrouve au niveau du sol est d'origine stratosphérique où il est formé par réaction photochimique de l'oxygène avec le rayonnement ultraviolet émis par le soleil. Chaque année, environ 400 milliards de tonnes de CO₂ sont dégagées par la respiration, la fermentation ou le volcanisme.

a. Le volcanisme

Le volcanisme est une des sources importantes de pollution atmosphérique (Fig.1.4) [14].

L'activité volcanique est responsable du rejet dans l'atmosphère de quantités importantes de cendres, d'oxydes de carbone (CO , CO_2) ou de soufre (H_2S , SO_2). Ainsi, chaque année, 30 millions de tonnes de poussières et d'aérosols sont émises dans l'atmosphère par les volcans. Ces aérosols, dont les gouttelettes mesurent typiquement entre 0,3 et 0,5 μm , se forment généralement par réaction du SO_2 avec l'eau contenue dans l'atmosphère. Ils peuvent alors catalyser des réactions hétérogènes qui affectent la couche d'ozone stratosphérique (conversion de réserves stables de chlore comme HCl et ClONO_2 , en espèces chlorées photochimiquement actives comme Cl_2 ou ClNO_2) [9].

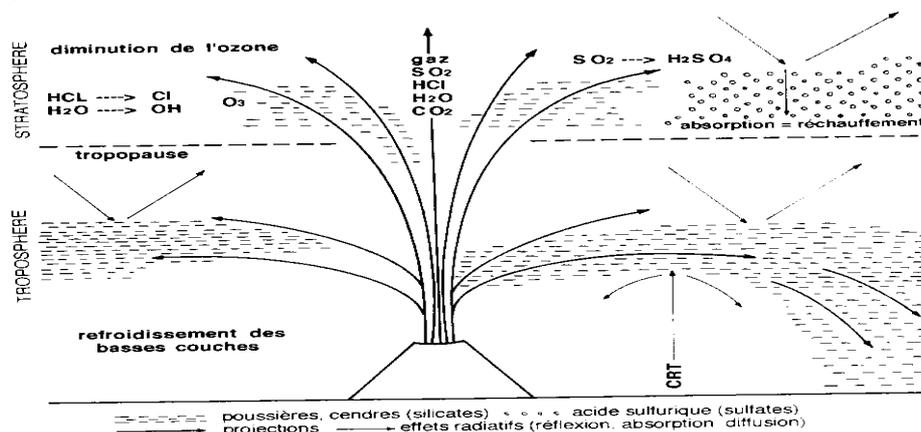


Figure 1.4 : Effets des éruptions volcaniques sur l'atmosphère

L'éruption de Mt. St Helens à Washington, est un exemple classique de volcan. La figure 1.5 est une photographie de Mt. St Helens en 18 mai 1980 [6].



Figure 1.5: Mt.St. Helens during the eruption of May 1980.

Les Feux accidentels dans les forêts et sur les prairies classées habituellement comme sources naturelles bien qu'ils puissent être engendrés originaires d'activités humaines. Un espace large d'incendie des forêts incontrôlé. Ce feu émet de larges quantités de polluants sous forme de fumées, hydrocarbures imbrûlés, oxydes de carbone, oxydes d'azote et cendre.

Les Tempêtes de poussières engendrent de grandes quantités de particules, sont aussi, source naturelle de pollution de l'air dans beaucoup de parties du monde. La réduction de la visibilité pendant les tempêtes de poussières est fréquemment la cause des Accidents routiers. Les fines particules transférées par les tempêtes de poussières du désert aux régions urbaines causent plusieurs problèmes comme, l'industrie et l'automobile [6].

Les océans du monde sont une source naturelle importante de polluants, L'océan émet des aérosols à l'atmosphère, sous forme de particules salées, qui sont corrosives aux métaux et peintures.

Une source étendue des polluants naturels est les plantes et arbres. Bien que ces plantes vertes jouent une grande partie dans la conversion du dioxyde de carbone à l'oxygène à travers la photosynthèse, ils sont encore la majeure source d'hydrocarbures sur la planète.

Autre sources naturelles, tel que les lacs alcalins qui sont habituellement tout a fait local dans leur effet sur l'environnement. Les gaz sulfureux sont des sources aussi dans cette catégorie, dont, l'odeur est extrêmement forte quand on est près de la source mais disparaît loin quelques kilomètres [6].

b. La foudre

La foudre est la principale source d'émission d'oxydes d'azote dans la partie supérieure de la troposphère. Elle est responsable de plus d'un quart de la production mondiale de NO_x . La foudre peut apparaître à l'intérieur même d'un nuage ou bien entre un nuage et le sol. En général, un coup de foudre dure de 0,01 à 2 secondes.

Les hautes pressions et les hautes températures qui règnent le long du canal provoquent la dissociation des molécules d'azote et d'oxygène dont les fragments se recombinaient pour former des oxydes d'azote. Généralement, plus la décharge est violente, plus la production de NO_x est importante. Comme l'apparition de la foudre est souvent associée à la pluie, le NO_2 produit peut réagir avec l'eau pour former de l'acide nitrique (HNO_3). Chaque décharge nuage sol produit en moyenne 7.10 molécules de NO (soit environ 30 kg). Si l'on considère que dans le monde, la foudre frappe le sol entre 50 et 100 fois par seconde, la production de NO_x qui en résulte représente chaque année plus de 100 millions de tonnes [9].

c. Autres sources naturelles de pollution

Chaque année, 400 millions de tonnes de poussières et d'aérosols sont émis dans l'atmosphère suite à l'érosion éolienne. A cela s'ajoutent environ un milliard de tonnes de particules minérales transportées dans l'atmosphère à partir des zones arides et semi-arides du globe, principalement du nord de l'Afrique. Les embruns marins soulevés par le vent (1,2 milliards de tonnes de poussières et d'aérosols dont 40 millions de tonnes de soufre), les incendies naturels (souvent dus à la foudre), la décomposition bactérienne de matières organiques (émission de SO_2 ou de NO) ou les poussières extraterrestres (50.000 à 350.000 tonnes de poussières contenant des métaux lourds) contribuent aussi à la pollution atmosphérique naturelle [9].

1.2.1.2 Les sources anthropiques

Les risques de modification du climat de la planète et la détérioration de l'environnement par l'activité humaine sont désormais bien connus. Tout commence par une constatation qui ne souffre aucune ambiguïté : depuis le début de l'ère industrielle, la composition chimique de l'atmosphère a subi une évolution brutale, sans précédent au cours des derniers milliers d'années. Cette constatation résulte de mesures qui ont été faites soit dans des bulles d'air emprisonnées par les glaciers (pour les climats anciens), soit plus directement à partir d'un réseau planétaire qui est allé en s'étoffant au cours des dernières décennies [9]. La teneur en dioxyde de carbone, dont la valeur au cours des 400.000 dernières années avait oscillé entre 180 ppm et 280 ppm a brusquement dépassé 360 ppm [10]. D'après l'UNEP (United Nations Environment Programme), en 1992, les industries des 50 principaux pays émetteurs de CO_2 ont libéré plus de 20 milliards de tonnes de ce gaz dans l'atmosphère (Les Etats-Unis arrivent en tête avec 4,88 milliards de tonnes, la France est en 11^{ème} position avec 362 millions de tonnes) [11]. Mais les conséquences les plus immédiates de cette pollution anthropique se

rencontrent au niveau local et affectent le bien-être d'une grande part de la population mondiale qui vit en milieu urbain.

a. Sources industrielles

L'intérêt des populations moderne est sur l'industrie pour produire leurs besoins a résulté en transfert des sources de la pollution de l'individu à industrie. La pollution industrielle est aussi émit par l'industrie qui convertit des produits à autre produits— (1) corps d'automobile d'acier, (2) peinture des solides et dissolvants [6].

Chacun de ces processus industriels produit des polluants. Parfois, une partie ou toute les polluants peut remis et converti à un produit utilisable.

Les sources industrielles sont stationnaires, et chacune émit relativement des différentes qualités et quantités des polluants. Par exemple, la fabrication du papier, sera dans La même place demain qu'aujourd'hui, en émettant la même quantité de et les mêmes genres des polluants sans aucun changement de processus. Le Contrôle des sources industrielles peut être accomplir habituellement en appliquant une technologie connue. Le contrôle régulateur le plus efficace est si appliqué uniformément dans tous les segments d'industries dans une région donnée, par exemple, " Émission de tous les sècheurs de la plante de l'asphalte dans tel région ne dépassera pas 230 mg de particules par mètre cube d'air sec." On peut prendre comme exemple une combustions d'origine humaines : fumées industrielles (fig 1.6) [14].



a



b

Figure 1.6 : Fumées industrielles

b. Utilités

Les utilités dans notre société moderne sont beaucoup plus une partie de notre vie, qui C'est dur d'imaginer comment nous vivants sans eux.

Une source de production d'électricité produite de l'électricité pour chauffer et allumer nos maisons [6]...etc.

Le total de la pollution d'air produit par toutes les sources individuelles probablement Dépassé cellas des stations de génération modernes qui fournissent l'énergie d'aujourd'hui. C'est facile pour les citoyens pour signaler l'utilité comme une source de la pollution de l'air sans relier leur propre utilisation d'énergie à la pollution d'utilité.

Les utilités sont dans l'activité de convertir l'énergie d'une forme à une autre et de transporter cette énergie. Si une grande station génératrice, produire, 2000 MW, de brûler un million de kilogrammes par heure de 4% des cendres de charbon, d'une façon ou d'une autre débarrassez-vous de 40,000 kg de cendre par heure [6].

Un autre type d'utilité qui est une source intéressante de la pollution de l'air, est celui De construction faible de la société moderne. Un surcharge, un pauvrement conception, ou

pauvrement opérations de vidange et du traitement de l'eau peut causer un problème de la pollution de l'air qui oblige les citoyens de demander une solution immédiate. Le public a montré sa bonne volonté pour interdire des décharges brûlantes et paie le coût supplémentaire d'installations pour avoir un environnement sans ou moins de pollution.

c. Sources personnelles

Bien que la société ait déplacé vers industries centralisées et utilités, nous avons encore beaucoup de sources personnelles de pollution de l'air on peut cité — (1) automobiles (2) chaudières de maison, (3) cheminées de maison, et (4) brûleurs ouvert des déchets.

La figure 1.7 [6] illustre les émissions personnelles pour un model d'une famille typique à l'États-Unis. L'énergie provoquée et l'émission de la pollution de l'air, des sources personnelles dans Les États-Unis sont plus grandes que ce si d'industrie et utilités sont combiné. Dans la plupart cités aux États-Unis, la masse de polluants émis par des nombres vastes d'automobiles privées, Dépasse tout autre source.

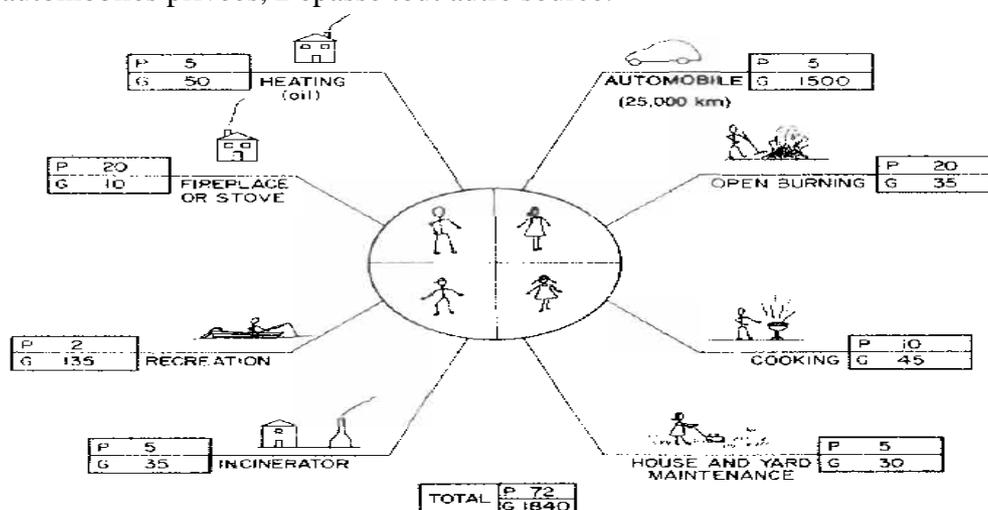


Figure 1.7 : Estimation d'émissions personnelles pour une famille de state unis pour 4 personnes. P, c'est les particules en Kg par ans, G, gaz en Kg par ans

Le Contrôle de ces sources personnelles de la pollution prendre la forme de (1) règlement (Les cheminées et poêle peuvent être utilisés seulement quand le mélange atmosphérique Est favorable), (2) changement de la manière de vivre, (3) changement d'une source plus polluante à une source moins polluante (converti le four au gaz naturel),...etc. Quel que soit la méthode utilisée pour le contrôle de pollution des sources personnelles, ce sera probablement difficile et impopulaire mettre en vigueur.

d. Emissions d'échappements moteurs – Cas de l'automobile

Le développement de tous les moyens de transport (terrestre, maritime, aérien) a entraîné une pollution spécifique importante. Nous n'aborderons dans cette partie que le cas des moteurs des véhicules terrestres. En France, les véhicules à moteur brûlent plus de 50% du pétrole consommé et sont considérés comme les principaux responsables de la pollution Atmosphérique urbaine. En 1999, ils ont émis 28.000 tonnes de SO₂, 728.000 tonnes de NO_x, 577.000 tonnes de COVNM et 3.071.000 tonnes de CO. Pour les véhicules équipés de moteurs à essence, les polluants proviennent des gaz d'échappement, des gaz de respiration du carter, de la ventilation des hydrocarbures présents dans le réservoir ou du rejet d'hydrocarbures par le carburateur (élévation de la température sous le capot lors de la demi-heure qui suit l'arrêt du moteur). Les émissions polluantes des véhicules à moteur diesel ne

proviennent quant à elles que des gaz d’échappement. Le fonctionnement normal du moteur à essence conduit à émettre des quantités d’imbrûlés tandis que le moteur Diesel émet, lors du fonctionnement en surcharge, des suies provenant du craquage des vapeurs de gazole ou des imbrûlés liquides. Le tableau 1.2 suivant présente la composition des principaux gaz d’échappement des véhicules routiers [9]:

Polluant (% de	Moteur essence			Moteur Diesel		
	max.	min.	moyenne	max.	min.	moyenne
CO ₂	15,0	2,7	9,0	13,8	0,7	9,0
CO	13,5	0,2	4,0	7,6		0,1
O ₂	17,4	0	4,0	20	0,5	9,0
H ₂	5,8	0	2,0	2,5	0	0,03
HC	4,0	0	0,5	0,5	0	0,02
Aldéhydes	0,03	0	0,004	0,0037	0	0,002
NO _x	0,20	0	0,06	0,15	0	0,04
SO ₂	0,008	0	0,006	0,03	0,01	0,02

Tableau 1.2 : Composition des gaz d’échappement des véhicules routiers

Une importante réduction des émissions polluantes dans le cas de l’automobile est observée depuis une décennie. Elle est due à l’application des normes d’émission de polluants de plus en plus sévères qui a conduit à une amélioration des conditions de fonctionnement moteur et au traitement des effluents en sortie de celui-ci. Cette diminution des émissions Polluantes se fait toutefois sentir avec retard en raison du délai nécessaire au renouvellement Du parc automobile. En effet, sans mesures incitatives, le délai de renouvellement du parc est De l’ordre de 15 à 20 ans. Au 1^{er} janvier 2000, l’âge moyen du parc automobile français était De 7,5 ans, le quart de ce parc étant composé de véhicules âgés de plus de 10 ans (donc non soumis aux normes Euro I à leur mise sur le marché), 7% de véhicules âgés de plus de 15 ans et 4% environ de véhicules de plus de 20 ans ; enfin, l’âge moyen de sortie du parc était de 12,6 ans (contre 11,6 en Allemagne). Or, à titre d’exemple, une voiture équipée d’un moteur à essence mise sur le marché il y a quinze ans émet, par rapport à un véhicule neuf actuel, vingt fois plus de monoxyde de carbone et dix à quinze fois plus d’oxydes d’azote et d’hydrocarbures imbrûlés (quant aux actuels modèles à moteur diesel, ils rejettent cinq fois moins de particules que ceux commercialisés en 1985). Compte tenu de la structure actuelle du parc automobile français, 20% des véhicules génèrent 60% de la pollution atmosphérique (CO, NO_x et HC)[12]. Le schéma suivant présente l’évolution des émissions de polluants automobiles en France depuis les 60 dernières années (l’aire bleutée en arrière plan des courbes d’émissions représente l’évolution du parc automobile lors de la même période) :

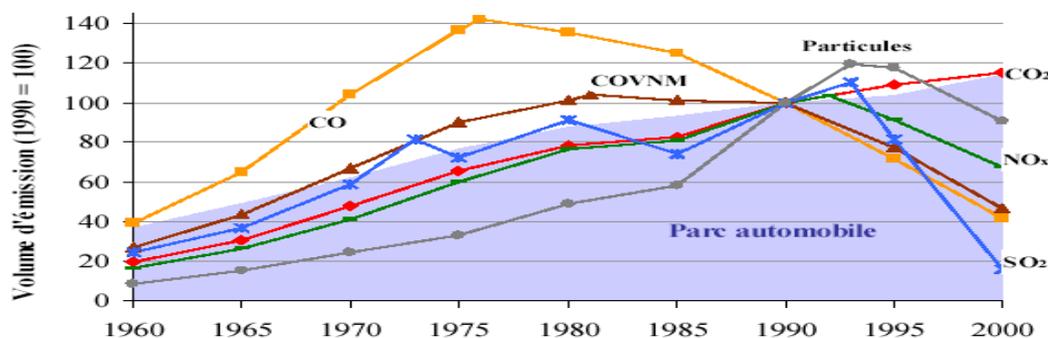


Figure 1.8 : Evolution des émissions par le transport routier en France

Ces courbes illustrent très bien la corrélation entre l’augmentation des émissions polluantes (hors CO) et l’augmentation du parc automobile français jusque dans les années 80. Après

1990, les émissions des principaux polluants ont fortement diminué en raison de la mise en service de véhicules équipés de pots catalytiques. L'augmentation accélérée des émissions de particules entre 1985 et 1995 s'explique par la part croissante prise en France par les véhicules diesel dans le parc automobile. La diminution plus tardive de cette pollution est due à la mise en place de la norme Euro I en 1994.

1.2.2 Combustion

La combustion est la plus largement utilisée, et encore l'un des plus comprendre, Mis les réactions chimiques à notre disposition. La combustion est définie comme l'union rapide d'une substance avec l'oxygène accompagnée par l'évolution de lumière et Chaleur [15]. Nous utilisons premièrement la combustion pour la chaleur en changeant l'énergie chimique potentiel du combustible à l'énergie thermique. Nous faisons ceci dans une chaudière de maison, ou un moteur d'automobile. Nous utilisons aussi la combustion Comme un moyen de destruction pour nos matières non désire.

Les problèmes avec les réactions de combustion se produisent parce que le processus Aussi produit beaucoup d'autres produits secondaires, la plupart sont appelés des polluants de l'air. Ces polluants sont le monoxyde de carbone, dioxyde de carbone, oxydes de soufre, oxydes d'azote, fumés, cendres, métaux, aldéhydes, acides, hydrocarbures non brûlés, et beaucoup autres. Seulement dans les décennies passées [6], les ingénieurs de la combustion été intéressé au ce sujet d'émissions mais pas relativement à des petites quantités de matières émis l'ors du processus de combustion.

Les combustibles de chauffage comme le charbon, le mazout, le gaz et le bois constituent tous des sources de nombreuses substances polluantes, et si elles ne sont pas éliminées par traitement direct dans la chaufferie, il faudra les évacuer à grande hauteur pour qu'elles se dispersent très loin. Si d'autres modes de chauffage sont utilisés dans les bureaux, ils peuvent Occasionner une pollution locale. La combustion de combustibles fossiles (combustion du charbon, du gaz et de l'essence dans les voitures, les maisons et les centrales) constitue la principale source à la fois des polluants atmosphériques et de la hausse des niveaux de gaz à effet de serre qui contribuent aux changements climatiques. Le CO₂, bien qu'il ne soit pas considéré comme un polluant atmosphérique, est le gaz à effet de serre dont l'augmentation est la plus rapide, en grande partie à cause de la combustion de combustibles fossiles. Les NO_x sont des gaz à effet de serre, ils comptent parmi les principaux polluants de l'air et ils mènent à la formation de l'ozone troposphérique. Cet ozone est à la fois un polluant atmosphérique et un gaz à effet de serre.

Il est possible de limiter la pollution atmosphérique (en particulier l'intensité et la fréquence des épisodes de smog) et les changements climatiques en réduisant notre dépendance aux combustibles fossiles.

Au niveau individuel ou tertiaire (chauffage des logements et des bureaux) comme au niveau industriel (production de vapeur ou d'électricité), la combustion de combustibles fossiles (charbon, fioul lourd, ...etc.) produit d'importantes émissions polluantes.

1.2.3 Sources fixes

Les sources fixes correspondent aux installations de combustion individuelles, collectives ou industrielles (fournissant chauffage et énergie), les installations d'incinération des déchets (notamment ménagers) et les installations industrielles et artisanales: métallurgie, sidérurgie, raffineries, pétrochimie, cimenteries, chimie, etc. Les sources mobiles sont constituées des transports, maritime, aérien et, surtout, terrestre avec les véhicules à moteur à allumage

commandé ou diesel. Les parts respectives de ces sources varient en fonction de la nature des agglomérations, de l'organisation urbaine et de leur degré d'industrialisation [13].

Les principaux polluants des sources fixes dérivent de l'oxydation du carbone organique présent dans les combustibles, d'impuretés (soufre) et de l'azote de l'air [13]. Ce sont donc les oxydes de carbone (dioxyde- CO_2 et monoxyde- CO), le dioxyde de soufre (SO_2), les oxydes d'azote (NO_x) et les particules en suspension dans l'air (poussières atmosphériques) associées aux notions de «suies» ou de «cendres volantes». Il faut y ajouter des polluants comme l'acide chlorhydrique (HCl), des métaux (le plus souvent associés aux particules), des composés organiques volatils (COV) ou persistants (COP) tels que les dioxines. La variété des polluants est grande pour les sources fixes industrielles: dérivés fluorés pour la métallurgie de l'aluminium; particules pour la sidérurgie, l'incinération, la cimenterie, les carrières ou le bâtiment; SO_2 , hydrocarbures (HC) et COV pour l'industrie pétrolière; hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) pour la métallurgie; méthane (CH_4) et COV pour les décharges; ammoniac (NH_3) et protoxyde d'azote (N_2O) pour l'agriculture; chlorofluorocarbures (CFC) pour l'industrie frigorifique et des mousses, etc.

1.2.4 Sources mobiles

Les polluants des sources mobiles proviennent surtout des effluents d'échappement des moteurs, mais aussi de l'évaporation des essences. Les principaux polluants sont le CO et le CO_2 , le NO , les hydrocarbures aromatiques monocycliques (HAM), les particules fines en suspension (PS), les hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) et le SO_2 pour le moteur diesel, le plomb (Pb) pour les moteurs à essence plombée, les hydrocarbures et les COV (aldéhydes, acides organiques) notamment avec l'arrivée des biocarburants.

Les polluants émis par ces différentes sources sont très nombreux, imparfaitement connus et impossibles à analyser tous. Pour surveiller la pollution atmosphérique, il a donc été nécessaire de ne retenir que quelques «indicateurs» (ou traceurs) de pollution, sélectionnés en fonction de divers critères: types de sources, facilité du mesurage, nocivité potentielle, évolution chimique.

Schématiquement, ces indicateurs sont répartis en deux grandes classes: les indicateurs des particules en suspension et les indicateurs des polluants gazeux. Habituellement, ces indicateurs s'expriment sous la forme d'une concentration ambiante d'un composé donné, pour une période de temps donnée (moyenne de 24 heures ou moyenne annuelle, par exemple) [13]. Actuellement, les techniques utilisées pour mesurer la concentration en masse des PS permettent de les distinguer du point de vue de leur granulométrie. Ainsi, la masse des particules de diamètre aérodynamique inférieur à $10\ \mu\text{m}$ peut être déterminée: il s'agit de l'indicateur PM_{10} qui correspond à la concentration des particules qui peuvent pénétrer dans l'appareil respiratoire. La concentration en masse des particules de diamètre inférieur à $2,5\ \mu\text{m}$, correspond à un indicateur ($\text{PM}_{2,5}$) qui mesure la concentration gravimétrique totale de différentes classes de particules, distinctes du point de vue chimique, qui sont directement émises ou formées secondairement.

Ainsi, pour les sources fixes, les indicateurs majeurs sont le SO_2 , les PM_{10} , les NO_x , les métaux, le HCl et les dioxines. Pour les véhicules automobiles, les émissions sont surveillées par les indicateurs CO , NO_x , HC, PM_{10} et $\text{PM}_{2,5}$.

1.3 PRINCIPAUX POLLUANTS DE L’AIR

1.3.1 La composition de l’air

L’air est composé en volume d’environ 78 p. 100 d’azote, 21p. 100 d’oxygène et 1 p. 100 d’autres gaz (voir tableau ci dessous).

Le tableau 1.3 résume la composition de l’air sec (en proportion relative) :

Gaz	Pourcentage d’un volume d’air sec (%)
Azote (N ₂)	78,09
Oxygène (O ₂)	20,95
Argon (Ar)	0,93
Dioxyde de carbone (CO ₂)	0,0344 ou (344 ppm)
Néon (Ne)	0,0018 ou (18 ppm)
Hélium (He)	0.0005 ou (5 ppm)
Krypton (Kr)	0.0001 ou (1 ppm)
Hydrogène (H ₂ O)	0.00005 ou (0,5 ppm) ou (5 ppb)
Xénon (Xe)	0.000008 ou (0,08 ppm) ou (80 ppb)
Ozone (O ₃)	0.000002 ou (0,02 ppm) ou (20 ppb)

ppm : partie par million

ppb : partie par milliard

Tableau 1.3 : La composition de l’air sec

L’atmosphère contient également des aérosols qui se composent de particules liquides et Solides en suspension. Ces particules peuvent être :

- Viables : pollens, bactéries, champignons, spores, insectes,
- Non viables : sable fines et autres poussières de sol, poussières volcaniques, embruns Marins.
- Générées sous l’action du rayonnement, de la chaleur et de l’humidité.

1.3.2 Caractéristiques des polluants

L’atmosphère contient une quantité variable de substances, gaz et aérosols, d’origine naturelle provenant de sources extrêmement diverses : poussières et gaz d’origine volcanique, poussières dues à l’érosion du sol, sels marins, produits des feux de forêts, poussières d’origine extraterrestre, produits d’origine végétale (terpènes, pollens, spores) ou animale (fermentation de bactéries, respiration), etc. Ces émissions d’origine naturelle peuvent difficilement être qualifiées de pollution. Elles sont néanmoins importantes dans la mesure où les quantités émises peuvent être si considérables qu’elles perturbent les cycles biologiques. D’autre part, elles peuvent s’ajouter ou réagir avec les polluants émis par les activités humaines. En fait, il n’existe pas un, mais plusieurs phénomènes de pollution atmosphérique, très difficiles à caractériser du fait de :

- la diversité des origines (naturelles ou anthropiques)
- la diversité des polluants qui peuvent former un « cocktail atmosphérique » dont la complexité rend l’identification de ses origines particulièrement délicate
- les nombreuses interactions susceptibles de se produire entre les divers polluants : l’addition de leurs effets, voire leur multiplication (par exemple entre le dioxyde de soufre et l’ozone)

- le nombre de sources éventuellement issues d'un même lieu
- l'ampleur possible des perturbations (de l'habitation à la planète)
- la diversité des localisations (zone urbaine, rurale, lieu public, lieu d'activité, habitation...)
- la nature des polluants (microbiens, antigéniques, chimiques ou physiques)
- leurs effets (inconfort, nuisances, nocivité aiguë voire chronique...)

1.3.3 Principaux polluants de l'air

Les principaux polluants atmosphériques se classent dans deux grandes familles bien distinctes : les polluants primaires (SO_2 , PS, NO_x , COV, CO,...etc.) et les polluants secondaires (O_3 ,...etc.). Les polluants primaires sont directement issus des sources de pollution alors que les polluants secondaires résultent des phénomènes de dispersion et de transformations photochimiques dans l'environnement. Les polluants primaires, émis directement, et les polluants secondaires, tels que l'Ozone, qui sont issus de la transformation chimique des polluants primaires dans l'atmosphère. En hiver, la pollution atmosphérique est essentiellement due aux polluants primaires. En été, elle est beaucoup plus intense avec un mélange de polluants, différent de celui d'hiver. Les polluants secondaires dits photo-oxydants se forment par action du rayonnement solaire sur les polluants Précurseurs que sont principalement le dioxyde d'azote NO_2 et les composés organiques volatils COV. Les polluants primaires et secondaires sont plus ou moins nuisibles à la santé humaine, selon leur concentration dans l'air, et à la sensibilité de l'individu. Par conséquent, les législations nationales et internationales existent afin de réguler et contrôler la quantité de pollution émise dans l'atmosphère, et afin de s'assurer que les objectifs pour améliorer la qualité ambiante de l'air soient atteints.

Ils peuvent être gazeuses ou solides. Leur présence modifie les caractéristiques physico-chimiques de l'atmosphère, origine de la pollution. La nocivité des différentes substances est liée soit à leurs caractéristiques intrinsèques soit à celles des substances adsorbées ("collées" à la surface des particules). Elle est liée à la concentration en polluant et à la durée d'exposition de la cible au produit. Toutefois il ne faut pas négliger les effets à long terme liés à une accumulation par exposition chronique ou les effets de synergie liés à l'exposition à plusieurs substances simultanément

1.3.3.1 Les polluants primaires

Les polluants de l'air liés aux activités humaines sont éminemment variables tant en nature qu'en proportions. On qualifie des polluants "primaires" les polluants qui sont directement émis dans l'atmosphère par les activités humaines. Ces polluants "primaires" peuvent, par transformation chimique, produire des polluants "secondaires".

a. Les oxydes de Soufre (SO_2 et SO_3)

Origine : Issu de la combustion des fuels et du charbon contenant des impuretés soufrées. En zone urbaine, les principales sources sont le chauffage domestique ou collectif et les véhicules à moteur diesel. Ce polluant est relativement soluble.

Le dioxyde de soufre ou anhydride sulfureux est le plus abondant des composés soufrés. Il peut, sous l'action du rayonnement solaire, se transformer par oxydation en anhydride sulfurique (SO_3) puis, en présence d'eau, en acide sulfurique (H_2SO_4). A ce titre, il intervient de manière prépondérante dans le phénomène des pluies acides. Le SO_2 provient de la combustion des charbons et des fuels, des sources mobiles et des procédés industriels (fabrication de l'acide sulfurique et des plastiques, raffinage du pétrole et frittage de minerais sulfureux tels que blende, galène, pyrites, ...etc.) [16].

Les émissions oxydes de soufre dans l'atmosphère urbaine proviennent principalement de la combustion de combustibles fossiles. Le soufre est principalement rejeté sous la forme de SO_2 (95%) et de SO_3 (1 à 2%) [9].

Globalement, on peut considérer que la production thermique est le principal responsable des émissions de dioxyde de soufre dans l'atmosphère. Ainsi, la combustion d'une tonne de fuel lourd de qualité moyenne est à l'origine d'une émission d'environ 50 kg de dioxyde de soufre. Depuis 1980, les émissions de dioxyde de soufre toutes origines confondues ont été en moyenne réduite de 72 % en France.

b. Les oxydes d'azote (NO_x)

Origine : Le NO et le NO_2 sont principalement émis par les automobiles (68 % en Auvergne), l'agriculture et la sylviculture (16 %) et par les installations de combustion (centrales thermiques, usines de traitement des déchets...). Lorsque le NO est directement émis, il se transforme en NO_2 en présence d' O_2 , d' O_3 , de C.O.V... Le NO_2 est également un précurseur de l'ozone lorsque les conditions météorologiques le permettent (action photochimique du soleil) ; c'est pourquoi il est mesuré aussi bien en zone urbaine que rurale.

Il existe plusieurs oxydes d'azote : le protoxyde (N_2O), le monoxyde (NO), le dioxyde (NO_2 , connu également sous sa forme dimère, N_2O_4), le trioxyde (N_2O_3) et le pentoxyde (N_2O_5). De tous ces oxydes, seuls NO et NO_2 jouent un rôle important dans la pollution atmosphérique et sont désignés sous la forme abrégée NO_x . Les oxydes d'azotes sont des gaz qui se forment lorsque l'air est porté à des hautes températures dans les phénomènes de combustion, en particulier par combinaison dans la flamme entre azote et oxygène, sous l'action de la foudre. Le NO est un gaz incolore à température ordinaire. Il est peu soluble dans l'eau. Son odeur, douceâtre ou piquante, est perceptible dès 0,3 ppm [9]. Il se transforme lentement dans l'atmosphère en peroxyde d'azote, mais est assez stable à haute température. Le N_2O (gaz hilarant), considéré comme inoffensif il y a encore quelques années, est aujourd'hui reconnu comme nocif (puissant gaz à effet de serre). Ils sont également produits par la combustion dans les moteurs à essence, dans les fourneaux et les chaudières fonctionnant au charbon, au bois, au gaz ou au mazout. Le nitrate de cellulose, comme celui contenu dans les films en nitrate, émet également de tels gaz. Ils sont solubles dans l'eau et forment de l'acide nitrique (HNO_3) et de l'acide nitreux (HNO_2). L'acide nitrique est un acide très fort et un puissant agent oxydant, il peut donc attaquer et détériorer la plupart des matériaux.

Le peroxyde d'azote est un gaz brun-orange à l'odeur caractéristique. A des températures inférieures à -11°C , il est polymérisé en dimère (N_2O_4). Au fur et à mesure que la température augmente, le dimère se dissocie en monomère (NO_2). Au delà de 158°C , le peroxyde d'azote se trouve totalement sous forme de monomère. Puissant oxydant et corrosif, le peroxyde d'azote est irritant et très toxique, notamment par action directe sur les poumons, où il pénètre profondément en accroissant la sensibilité des bronches aux agents broncho-constricteurs. Les valeurs d'exposition indicatives qui peuvent être admises dans l'air des locaux de travail ont été fixées par le Ministère du travail à :

- 3 ppm (6 mg/m³) pour le peroxyde d'azote (valeur limite d'exposition)
- 15 ppm (30 mg/m³) pour le monoxyde d'azote (valeur limite de moyenne d'exposition).

Le peroxyde d'azote est l'un des gaz incriminés au titre de l'effet de serre avec le gaz carbonique (CO_2), le méthane (CH_4), les chlorofluorocarbures (CFC) et l'ozone troposphérique (O_3). Parmi ces gaz, le gaz carbonique serait responsable de la moitié de l'effet de serre. Les oxydes d'azote constituent l'un des principaux précurseurs de la pollution photochimique [16].

c. Le monoxyde de carbone (CO)

Origine : Le CO est issu de la combustion incomplète des produits carbonés. La principale source est le trafic routier (68 % en Auvergne, dont 45 % pour le Puy-de-Dôme), surtout les véhicules à essence. Il est dû principalement, dans notre hémisphère, à l'utilisation de combustibles fossiles (chauffages industriels et domestiques, voitures automobiles) et, dans l'hémisphère sud, au brûlage des savanes et des forêts tropicales.

Le Monoxyde de carbone (CO), produit chimique constitué de carbone et d'oxygène, est un gaz incolore, inodore et plus léger que l'air d'environ 3 %. Il constitue un poison pour tous les animaux à sang chaud et pour de nombreuses autres formes de vie. En cas d'inhalation, il se combine avec l'hémoglobine du sang : il empêche l'absorption de l'oxygène et provoque l'asphyxie. Le monoxyde de carbone se forme lorsque l'on brûle du carbone ou des substances carbonées dans une atmosphère manquant d'air. Mais, même lorsqu'il y a en théorie suffisamment d'air, la combustion n'est pas toujours totale, et les gaz qui en sont issus contiennent une certaine quantité d'oxygène libre et de monoxyde de carbone [16].

Le monoxyde de carbone (CO) est le polluant que l'on trouve en proportion la plus importante dans l'atmosphère urbaine. Il est le résultat d'une combustion de matière organique en présence d'une quantité insuffisante d'oxygène. Le CO est un gaz asphyxiant parce qu'il réagit avec l'hémoglobine du sang, en compétition avec l'oxygène pour former un composé relativement stable, la carboxyhémoglobine, ce qui altère le transport de l'oxygène vers les différents organes. Le sang des habitants d'une grande ville renferme 1 à 2% de carboxyhémoglobine du fait de la respiration d'un air pollué par les véhicules automobile, celui des fumeurs en renferme plus de 4 à 5%.

Une réaction incomplète est fréquente lorsqu'elle est rapide, comme c'est le cas dans un moteur à explosion. Ainsi, les automobiles émettent des gaz contenant des quantités dangereuses de monoxyde de carbone, parfois plusieurs pour cent, malgré les dispositifs d'antipollution destinés à maintenir leur niveau en dessous de 1 %. Dans l'air, même une proportion de un millième de 1 % de monoxyde de carbone peut provoquer des symptômes d'empoisonnement, et une proportion aussi faible que un cinquième de 1 % peut être fatale en moins de 30 minutes. Le monoxyde de carbone est l'un des principaux constituants de la pollution atmosphérique en zone urbaine [16].

Gaz inodore, incolore et inflammable, le monoxyde de carbone CO se forme lors de la combustion incomplète de matières organiques (gaz, charbon, fioul ou bois, carburants). La source principale est le trafic automobile. Des taux importants de CO peuvent être rencontrés quand un moteur tourne au ralenti dans un espace clos ou en cas d'embouteillages dans des espaces couverts, ainsi qu'en cas de mauvais fonctionnement d'un appareil de chauffage domestique. Un conduit de chaudière percé peut remplir une pièce d'un poison insoupçonné. Le gaz de chauffage, qui peut contenir jusqu'à 50 % de monoxyde de carbone, contient souvent de faibles quantités de composés sulfurés d'odeur désagréable, rajoutés pour rendre les fuites détectables.

Le CO participe aux mécanismes de formation de l'ozone troposphérique. Dans l'atmosphère, il se transforme en dioxyde de carbone CO₂ et contribue à l'effet de serre.

Ce gaz réagit avec les radicaux hydroxyle de l'air qui le transforment notamment en CO₂. En consommant une partie de ces radicaux, il réduit sensiblement leur rôle de « nettoyeur de l'atmosphère » (les radicaux OH•, produits par une réaction photochimique entre H₂O et O₂, oxydant, entre autres, le méthane).

d. Le dioxyde de carbone CO₂

Origine : Combustion incomplète de produits fossiles (industries, transports), Le CO₂ atmosphérique provient essentiellement de la respiration ou de la fermentation des êtres vivants, de la précipitation des carbonates dans les océans, de l'altération des silicates sur les

continents et du volcanisme. L'augmentation de la teneur en CO₂ dans l'atmosphère est essentiellement due aux activités humaines : la combustion des énergies fossiles, la déforestation et les changements d'affectation des sols.

Gaz non toxique, il est naturellement présent dans l'air atmosphérique. Seule sa concentration excessive, due à l'utilisation des combustibles fossiles, est dangereuse parce qu'elle accroît l'effet de serre.

Le Dioxyde de carbone ou Gaz carbonique, gaz incolore, inodore, dont la molécule est formée d'un atome de carbone relié à deux atomes d'oxygène (CO₂) par deux double liaisons. L'atmosphère contient des quantités variables de dioxyde de carbone, généralement de 3 à 4 parties pour 10 000 et cette valeur est en augmentation de 0,4 % par an. Le gaz carbonique est utilisé par les plantes vertes dans un procédé appelé photosynthèse, qui est à la base de la synthèse des glucides.

Le dioxyde de carbone est environ 1,5 fois plus dense que l'air. Il est soluble dans l'eau à raison de 0,9 volume pour 1 volume d'eau, à 20°C. Le dioxyde de carbone peut être obtenu de différentes façons : par combustion ou oxydation de composés contenant du carbone, tels que le charbon, le bois, le pétrole, les huiles ou les aliments; par la fermentation de sucres; par la décomposition de carbonates sous l'effet de la chaleur ou d'acides. Industriellement, le dioxyde de carbone est récupéré des gaz dégagés par les hauts-fourneaux, des procédés de fermentation, de la réaction des acides sur les carbonates, et de la vapeur d'eau sur le gaz naturel, étape du procédé industriel de production de l'ammoniac [16].

La présence de dioxyde de carbone dans le sang stimule la respiration. Ce gaz est ajouté pour cette raison à l'oxygène ou à l'air pour la respiration artificielle, ainsi que dans les gaz utilisés en anesthésie. Le CO₂ est le principal responsable de l'effet de serre.

La concentration moyenne en CO₂ dans l'environnement, loin de toute agglomération ou de toute source locale de pollution, est de 300 ppm. Dans les villes, où sont concentrées des sources fixes et mobiles, la teneur en CO₂ peut dépasser 600 ppm. Les premières manifestations sur l'homme apparaissent lors de l'inhalation d'une atmosphère contenant 2% de CO₂ (augmentation de l'amplitude respiratoire) et s'aggravent pour des concentrations plus importantes.

Toutefois, la principale préoccupation liée au CO₂ en matière de pollution est l'effet de serre qu'il engendre. On considère que le CO₂ est responsable de la moitié de l'effet de serre, les autres gaz mis en cause étant le méthane (CH₄), le protoxyde d'azote (N₂O), les chlorofluorocarbones (CFC) et l'ozone troposphérique (O₃). Le pouvoir de réchauffement global (PRG) lié à ces gaz est variable et est généralement calculé en prenant comme référence le PRG du CO₂. Ainsi, nous avons :

PRG_{CO2} = 1 par définition

PRG_{CH4} = 21

PRG_{N2O} = 310

PRG_{SF6} = 23.900

L'augmentation de l'effet de serre par l'émission massive de CO₂ notamment, entraîne un réchauffement du climat à l'échelle planétaire, ce qui peut avoir de graves conséquences humaines, socio-économiques et écologiques.

e. Hydrocarbures et composés organiques volatils (COV)

Origine : Les composés organiques volatils (hydrocarbures, solvants...) proviennent notamment des sources mobiles et de procédés industriels tels que le raffinage du pétrole, le dégraissage des métaux, l'application de peintures et de vernis, l'imprimerie,....etc. Chauffées par le soleil, les feuilles de certains végétaux des forêts de conifères et des zones humides exhale des substances constituées d'une agglomération de molécules d'hydrocarbures lourds et de composés oxygénés, Les émissions naturelles d'hydrocarbures dans l'atmosphère (environ 1 milliard de tonnes par an dans le monde) constituent une part très importante des émissions totales de composés organiques volatils (COV) et seraient dix fois supérieures à

celles des hydrocarbures d'origine anthropique. Les hydrocarbures sont émis par les automobiles (présence d'hydrocarbures imbrûlés à la sortie du pot d'échappement), et par certaines activités telles que l'utilisation de solvants et de colles, les raffineries et unités pétrochimiques, le stockage et la distribution d'hydrocarbures, le traitement des déchets... etc. Ils sont dégagés par les incinérateurs, les pots d'échappement, la fumée de cigarette, les feux de bois, les climatiseurs, le stockage et l'évacuation des déchets, certains mobiliers et revêtements de sol et de murs, des tissus, des cosmétiques, des produits d'entretien, la cuisine, les activités de bureau et de bricolage...etc.

Les composés organiques volatils (COV) sont des substances dont la tension de vapeur à température ambiante est suffisamment élevée pour être presque totalement à l'état de vapeur. Ils constituent une famille de polluants d'une forte diversité et d'une grande complexité. Ils se différencient des hydrocarbures par le fait qu'ils comportent, en plus des atomes de carbone et d'hydrogène (constituants uniques des hydrocarbures), d'autres atomes divers et variés (chlore, oxygène, soufre, azote...). C'est pour cette raison qu'on les qualifie de composés organiques volatils non méthaniques (COVNM).

Dans les COV, on trouve donc : solvants, hydrocarbures (HC), ChloroFluoroCarbones (CFC), Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP), Composés Organiques Soufrés (COS), Composés Organiques Oxygénés (esters, cétones, alcools), amines, etc.

En France, les émissions anthropiques de COV ont été estimées à 2 866 milliers de tonnes en 1990, dont 30 % environ étaient imputables aux activités industrielles. Les COV interviennent dans le phénomène de pollution photochimique en réagissant avec les oxydes d'azote sous l'action des rayons ultraviolets pour former l'ozone troposphérique (O₃). Outre les combinaisons polluantes qu'ils peuvent donner dans l'atmosphère, ils peuvent également avoir une action irritante et être à l'origine de troubles neuro-digestifs [16].

Les effets de COV sont très variables selon la nature du polluant envisagé. Ils vont d'un certain gêne olfactif à des effets mutagènes et cancérogènes (benzène, certains HAP), en passant par des irritations diverses et une diminution de la capacité respiratoire.

Les COV jouent un rôle majeur dans les mécanismes complexes de formation de l'ozone dans la basse atmosphère (troposphère). Ils interviennent également dans le processus de l'effet de serre et du "trou d'ozone".

f. Les particules en suspension (PM₁₀ et PM_{2,5})

Origine : Le volcanisme est à l'origine de l'injection de masses considérables de particules dans l'atmosphère, créant des nuages de cendres qui résultent de la pulvérisation de laves au cours d'explosions violentes, L'érosion éolienne est également source de poussières, lors des tempêtes de sable par exemple, Les feux de forêts ou de prairies, dont la foudre est souvent la cause naturelle, peuvent s'étendre sur des centaines, voire des milliers d'hectares et engendrer des nuages de fumées qui parcourent parfois plusieurs centaines de kilomètres. Elles proviennent soit des combustions (suies par exemple), soit de certains procédés industriels (cimenteries, fabrication d'engrais...), soit de la circulation automobile (véhicules diesel essentiellement). L'érosion éolienne, renforcée par la présence de grandes plaines cultivées, peut être source de poussières.

Les particules en suspension dans l'air regroupent les poussières et les fumées noires. On distingue les PM₁₀, particules de diamètre < 10 microns, et les PM_{2,5} de diamètre < 2,5 microns. Ces particules représentent des noyaux de condensation et peuvent être le support d'autres polluants (le dioxyde de soufre et les hydrocarbures aromatiques polycycliques par exemple).

Ces particules, comprennent des liquides et des solides de très petite taille provenant de diverses sources naturelles et artificielles. Dans la plupart des cas, les grosses particules (2,5 à 10 microns) sont émises directement dans l'air (p.ex. : poussière, pollen, suie de diesel,

fumée), tandis que les particules fines (moins de 2,5 microns) sont formées directement par réaction chimique impliquant le NO_x, le SO₂, la vapeur d'eau, les COV et l'hydroxyde d'ammonium. Les matières particulaires constituent l'un des principaux composants du smog, mais ils ne contribuent pas à l'effet de serre.

Les PM10 sont un mélange physico-chimique complexe. Elles sont faites de composants d'émissions primaires et de composants de formation secondaire d'origine naturelle ou anthropique. Les particules primaires sont formées par les processus de combustion, par l'usure des pneus et des freins, par le tourbillonnement des poussières, etc. Les particules secondaires sont formées par des processus chimiques à partir de gaz précurseurs (SO₂, NO_x, COV, etc.).

Les nombreuses études concernant les problèmes de pollution atmosphérique effectuées ces dernières années ont mis en évidence, au côté des polluants gazeux classiques (SO₂, NO_x, Ozone), le rôle important de la fraction particulaire solide et ses effets sur la santé humaine (Problèmes respiratoires, cardio-vasculaires et possibilités de cancer). Les effets nocifs des particules chez l'homme sont liés à leur taille et à leur composition chimique.

Les particules émises par les véhicules à essence avec ou sans catalyseur et les diesels se situent principalement dans la gamme des fines particules de 0,1 à 0,3 microns, dont environ 60% se déposent dans le poumon profond. Le tabac est lui aussi une source importante de particules.

Sous le nom de particules sont regroupées les poussières, les envols provenant de la combustion, la condensation de vapeurs de métaux, les particules de suie, de goudron, de fumée...

Dans les zones urbaines, les concentrations moyennes de particules mesurées annuellement sont de 10 à 40 µg.m⁻³, dans les zones rurales, elles vont de 0 à 10 µg.m⁻³. Pendant les épisodes de pollution, les niveaux de particules en suspension mesurés peuvent atteindre plusieurs centaines de microgrammes par mètre cube.

1.3.3.2 Les polluants secondaires

Ces polluants primaires peuvent se transformer dans la basse atmosphère, sous l'action des rayons solaires et de la chaleur, en polluants dits secondaires tels que l'ozone et autres polluants photochimiques (les PAN ou nitrates de peroxyacétyle, aldéhydes, cétones, etc.). Ces composés constituent le smog photochimique, donnant naissance à ce nuage brunâtre qui stagne parfois au-dessus des grandes villes. La formation de polluants secondaires nécessite un certain temps durant lequel les masses d'air se déplacent. Ce qui explique pourquoi les pointes de polluants secondaires concernent des territoires souvent plus étendus que les pointes de polluants primaires.

a. Polluants photochimiques (pollution photo-oxydante)

La pollution photochimique (ou pollution photo-oxydante) est un ensemble de phénomènes complexes qui conduisent à la formation d'ozone et d'autres composés oxydants (peroxyde d'hydrogène, aldéhydes, peroxy acétyl nitrate ou PAN) à partir de polluants primaires (appelés précurseurs). Ces phénomènes ont lieu dans les couches d'air proches du sol et dans la troposphère libre.

La pollution photochimique désigne un mélange complexe de polluants formés chimiquement dans l'air, sous l'effet du rayonnement solaire, à partir de composés précurseurs émis par des sources naturelles et les activités humaines (oxydes d'azote (NO_x), composés organiques volatils (COV), monoxyde de carbone (CO)). Le principal polluant photochimique est l'ozone (O₃). Cette pollution atmosphérique riche en ozone est appelée *smog*.

a.1 L'ozone (O₃)

Origine : C'est un polluant secondaire se formant sous l'effet catalyseur du rayonnement solaire à partir des polluants d'origines industrielle et automobile. On considère ici l'O₃ présent dans les dix premiers kilomètres de l'atmosphère, à différencier de l'O₃ stratosphérique (10 - 20 km) qui protège la terre des rayons ultraviolets du soleil et constituant la couche d'O₃. On peut l'obtenir sous l'action du rayonnement ultraviolet sur l'oxygène en présence de NO_x et COV.

L'ozone est une forme instable de l'oxygène, produite sous l'effet des décharges et des étincelles électriques ainsi que par la lumière ultraviolette. L'azote de l'air peut également intervenir dans ces phénomènes électriques et être transformé en oxydes d'azote.

L'ozone se décompose lentement, mais il constitue en même temps un agent oxydant puissant, qui pourra affecter beaucoup de matières organiques. Il intervient dans beaucoup d'applications industrielles dont le blanchiment et la stérilisation. Il est fortement toxique et possède une odeur caractéristique. N'est pas un polluant primaire (émis directement par une source) mais secondaire (résultant de l'interaction physico-chimique de composés anthropiques et de facteurs naturels).

L'ozone est une des variétés stables de l'oxygène. Il joue un rôle important dans l'atmosphère en filtrant les rayonnements solaires ultraviolets (240 nm < λ < 300 nm), extrêmement dangereux pour les végétaux et les êtres vivants. Cet ozone stratosphérique est bénéfique et se concentre à 90% à une altitude de 20 à 50 km (avec une concentration maximale de 5 à 6 ppmv à 25 km d'altitude) ou il est responsable du "réchauffement" de l'atmosphère à 0°C environ. Pour apprécier les quantités d'ozone présentes dans l'atmosphère, deux méthodes sont utilisées en considérant, soit les "concentrations locales", exprimées en pressions partielles, soit les "intégrales verticales de colonnes infinies" exprimées en épaisseur réduite aux conditions normales de température et de pression.

L'épaisseur réduite de l'ozone stratosphérique est de 1 à 4 mm. L'ozone stratosphérique se forme à la suite de la dissociation d'une molécule d'oxygène par l'action des radiations solaires (λ < 250 nm). L'atome O, radical libre ainsi formé, s'associe alors à une molécule d'oxygène [7] :



L'ozone troposphérique est l'un des principaux composants du smog. Vu que la réaction qui produit l'ozone s'accélère à des températures élevées, le réchauffement de la planète devrait accroître les concentrations d'ozone troposphérique et créer encore davantage de smog. L'ozone troposphérique n'est pas un gaz à effet de serre.

a.2 Peroxy-acyl-nitrates (PAN)

Origine : Ils se forment dans les atmosphères urbaines par réactions photochimiques complexes entre divers polluants : oxydes d'azote, ozone et hydrocarbures. Ce sont des composés organiques du groupe des photo-oxydants.

Peroxyacétylnitrates (PAN) sont des polluants qui se forment dans les environnements urbains des régions chaudes et ensoleillées. Engendrés par des réactions photochimiques intervenant entre l'oxygène (O₂), les oxydes d'azote (NO, NO₂) et les produits issus de combustions incomplètes, les PAN sont de puissants oxydants. Bien qu'ils se trouvent essentiellement dans les smogs (brouillard photochimique), les PAN sont aussi présents à l'intérieur des bâtiments où ils sont transportés par les échanges d'air. Toutefois, ils se décomposent rapidement au contact des substances alcalines, notamment les céramiques constitutives des bâtiments ou des artefacts.

b. Polluants acides

La pollution acide liée aux polluants acides (SO_2 , NO_x , NH_3 , HCl , HF) émis par les activités humaines qui retombent en partie à proximité des sources, mais aussi à des centaines, voire des milliers de kilomètres de leurs sources émettrices. Ces polluants retombent sous forme de retombées sèches ou humides. Pendant le transport, ces polluants se transforment. Les phénomènes de pollution acide à grande échelle ont été mis en évidence par l'acidification des eaux des lacs Scandinaves et Canadiens. Le pH des eaux est devenu acide entraînant des modifications importantes de la faune piscicole. Certaines pluies ont un pH compris entre 3 et 4 alors que l'eau pure a un pH de 5,6. Les retombées acides ont des effets sur les matériaux, les écosystèmes forestiers et les écosystèmes (*Terme désignant l'ensemble des éléments vivants et non vivants qui constituent un milieu naturel et interagissent les uns avec les autres*) d'eau douce.

b.1 Sulfates (SO_4^{2-})

Origine : Les sulfates se forment en permanence dans l'atmosphère par oxydation de dérivés du soufre et réagissent ensuite avec l'ammoniac et divers cations métalliques présents dans l'air.

Ce sont des anions qui constituent la forme biogéochimique du soufre la plus répandue dans les écosystèmes. Le dioxyde de soufre (SO_2) est l'un des principaux polluants en cause dans la formation des pluies acides. Il s'oxyde dans l'air en sulfates dans le cas où l'atmosphère est sèche, ainsi qu'en acide sulfurique (H_2SO_4) dans le cas où l'atmosphère est humide. On les retrouve dans les nuages et les précipitations parfois à des milliers de kilomètres de leur point d'émission.

b.2 Nitrates (NO_3^-)

Origine : Les combustions produisent de l'oxyde nitreux et du peroxyde d'azote, à partir desquels se forment d'importantes quantités de nitrates dans l'atmosphère. Les oxydes se transforment ensuite spontanément en anhydride nitrique qui, en se combinant avec l'ammoniac présent dans l'air, engendre du nitrate d'ammonium. L'acide nitrique produit en excès est entraîné par les précipitations, contribuant ainsi au phénomène des pluies acides.

Sont des sels minéraux de l'acide nitrique, les nitrates sont des éléments nutritifs essentiels pour les végétaux. Sont des substances chimiques naturelles qui entrent dans le cycle de l'azote. Le nitrate est beaucoup utilisé dans les engrais inorganiques et les explosifs, comme agent de conservation des aliments et comme substance chimique brute dans divers procédés industriels. Le nitrate représente la plus stable des deux formes de l'azote, mais il peut être réduit en nitrite, qui est la forme la plus toxique. Il est présent à l'état naturel partout dans l'environnement. Il est le produit de l'oxydation de l'azote de l'atmosphère (représente 78%) par les microorganismes des plantes, du sol ou de l'eau et, dans une moindre mesure, par les décharges électriques comme la foudre.

la concentration de nitrates dans les eaux souterraines et les eaux de surface est faible, mais elle peut atteindre des niveaux élevés à cause du lessivage des terres cultivées ou de la contamination par des déchets d'origine humaine ou animale. Le nitrate est moins toxique que les autres formes de l'azote, comme le nitrite et l'ammoniaque.

1.3.4 Les autres polluants

L'air pollué contient souvent des centaines de polluants. Seuls quelques-uns sont mesurés comme indicateurs caractéristiques de certaines sources de pollution, ou du fait de leur nocivité particulière.

1.3.4.1 L'ammoniac NH₃

est un polluant essentiellement agricole, émis lors de l'épandage des lisiers provenant des élevages d'animaux, mais aussi lors de la fabrication des engrais ammoniacés. Il a une action irritante sur les muqueuses de l'organisme. Pour lequel les activités agricoles constituent l'essentiel des sources émettrices. L'ammoniac est un gaz qui, dissous dans l'eau, produit des solutions alcalines. Il est formé par la décomposition des matières organiques et sa présence est à proximité des installations sanitaires mal conçues. En se combinant avec d'autres gaz, il forme rapidement des sels qui se déposent sur les surfaces, ce qui peut changer les conditions d'acidité locales. Il n'est par conséquent pas susceptible de parcourir de longues distances dans son état primitif.

1.3.4.2 Le sulfure d'hydrogène H₂S

Le sulfure d'hydrogène est un gaz qui a les propriétés d'un acide faible et dégage une odeur d'oeufs pourris, ce qui indique qu'il est généralement produit par la biodégradation des protéines contenant du soufre. Facilement reconnaissable à très faible concentration à son odeur "d'oeuf pourri", qui disparaît à plus forte concentration, et pour sa toxicité très supérieure à SO₂, (le seuil de perception olfactive de H₂S est de 0,1 ppm), le H₂S est surtout produit par les usines de production de pâte à papier et par les unités des raffineries de pétrole. Il se forme par fermentation anaérobie des substances organiques.

1.3.4.3 L'acide chlorhydrique HCl

Provient notamment de l'incinération des ordures ménagères (contenant entre autres des plastiques et papiers riches en chlore), de la combustion du charbon (qui présente naturellement des teneurs variables en chlore). Et de certaines activités industrielles. Dans le cas de l'incinération des ordures ménagères, les principales sources sont les plastiques, auxquels sont imputables jusqu'à 50 % des rejets, mais également les papiers et cartons ainsi que les caoutchoucs...etc. Ce polluant contribue à l'acidification de l'air.

1.3.4.4 Les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques HAP

Sont des composés formés de 4 à 7 noyaux benzéniques. Plusieurs centaines de composés sont générés par la combustion des matières fossiles (notamment par les moteurs diesels) sous forme gazeuse ou particulaire. Le risque de cancer lié aux HAP est l'un des plus anciennement connus.

1.3.4.5 Les pesticides

Ou produits "phytosanitaires": la France occupe la deuxième place mondiale pour le volume de produits phytosanitaires consommés. 40% n'atteignent pas la cible prévue et se retrouvent dans l'air, dans l'eau... Les premières mesures des pesticides dans l'air ont été réalisées en Bretagne en 1998. Seules 17 molécules sur les 70 fréquemment utilisées sont suivies. Les techniques sont nouvelles et en phase de recherche et de validation. Aucune norme n'existe dans l'air.

1.3.4.6 Métaux lourds

Il existe différentes sources de métaux lourds qui contaminent l'atmosphère. Les métaux lourds désignent en général les métaux dont le poids atomique est supérieur à celui du fer. Ces métaux sont parfois également désignés par le terme de métaux traces ou d'éléments traces métalliques. Chaque métal possède des caractéristiques et un impact propre. On distingue :

**L'arsenic (As)* : provient, d'une part, de traces de ce métal dans les combustibles minéraux solides ainsi que dans le fuel lourd et, d'autre part, dans certaines matières premières utilisées notamment dans des procédés comme la production de verre, de métaux non ferreux ou la métallurgie des ferreux [17].

**Le cadmium (Cd)* : pour sa part est émis par la production de zinc et l'incinération de déchets essentiellement. Ainsi que de procédés industriels (métallurgie..). Il a des effets sur le système respiratoire et gastro-intestinaux.

**Le chrome (Cr)* : provient essentiellement de la production de verre, de ciment, de la métallurgie des ferreux et des fonderies.

**Le cuivre (Cu)* : provient majoritairement de l'usure des caténaires induites par le trafic ferroviaire. Le traitement des déchets et la combustion constituent à des degrés divers les principales sources émettrices de cuivre.

**Le mercure (Hg)* : le mercure est le seul métal liquide à température ambiante. Il se combine très aisément avec d'autres composés et a une volatilité importante. émis en quantité faible, mais toujours trop importante, par la combustion du charbon, du pétrole, la production de chlore, mais aussi par l'incinération de déchets ménagers, hospitaliers et industriels. Dans certaines fabrications (exemple du mercure pour la fabrication d'acide chlorhydrique).

* *Le nickel (Ni)* : est émis essentiellement par la combustion du fuel lourd qui contient des traces de ce métal.

**Le Sélénium (Se)* : provient essentiellement de la production de verre. L'utilisation du fuel lourd contribue également aux émissions du fait des traces de ce métal qu'il contient.

* *Le Zinc (Zn)* : provient de la combustion du charbon et du fuel lourd mais aussi de certains procédés industriels appartenant à la métallurgie des ferreux et non ferreux ainsi qu'à l'incinération des déchets [17].

* *Le plomb (pb)* : Une source importante des émissions de plomb dans l'atmosphère a été le transport car le plomb a été pendant longtemps additionné à l'essence du fait de son pouvoir antidétonant. De ce fait, il contamine souvent les terrains en bordures d'axes routiers. Le plomb est émis dans l'atmosphère par le traitement des minerais et des métaux pour ce qui concerne l'industrie et, dans une moindre mesure depuis la commercialisation de carburants sans plomb, par les véhicules automobiles à essence pour ce qui concerne les sources mobiles. Dans ce dernier cas, le plomb est utilisé comme anti-détonant sous la forme de plomb tétraméthyle et de plomb tétraéthyle.

1.3.4.7 Les produits fluorés

En région Nord - Pas-de-Calais, les quatre principales sources de pollution fluorée sont :

- L'industrie des tuiles et briques,
- L'industrie des céramiques,
- L'industrie du verre,
- L'industrie de l'aluminium.

Pour les industries des tuiles, briques et céramiques, les émissions fluorées ont pour origine l'utilisation des argiles qui contiennent en quantité plus ou moins importante du fluor (0,03 % à 0,09 %). Ce fluor se dégage en partie lors de la cuisson des produits. Dans l'industrie du verre, les dégagements de fluor sont essentiellement dus à l'utilisation d'acide fluorhydrique employé pour la gravure sur verre.

1.3.4.8 Les dioxines

Le terme de "dioxines" désigne les polychlorodibenzo-p-dioxines (PCDD) et les polychlorodibenzofuranes (PCDF) qui sont des composés aromatiques tricycliques chlorés. Il existe un grand nombre de combinaisons différentes liées au nombre d'atomes de chlore et aux positions qu'ils occupent : 75 PCDD et 135 PCDF. Les principaux secteurs industriels à l'origine d'émissions de dioxines et furanes sont la combustion et l'incinération en présence d'éléments chlorés d'une part, la sidérurgie d'autre part [17]. Ces émissions représenteraient ainsi environ 30 % à 40 % des émissions nationales. Les dioxines et furanes ont en commun une très grande stabilité chimique et physique qui, avec leur caractère lipophile, explique qu'ils se concentrent au long des chaînes alimentaires au bout desquelles se trouve l'espèce humaine. La principale voie de contamination humaine par les dioxines est ainsi l'ingestion, qui contribue pour plus de 90 % à l'exposition globale.

1.3.4.9 Les émissions radioactives

Les Installations Nucléaires de Base (INB) sont à l'origine de rejets dans l'air quantifiés par l'activité de leurs constituants, à savoir [17] :

- *le tritium
- *les gaz autres que le tritium (gaz rares tel que le xénon 133, le krypton 85)
- *les halogènes (iode 131)
- *les aérosols.

En effet, les rejets dans l'air des Installations Nucléaires de Base sont strictement encadrés par des réglementations et des autorisations spécifiques édictées conjointement par les ministères chargés de l'environnement, de la santé et de l'industrie.

1.3.4.10 Les polluants d'origine agricole

L'activité agricole est elle aussi à l'origine d'émission de polluants dans l'atmosphère. La plus connue est l'émission de méthane qui participe à l'augmentation de l'effet de serre ; l'élevage est le principal responsable de cette situation avec près de 15 % des émissions.

L'utilisation des pesticides peut également contribuer à la pollution atmosphérique par volatilisation des produits lors de leurs mises en oeuvre. Ils sont alors adsorbés sur de fines particules et transportés à de grandes distances. Le caractère persistant de produits comme la simazine ou l'atrazine fait qu'on les retrouve, bien après leur application dans le milieu aquatique (mer, lacs, rivières...).

Enfin, les sols fertilisés au moyen d'engrais azotés produisent des émissions d'oxydes d'azote qui peuvent être à l'origine de pluies acides ou participer au réchauffement de la planète [17].

1.4 EFFETS DE LA POLLUTION D'AIR

1.4.1 Impact de la pollution atmosphérique sur les êtres vivants

La pollution de l'air semble avoir des conséquences globales ; en affectant la santé de nombreux êtres vivants évolués, et même d'espèces réputées primitives et résistantes (lichens, algues, invertébrés...). La pollution peut directement tuer des organismes (ex. : lichens sensibles à la pollution acide de l'air). Elle a aussi des impacts indirects (par exemple en dégradant les *odeurs*, fragrances florales, *hormones* ou *phéromones* avant qu'elles atteignent leurs cibles), ce phénomène pouvant pour partie expliquer le déclin de certaines populations pollinisateurs (dont certains oiseaux, chauve-souris nectarivore) constaté dans tous les pays industriels et agricoles. Il pourrait aussi expliquer les difficultés qu'ont les individus de certaines espèces (lézards, serpents, amphibiens, certains mammifères) à se reproduire (mâle et femelles ne se retrouvant plus ou moins bien) ou de certaines espèces à se nourrir (l'individu ne percevant plus aussi bien l'odeur qui le conduisait à sa source de nourriture).

1.4.1.1 Effets sur la Santé de l'homme

a. Problématique générale

A l'heure actuelle, les effets sur la santé de la pollution atmosphérique commencent à être mieux connus par de nombreuses études menées au niveau international au cours des 10 dernières années. Il existe des éléments de connaissance indiquant que les niveaux actuels d'exposition aux polluants représentent un risque pour la santé, au moins à court terme. En particulier, ces études mettent en évidence une corrélation entre pollution atmosphérique et indicateurs sanitaires.

Les risques individuels sont relativement faibles, mais, du fait de l'exposition à la pollution atmosphérique (population exposée très importante), d'une part, et de la fréquence élevée des pathologies concernées, d'autre part, les risques au niveau de l'ensemble de la population sont loin d'être négligeables.

En effet, les maladies qui pourraient être liées à la pollution atmosphérique extérieure, sont responsables d'une mortalité et d'une morbidité considérables dans la Communauté, à savoir : les maladies respiratoires, les allergies, les maladies cardiovasculaires et les cancers. De plus, en France, comme dans tous les pays industrialisés, on constate une augmentation notable du nombre de personnes allergiques et asthmatiques, depuis une vingtaine d'années, qui ne paraît pouvoir être expliquée que par des facteurs environnementaux.

L'impact de la pollution dépend essentiellement du type et de la concentration des différents polluants, de la durée d'exposition à ces polluants, ainsi que de l'état de santé et de la morphologie des populations exposées (Martin J, 2007).

Ainsi, une exposition prolongée à des concentrations de polluants aurait une incidence sur la mortalité à long terme, par effets mutagènes et cancérigènes dus aux particules fines, benzène et divers autres composés aromatiques. La pollution peut affecter la santé de tous. Toutefois, certaines populations y sont plus sensibles : il s'agit d'une part des personnes déjà fragilisées par une maladie, telles que les insuffisants cardiaques ou respiratoires, les asthmatiques ou les personnes atteintes de bronchites chroniques ; il s'agit d'autre part des enfants dont la pollution peut entraver le développement de l'appareil respiratoire (Martin J, 2007).

Plusieurs études ont démontré que la pollution atmosphérique pose un problème de santé publique. Cependant ces effets sur la santé sont difficiles à étudier car [21] :

- il existe un grand nombre de polluants atmosphériques qui peuvent interagir entre eux
- l'exposition à la pollution atmosphérique est hétérogène aussi bien dans le temps que dans l'espace
- les risques individuels sont faibles mais le risque collectif n'est pas négligeable, car toute la population est exposée
- l'état de santé et les antécédents pathologiques sont différents pour chaque individu
- les maladies susceptibles d'être liées à la pollution atmosphérique dépendent de nombreux facteurs.

Les polluants peuvent agir à différents niveaux du corps humain :

- au niveau de la peau - c'est le cas notamment des vapeurs irritantes et des phénomènes d'allergies,
- au niveau des muqueuses
- au niveau des alvéoles pulmonaires. Les polluants se dissolvent et passent dans le sang ou dans les liquides superficiels
- au niveau des organes : certains toxiques véhiculés par le sang peuvent s'accumuler dans des organes.

Les polluants agissent sur la santé soit directement lorsque nous les respirons soit indirectement par la modification de notre environnement (effet de serre, ozone stratosphérique, retombées acides). De tous les milieux avec lesquels l'homme est en contact, l'atmosphère est le seul auquel il ne peut se soustraire : il faut respirer pour vivre et on ne sait pas épurer l'air ambiant. C'est aussi le milieu où l'homme a les échanges les plus importants puisque chaque individu respire environ 15 000 litres d'air par jour [16].

Les polluants agissent sur la santé peuvent avoir des effets selon diverses échelles, ces effets sur la santé peuvent se répartir en effets aigus (à court terme) et effets chroniques (à long terme).

* **effets à court terme** : les effets se manifestent quelques heures ou quelques jours après l'exposition. Chaque polluant a des effets spécifiques, mais il est difficile d'établir la nocivité respective de chacun d'eux car on les respire en même temps

* **à long terme** (plusieurs années). Constatés après une exposition chronique sur plusieurs mois ou années (ex : cancer) [21]. Ces effets sont plus difficiles à étudier car l'intensité des effets est faible, la caractérisation de l'exposition est délicate, les effets apparaissent après un délai parfois très long et les maladies provoquées sont d'origine multiple. L'affirmation d'une relation de causalité demande donc de la prudence. Quelques études ont montré que l'exposition prolongée à la pollution urbaine pouvait diminuer de façon durable la fonction respiratoire et entraîner la mort (265 par an) [16].

b. Effets des principaux polluants

Les polluants cités font partie de ceux dont les teneurs sont les plus importantes et dont les effets sont les mieux connus. Certains d'entre eux sont couramment suivis et mesurés en région Bourgogne, comme nous le verrons dans les paragraphes suivants. Certains autres sont cités pour tenir compte des évolutions réglementaires très probables (au niveau national et européen) qui devraient conduire, dans un avenir proche, à s'intéresser à eux. Tableau 1.4 [23], présente les effets des principaux polluants sur la santé.

LES POLLUANTS	LEURS EFFETS SUR LA SANTE
Dioxyde de soufre (SO₂)	C'est un gaz irritant. Il provoque une altération de la fonction pulmonaire chez les enfants et une exacerbation des symptômes respiratoires aigus chez l'adulte (toux, gêne respiratoire...). Les personnes asthmatiques y sont particulièrement sensibles. Synergie avec les particules.
Oxyde d'azote (NO, NO₂)	C'est un gaz irritant qui pénètre dans les plus fines ramifications des voies respiratoires, entraînant une hyperréactivité bronchique chez les patients asthmatiques et un accroissement de la sensibilité des bronches aux infections chez l'enfant. Irritation des bronches chez un public sensible.
Particules en suspension (PM10)	Les plus grosses particules sont retenues par les voies respiratoires supérieures. Elles sont donc moins nocives pour la santé que les particules plus fines (<10 µm de diamètre) qui pénètrent plus profondément dans l'organisme ; elles irritent alors les voies respiratoires inférieures et altèrent la fonction respiratoire dans l'ensemble. Certaines, selon leur nature, ont également des propriétés mutagènes et cancérigènes.
Monoxyde de carbone (CO)	il se fixe à la place de l'oxygène sur l'hémoglobine du sang conduisant à un manque d'oxygénation du système nerveux, du cœur et des vaisseaux sanguins. Le système nerveux central et les organes sensoriels sont les premiers affectés, provoquant des céphalées, vertiges, asthénies ou troubles sensoriels. En cas d'exposition très élevée et prolongée, il peut être mortel ou laisser des séquelles neuropsychiques irréversibles. Vertiges, Maux de tête, Nausées.
Composés organiques volatils (COV) dont benzène	Ces molécules ont des effets très divers selon leur famille. De la simple gêne olfactive (odeurs), certains provoquent une irritation (aldéhydes), une diminution de la capacité respiratoire. D'autres, comme le benzène, provoquent des effets mutagènes et cancérigènes. Diminution de la fonction respiratoire.
Métaux (Pb, As, Ni, Hg, Cd...)	Ces différents éléments s'accumulent dans l'organisme, ce qui entraîne un risque de toxicité à long terme impliquant d'éventuelles propriétés cancérigènes. Toxicité par bio-accumulation dans le système nerveux, les poumons, les reins...etc.
Ozone (O₃)	Ce gaz, très oxydant, pénètre facilement jusqu'aux voies respiratoires les plus fines. Il provoque de la toux et une altération pulmonaire, surtout chez les enfants et les asthmatiques, ainsi que des irritations oculaires. Irritation des muqueuses (gorge, nez, yeux).

Tableau 1.4 : Effets des principaux polluants sur la santé

c. Effets Sur l'appareil respiratoire

Certains polluants, comme le SO₂, sont fortement solubles dans l'eau, ce qui fait qu'ils sont rapidement absorbés dans les voies respiratoires hautes (par les muqueuses du nez et de l'oropharynx), mais une petite fraction peut néanmoins se fixer sur des particules fines inhalées et atteindre les voies respiratoires inférieures. Chez l'homme, la réponse à une exposition expérimentale au SO₂ à des concentrations relativement élevées se manifeste, en quelques minutes, par l'apparition de symptômes tels que la toux et des sifflements, ces troubles étant aggravés par l'exercice physique (SFSP 1996; OMS, 1997).

Le NO₂ est un gaz peu soluble qui peut donc atteindre les bronchioles et les alvéoles. Il possède des propriétés oxydantes et irritantes. Chez les asthmatiques, il augmente la fréquence et la gravité des crises. Chez l'enfant, on lui reconnaît un rôle favorisant les infections pulmonaires. Cependant, les résultats des expérimentations humaines indiquent une relative résistance de l'appareil respiratoire à des concentrations faibles (SFSP, 1996; OMS, 1997) [13].

Les particules fines ont une toxicité liée à leur composition chimique (donc à leur origine), mais surtout à leur taille qui détermine leur capacité de pénétrer plus ou moins loin dans l'arbre bronchique. Plus elles sont fines, plus elles restent longtemps en suspension dans l'air et plus leur temps de séjour dans les poumons est long. D'un diamètre supérieur à 10 µm, elles sont filtrées par le nez et sont dégluties; de 3 à 10 µm, elles se déposent principalement dans la trachée et les bronches; les particules de moins de 3 µm atteignent en grand nombre les alvéoles pulmonaires où se font les échanges gazeux avec le sang. (SFSP, 1996; Wilson et Spengler, 1996; OMS, 1997).

Quant à l'ozone, qui parvient aussi dans les étages profonds des voies respiratoires, les altérations biologiques observées chez l'homme sont dues à sa capacité d'oxyder diverses molécules biologiques (CSHPPF, 1996; ATS, 1996; OMS, 1997) [13].

d. Effets Sur l'appareil cardio-vasculaire

Les phénomènes inflammatoires qui se produisent dans les poumons ont aussi des répercussions indirectes sur le système cardio-vasculaire. Les réactions à certains polluants réduisent la capacité de l'hémoglobine à transporter l'oxygène (c'est le cas du CO) et à le livrer aux tissus périphériques (CO et oxyde d'azote NO). Ainsi, si le CO, en tant qu'indicateur de la pollution atmosphérique d'origine automobile ne semble pas présenter de liens avec la mortalité totale ni, globalement, avec les admissions en urgence pour affections cardio-vasculaires ou pour affections obstructives chroniques chez les sujets de plus de 65 ans (Verhoeff et coll., 1996 ; Burnett et coll., 1998 ; Prescott et coll., 1998), il existe une association positive entre les niveaux de CO et les hospitalisations pour insuffisance cardiaque congestive chez les personnes de plus de 65 ans, association d'autant plus importante que la température est basse (Morris et Naumova, 1998). Une telle association semble également être observée dans les admissions hospitalières pour asthme chez les personnes de moins de 65 ans (Burnett et coll., 1997). Par ailleurs, des travaux toxicologiques récents montrent, chez l'homme comme chez l'animal, que les phénomènes inflammatoires induits par certains polluants atmosphériques (particules) pourraient aussi augmenter la viscosité du sang, (Peters et coll., 1999) montre que chez l'homme comme chez l'animal, les phénomènes inflammatoires induits par certains polluants atmosphériques (particules) pourraient aussi augmenter la viscosité du sang, et entraîner une modification de la fréquence cardiaque [13].

Les polluants atmosphériques pourraient donc intervenir en diminuant la capacité des poumons à oxygéner le sang veineux par le biais d'une diminution de la fonction ventilatoire, d'une réaction inflammatoire chronique ou d'un bronchospasme. Ces mécanismes seraient plus particulièrement ceux des polluants particuliers. Mais la réduction de la capacité pulmonaire à oxygéner le sang pourrait également passer par le biais d'une diminution de la capacité de l'hémoglobine à livrer l'oxygène aux tissus périphériques, notamment pour le CO qui forme avec l'hémoglobine un complexe – la carboxyhémoglobine – inapte à transporter l'oxygène.

1.4.1.2 Effets sur les Végétation et les Animaux

Les végétaux sont exposés de manière durable à la pollution atmosphérique. Dans certaines recherches, ils sont d'ailleurs utilisés comme bio indicateur (lichens par exemple) [17]. A part les forêts, la pollution de l'air touche aussi les céréales et les plantes agricoles, comme les pois, les épinards et le trèfle. Certaines espèces d'arbres fruitiers sont également très sensibles ; le cas des abricotiers est bien connu. Les végétaux sont exposés à la fois à l'action des polluants en suspension dans l'atmosphère, aux retombées sèches de poussières et de métaux et aux dépôts acides. Ils sont atteints directement par le feuillage et aussi indirectement par l'intermédiaire du sol (lessivage d'éléments nutritifs). Bien que chaque polluant a un effet spécifique, c'est surtout les oxydants photochimiques qui sont agressifs et dangereux pour les végétaux.

L'impact de la pollution de l'air sur les végétaux résulte essentiellement de trois polluants : oxydes d'azote (NOx), dioxyde de soufre (SO₂) et ozone (O₃). Il se traduit par une réduction de la croissance des plantes sans dommages apparents (par exemple par une baisse de la production agricole de céréales due à l'ozone), des nécroses visibles en cas de fortes concentrations de polluants et une résistance amoindrie des plantes à certains agents infectieux.

Au niveau régional, les polluants atmosphériques participent à la formation des pluies acides qui contribuent au dépérissement des forêts et à la dégradation des sols. Le dioxyde de soufre (formant l'acide sulfurique) et les oxydes d'azote (formant l'acide nitrique) sont impliqués directement dans la formation des pluies acides, tandis que l'ozone altère la physiologie des arbres forestiers [20].

Les effets sur l'homme sont mieux étudiés que ceux sur les animaux domestiques et bien que, sur les animaux sauvages, la toxicité sur les voies respiratoires doit être proche et les pollutions par l'alimentation sont évidemment très différentes : fluor stocké dans l'herbe. Sont plus particulièrement suivis les oiseaux (faucons, geais, chouettes) qui stockent les métaux lourds dans leurs os, plumes, foies et reins, les hydrocarbures chlorés dans leurs tissus graisseux. Escargots et vers de terre sont utilisés pour les métaux lourds.

1.4.2 Impact de la pollution atmosphérique sur l'environnement

Enfin en ce qui concerne l'environnement, les retombées acides générées par les émissions de SO₂ (industries, centrales thermiques, chauffages domestiques) de NOx (industries, moteurs à combustion) sont les principales responsables des effets sur :

- les matériaux (édifices, monuments, façade d'immeubles...) ; Elles mettent en danger notre patrimoine culturel et occasionne d'onéreux travaux de ravalement de façades ou une restauration de monuments
- les écosystèmes forestiers. Le dépérissement forestier est lié à l'action de plusieurs facteurs souvent hiérarchisés
- facteurs prédisposants qui agissent depuis longtemps (pauvreté du sol, pollution chronique, changement climatique)
- facteurs déclenchants qui interviennent brusquement sur des périodes courtes (sécheresse, attaque d'insectes...)
- facteurs aggravants qui accentuent les effets précédents.
- les écosystèmes aquatiques. L'acidification des lacs et des cours d'eau entraîne parfois une destruction irréversible de la vie aquatique. Cependant on observe depuis une dizaine

d'années une lente amélioration de la situation grâce notamment à la diminution des émissions soufrées.

1.4.2.1 Effets locaux des polluants sur l'environnement

a. Effets sur les écosystèmes :

Les arbres vivent et dépérissent pour des causes naturelles très variées. Le dépérissement soudain constaté surtout depuis 1980 semble relever de causes tout à fait inhabituelles. Les responsables considèrent que la pollution atmosphérique est l'un des nombreux éléments participant aux dépérissements forestiers. Des recherches en laboratoires ont montré que les causes du dépérissement forestier sont très complexes : sols de mauvaise qualité, sécheresses anormales, présence de polluants dans l'atmosphère principalement la pollution acide et l'ozone. Mais à proximité de certains sites générateurs de pollution (site industriel, grosses infrastructures routières), on observe également des baisses de rendements des terres agricoles. En outre, on peut parfois observer localement une contamination des sols où s'accumulent des métaux, comme le plomb en bordure de route. L'acidification des lacs et des cours d'eau entraîne une destruction parfois irréversible de la vie aquatique.

En concentration élevée, les polluants atmosphériques agissent directement sur les plantes et causent des dommages de manière aiguë ou chronique. En été, des concentrations élevées d'ozone entraînent, par exemple, des dommages visibles aux feuilles des arbres et aux aiguilles des conifères. Une charge d'ozone élevée sur une période prolongée provoque un ralentissement de la croissance qui, dans le cas de cultures agricoles, peut avoir pour conséquence des pertes de récolte (I.V.S, 1999).

b. Effets sur le climat :

La visibilité définit la transparence de l'air. Les matières particulaires en suspension et les contaminants gazeux réduisent la visibilité. Les petites particules dispersent la lumière tandis que certains gaz, comme le dioxyde d'Azote, en absorbent une partie. Il existe aussi une relation étroite entre la visibilité et la concentration des particules en suspension. La réduction de la visibilité est, parmi les effets de la pollution atmosphérique, celui qui est perçu le plus largement par la population. Ce problème contribue à diminuer chez l'homme la sensation de bien-être. La pollution atmosphérique affecte aussi la formation des nuages et des brouillards, les précipitations, ainsi que l'ensoleillement de la surface terrestre. Le climat urbain est entre autres largement affecté par la modification de ces facteurs météorologiques (Brunner. D, 1998).

L'avènement de l'ère industrielle et la croissance démographique ont eu pour conséquence d'accroître la concentration dans l'atmosphère des gaz à effet de serre.

Il est probable que les pays les moins développés et les écosystèmes les plus vulnérables souffrent le plus des changements climatiques. Un accroissement des sécheresses entraînerait une chute des rendements agricoles dans les zones arides (Sahel, Asie centrale, Chine), et donc des risques de famine, tandis que de nombreuses zones côtières (deltas du Gange et du Nil) et certains micro-états insulaires du Pacifique et des Caraïbes seraient en grande partie immergés.

Hormis dans les régions froides, le réchauffement climatique aurait des conséquences préjudiciables sur la santé humaine. D'une part, le renforcement des périodes de chaleur augmenterait, dans les villes, la mortalité et les affections cardio-respiratoires ; d'autre part, les aires touchées par les maladies infectieuses véhiculées par les insectes tropicaux s'étendraient considérablement.

c. Effets sur les matériaux :

Les matériaux sont essentiellement affectés par la pollution acide (surtout liées au SO₂) qui entraîne une dégradation des édifices, monuments ou façades d'immeubles. Il s'agit bien souvent de la décomposition de certaines pierres calcaires sous l'effet des acides. Les particules interviennent plutôt sur les aspects de salissures des bâtiments. La pollution atmosphérique met en danger notre patrimoine culturel et occasionne d' coûteux travaux de ravalement de façades ou de restauration des monuments (ONERA, 2006).

Tous les matériaux soumis directement à l'action de l'air doivent être régulièrement entretenus ou changés. Sous l'effet du soleil, des ultraviolets, du gel, des pluies, peintures et lasures, enduits, bois, pierres, aluminium ou acier voient leur longévité ou leur efficacité remises en cause. Même les façades de verre de l'architecture moderne sont attaquées par les acides (surtout sulfurique qui opacifie) et doivent être régulièrement nettoyées [18].

Les matériaux sont à l'origine d'émissions de très nombreux composés organiques volatils. Ces émissions, tout en s'atténuant avec le temps, peuvent se prolonger pendant plusieurs mois. Leur caractérisation faite actuellement l'objet de développements importants, en liaison avec une évaluation sensorielle (irritations, odeurs) des ambiances intérieures.

Depuis plus de deux siècles, l'augmentation massive de la production et de la consommation d'énergie, due au développement des industries, des transports et du chauffage, ainsi que le remplacement, comme combustible, du bois par le charbon et les dérivés du pétrole, ont entraîné d'importantes émissions atmosphériques de composés soufrés, soit sous forme gazeuse (SO₂), soit liés à des particules (cendres volantes micrométriques, suies nanométriques).

d. Effets sur le patrimoine bâti :

Les premiers effets de la pollution urbaine de l'air étudiés de façon méthodique concernent les monuments historiques à Paris ou dans quelques grandes villes comme Strasbourg.

Les poussières noircissant les façades ont imposé de les ravalement de plus en plus fréquemment.

Mais surtout la présence de dioxyde de soufre provenant des installations de chauffage a eu des conséquences sur les statues et sur les pièces ouvragées sculptées de l'architecture de pierre des villes ou des monuments [18]. Les effets de la pollution atmosphérique sur les matériaux peuvent se ressentir, au niveau local, par un effet de corrosion dû au dioxyde de soufre, des noircissements et des encroûtements des bâtiments par les poussières issues en grande partie de la combustion des produits pétroliers.

Les polluants arrivent sur le bâtiment par déposition directe (déposition sèche) ou transportés par la pluie ou le brouillard (déposition humide). Ils se propagent ensuite à l'intérieur du matériau, véhiculés par l'eau dans le réseau capillaire de celui-ci. En ce qui concerne les autres matériaux, le SO₂ ternit les céramiques et les métaux, les COV attaquent les alliages de plomb et de cuivre, les particules quant à elles participent à la salissure des bâtiments.

1.4.2.2 Effets globaux des polluants sur l'environnement

La pollution atmosphérique, génératrice de problèmes pour la santé de l'homme, son milieu de vie et la nature, est également génératrice de problèmes plus globaux au niveau planétaire. Elle peut en effet être à l'origine de dérèglements naturels, sociologiques, voire politiques (déplacements de population, par exemple).

On ne peut, alors, parler de pollution de l'air sans évoquer le phénomène de l'Effet de Serre, l'amenuisement de la couche d'ozone ou les pluies acides. Ces problèmes étudiés à l'échelle internationale trouvent leur origine à l'échelon local.

a. Effet de serre

L'effet de serre est un phénomène avant tout naturel de piégeage par l'atmosphère du rayonnement de chaleur émis par la terre sous l'effet des rayons solaires. Il permet une température sur Terre bien supérieure à celle qui régnerait en son absence (+ 33°C environ). Le groupe de gaz responsables de ce phénomène est présent dans l'atmosphère à l'état de traces ; il s'agit, pour l'essentiel, de la vapeur d'eau, du gaz carbonique (CO₂), du méthane (CH₄) et du protoxyde d'azote (N₂O). C'est parce que les teneurs atmosphériques de ces gaz sont naturellement très faible que les émissions dues aux activités humaines sont en mesure de les modifier sensiblement, entraînant, a priori, un renforcement de l'effet de serre, et par suite, des modifications possibles du climat.

Bien que la vapeur d'eau constitue le plus important gaz à effet de serre, les activités humaines n'influent pas de façon sensible sur sa concentration atmosphérique, qui est naturellement très variable. En revanche, des études ont montré que les concentrations en CO₂, CH₄, et N₂O ont augmenté fortement par rapport à leurs niveaux de l'ère préindustrielle. L'homme, par ailleurs, a introduit de nouveaux gaz à effet de serre très puissants dans l'atmosphère : les chlorofluorocarbones (CFC) également responsables de la destruction de la couche d'ozone. Enfin, on sait désormais que l'ozone troposphérique, formé à partir des émissions d'oxydes d'azote (NO_x) et de Composés Organiques Volatils (COV) joue également un rôle important [21].

Pour permettre de comparer entre eux les effets des différents gaz, les experts utilisent le "Potentiel de Réchauffement Global" (PRG) qui est le rapport du forçage radiatif d'un gaz à celui du CO₂. Par construction, le PRG du CO₂ est donc 1. Le PRG du CH₄ est évalué à 21, celui du N₂O à 320, ceux de certains gaz du groupe des CFC dépassent 5 000... Bien que le CO₂ soit le moins puissant des gaz à effet de serre, sa contribution se révèle toutefois la plus forte, du fait de l'ampleur des émissions. En effectuant la somme des émissions de gaz à effet de serre, pondérée par leur PRG, on obtient une évaluation de l'impact global des activités humaines sur l'effet de serre, exprimé en unité CO₂-eq. Le forçage radiatif est l'unité permettant d'estimer l'ampleur du mécanisme susceptible de conduire à un changement climatique. Il représente la perturbation du bilan énergétique du système sol-atmosphère [21].

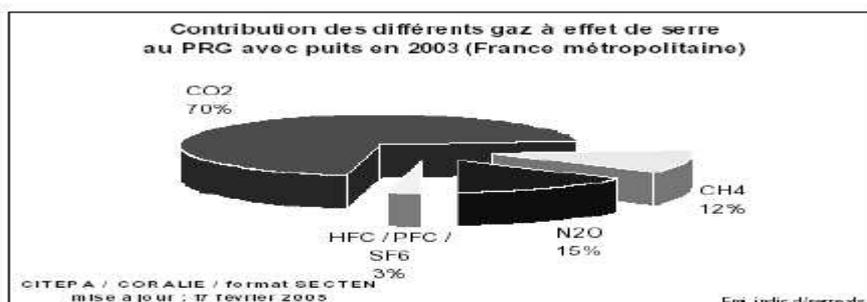


Figure 1.9 : Contribution des émissions de différentes substances aux réchauffement climatique - Source CITEPA

L'effet de serre est donc un phénomène naturel indispensable à la vie sur terre. Cependant, depuis le début de l'ère industrielle, vers 1830, les activités humaines accroissent nettement les quantités de ces gaz, appelés "gaz à effet de serre". Parmi ces gaz on trouve :

- Le gaz carbonique (CO₂), comptant pour environ 70 % des émissions de gaz à effet de serre et dont les transports sont les premiers responsables (35 %)
- Le méthane (CH₄), principalement émis par les déjections animales et les déchets
- Le protoxyde d'azote (N₂O), dont la principale source est l'agriculture

- Les hydro fluorocarbures (HFC) et les chlorofluorocarbures (CFC) produits par l'industrie
- L'ozone troposphérique.

D'autres gaz viennent s'ajouter indirectement en tant que précurseurs de gaz à effet de serre : les composés organiques volatils (COV), le monoxyde de carbone (CO), les oxydes d'azote (NO_x).

C'est pourquoi, en 1997, à Kyoto, les pays industrialisés se sont engagés à réduire leurs émissions de gaz à effet de serre. La France a pour objectif de stabiliser d'ici 2012 son niveau d'émission à celui de 1990. Cette stabilisation se traduit en fait par un effort de réduction de 10 à 15 % par rapport à une situation où l'on ne ferait rien, du fait de la croissance du PIB.

b. Amenuisement et destruction de la couche d'ozone stratosphérique

La couche d'ozone est une mince couche gazeuse stratosphérique, où la concentration d'ozone (O₃) est maximale, protégeant la surface terrestre du rayonnement ultraviolet solaire. Elle se trouve entre 20 et 30 km d'altitude. Elle est extrêmement fragile du fait de sa faible concentration en ozone (O₃).

Cependant, la pollution entraîne une destruction de cette couche via notamment les réactions qui s'effectuent entre l'O₃ et les composés des polluants. Cela expose ainsi les hommes aux rayons solaires et, partant, provoque de nombreux problèmes tels que maladies de la peau [19]. A ne pas confondre avec l'ozone troposphérique qui joue un rôle de polluant (smog) au niveau du sol, l'ozone stratosphérique, situé entre 20 et 40 km d'altitude avec une forte concentration autour de 25 km, filtre les rayonnements ultraviolets B trop agressifs pour l'homme et l'environnement.

Faiblement présent dans l'atmosphère (environ une molécule pour deux millions de molécules d'oxygène), l'ozone se trouve dans un milieu chimiquement très sensible qui risque d'être bouleversé par les activités humaines. Parmi les polluants de la couche d'ozone stratosphérique.

il y a les hydrocarbures halogènes dont les chlorofluorocarbures (C.F.C.), le méthane (CH₄), l'oxyde de carbone (CO) et le gaz carbonique (CO₂).

L'amenuisement de la couche d'ozone conduit à un affaiblissement de sa fonction de filtre vis à vis du passage des rayons ultraviolets B (UVB). Les UVB sont des rayonnements contenus dans la lumière solaire de courte longueur d'onde située entre 340 et 100 μm. Les dommages pour la faune semblent être, d'une manière générale, les mêmes que ceux décrits pour l'homme : atteintes de la peau, atteintes des yeux, et atteintes du système immunitaire.

Des études tendent à montrer que la croissance de certaines plantes est affectée par les UVB. En effet, la plupart des végétaux terrestres sont encore plus sensibles que les animaux à tout accroissement du flux d'ultraviolets. Les lésions surviennent aux parties aériennes de la végétation à des intensités à peine supérieures au flux maximal que l'on peut mesurer dans les conditions naturelles au niveau du sol (F. RAMADE - 1993).

c. Une pollution secondaire remarquée : "les pluies acides"

Le phénomène des "pluies acides" est observé depuis le début des années 50 dans l'ensemble des régions industrialisées du monde. "Les pluies acides" est un terme utilisé pour décrire toute forme de précipitation acide (pluies, neige, grêles, brouillard). Le dioxyde de soufre et les oxydes d'azote sont les principales causes des pluies acides. Ces polluants s'oxydent dans l'air pour former de l'acide sulfurique et de l'acide nitrique, ou des sels. Elles peuvent tomber à des centaines de kilomètres du lieu d'émission des polluants. Elles affectent gravement les écosystèmes et certains matériaux utilisés dans les bâtiments [21].

D'autres polluants peuvent contribuer aux pluies acides, notamment l'acide chlorhydrique émis par incinération de certains déchets plastiques, ou l'ammoniac des activités agricoles. Les pluies acides modifient les équilibres chimiques des milieux récepteurs, en particulier

lorsque ceux-ci sont déjà naturellement acides (pas d'effet tampon). Ceci peut se répercuter par des atteintes sur la faune et la flore aquatique, des carences nutritives engendrant des chutes de rendement et des lésions visibles chez les végétaux, ainsi que des jaunissements et la défoliation des arbres.

Au cours des années 1970-1980 de nombreux massifs forestiers ont été touchés par des troubles et des dépérissements anormaux en Europe. En France, jusqu'à 25% des arbres pouvaient être considérés comme endommagés à des degrés divers dans certaines régions, notamment dans les Vosges. Il est admis que les retombées acides ont contribué à ces dommages, souvent en combinaison avec des facteurs de stress naturels (sécheresses, insectes pathogènes,...), et parfois de manière prédominante dans les régions d'Europe centrale particulièrement polluées en dioxyde de soufre.

Les pluies acides ont perdu de l'importance, du moins dans nos régions, en raison des fortes réductions des rejets de SO₂ mises en oeuvre à partir des années 1980. Certains bassins versants en Europe présentent toutefois une sensibilité élevée aux dépôts acides (cas en France des Ardennes, des Landes, du Massif Central,...). Ceci incite à la vigilance sur l'évolution future des rejets liés aux combustibles fossiles ou à l'intensification de certaines pratiques agricoles (émissions d'ammoniac) [21].

d. Réchauffement climatique

Le réchauffement climatique signifie plus d'énergie dans l'atmosphère et les océans, l'augmentation des vagues de chaleur, l'élévation du niveau de la mer par dilation thermique des océans, l'augmentation des précipitations dans les zones qui en reçoivent beaucoup et, à l'inverse, une raréfaction des précipitations dans les zones déjà peu arrosées.

Pendant 10.000 ans, la concentration de dioxyde de carbone (CO₂) dans l'atmosphère est restée stable à quelques 280ppmv (partie pour million par volume) et la température de la surface terrestre ne s'était réchauffé que de 0.6°C (en 1800). Mais, après la révolution industrielle, elle a augmenté rapidement et dépasse désormais 380ppmv. A cause de cela - et d'autres gaz à effet de serre mineurs - la surface de la terre s'est réchauffé de 0.75°C. Selon les prévisions du GIEC (groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat) - compte tenu du rythme de croissance actuel - la température moyenne du globe augmentera d'environ 3°C d'ici 2100 par rapport à 1980-99 ; il est possible que la hausse soit plus marquée. En outre, il prévoit une hausse de 50% des émissions de gaz à effet de serre (GES). Toujours poursuit-il les coûts du réchauffement climatique pourront atteindre jusqu'à 5% du futur PIB mondial.

Par ailleurs, un réchauffement planétaire moyen de deux degrés Celsius (2°C) aurait pour effet :

D'accroître : les risques de famine pour des millions de personnes, les problèmes de paludisme pour des centaines de millions d'autres, les risques d'inondation pour des millions de personnes et les risques de pénurie d'eau pour des milliards d'autres.

Les dommages seront principalement subis par les pays en développement et les populations les plus pauvres, en particulier en Afrique sub-saharienne, en Asie du Sud, et dans certaines zones d'Asie du Sud-est et d'Amérique latine.

Toutefois, ces experts pensent que pour limiter les conséquences, il faut stabiliser la concentration de dioxyde de carbone (CO₂) à 400ppmv maximum, ce qui correspond à un réchauffement de la planète d'environ +2°C [19].

1.4.2.3 Effets des principaux polluants sur l'environnement

Le tableau 1.5 résume les effets et les contributions des principaux polluants atmosphériques sur l'environnement [16].

LES POLLUANTS	LEURS EFFETS SUR L’ENVIRONNEMENT
Dioxyde de soufre (SO₂)	Participation au phénomène des pluies acides par transformation en acide sulfurique au contact de l'humidité de l'air. Dégradation de la pierre et des matériaux de nombreux bâtiments
Oxyde d'azote (NO, NO₂)	Participation au phénomène des pluies acides Participation à la formation de l'ozone troposphérique (celui des basses couches) Atteinte de la couche d'ozone stratosphérique Participation à l'augmentation de l'effet de serre
Particules en suspension (PM10)	Effets de salissure des monuments et bâtiments.
Monoxyde de carbone (CO)	Participation à la formation de l'ozone troposphérique Dans l'atmosphère, il contribue à l'augmentation de l'effet de serre par transformation en dioxyde de carbone CO ₂ .
Composés organiques volatils (COV) dont benzène	Participation à la formation de l'ozone troposphérique (rôle majeur avec les oxydes d'azote) Participation indirecte à l'augmentation de l'effet de serre (par intervention dans des mécanismes conduisant à la formation des gaz à effet de serre).
Métaux (Pb, As, Ni, Hg, Cd...)	Contamination des sols et des aliments Accumulation dans les organismes vivants et perturbation des mécanismes et équilibres biologiques.
Ozone (O₃)	Diminution des rendements agricoles Dégradation des matériaux (caoutchouc par exemple) Participaton à l'augmentation de l'effet de serre

Tableau 1.5 : Effets des principaux polluants sur l’environnement

Chapitre 2

Technologies des moteurs à combustion interne

2.1 DESCRIPTION DES MOTEUR MCI

2.1.1 Introduction

2.1.1.1 Historique

L'ingénieur allemand Rudolf Diesel travaille à la mise au point d'un moteur à combustion Interne fonctionnant avec des combustibles lourds, aujourd'hui universellement connu sous le nom de moteur Diesel. Il déposa d'ailleurs un brevet intitulé « Théorie et construction du moteur thermique rationnel » en 1892 à l'office impérial des brevets de Berlin. Le moteur dans sa version définitive fut ensuite présenté au public en 1897. Le succès fut immédiat, et sa Présentation, en 1900, à l'exposition universelle de Paris, ne fit que consacrer une renommée déjà universelle. En un peu plus d'un siècle, l'automobile a pris – entre les deux guerres aux Etats-Unis et depuis la Seconde Guerre dans tous les pays industrialisés – une importance considérable dans la vie quotidienne de millions de personnes [24].

L'inventeur du moteur à allumage par compression, Rudolf Diesel était mû par la volonté de remplacer la machine à vapeur brûlant du charbon par un moteur avec un rendement plus élevé et aussi plus propre. Ces considérations demeurent d'actualité aujourd'hui plus qu'hier. En effet, à partir de la seconde moitié du XX^{ème} siècle, l'origine de la pollution a changé et, aujourd'hui, le nombre de véhicules s'accroissant, le trafic automobile est devenu un facteur prépondérant dans la qualité de l'atmosphère. Alors que les sources de pollution d'origines industrielles sont mieux maîtrisées. Aussi, la volonté du législateur en matière de respect de l'environnement s'est fortement accrue lors des quinze dernières années, notamment avec l'introduction des normes EURO. Par le biais de normes anti-pollution de plus en plus sévères, l'industrie automobile s'est logiquement tournée vers l'optimisation des moteurs de nos véhicules. Le moteur à allumage par compression est actuellement le moteur à combustion interne le plus performant et, grâce aux techniques de dépollution, l'un des plus propres. Dans l'attente de la généralisation de motorisations encore moins polluantes (véhicule électrique, pile à combustible), il représente une alternative intéressante au moteur à allumage commandé. Les moteurs Diesel modernes sont équipés d'actionneurs contrôlables tels que les systèmes d'injection "Common-Rail", le turbocompresseur à géométrie variable et la vanne de recirculation des gaz d'échappement. Ces actionneurs, introduits graduellement au long des trente dernières années, ont atteint un niveau de sophistication conséquent et ont ouvert la voie à une meilleure maîtrise de la combustion. L'électronique de commande est devenue incontournable, la réduction des émissions polluantes et l'amélioration du rendement de combustion reposant en partie sur les lois de pilotage des organes électromécaniques. Aujourd'hui, les motoristes et les automaticiens Collaborent afin d'établir les lois de commande de ces composants. C'est au cours de cette étape qu'interviennent les modèles, ils

sont indispensables pour mieux comprendre le comportement du moteur mais aussi pour faire la synthèse et simuler les algorithmes de régulation [28].

Les moteurs à combustion interne essence (allumage commandé par étincelle) et Diesel (allumage par compression) sont plus que centenaires. Ils ont été appliqués initialement à la propulsion automobile légère au début des années 1880 pour l'essence et dans les années 1930 pour le Diesel. Les progrès de ces modes de propulsions automobiles ont été continus et tous ont confirmé le caractère durable des concepts du fait, essentiellement, de la disponibilité en carburants liquides de très grande valeur énergétique. Cette situation est appelée à se maintenir jusqu'à l'horizon 2015 et au delà. L'évolution des technologies s'est faite autour de concepts fondamentaux inchangés qui ont bénéficié d'avancées en termes de matériaux et grâce également à une mécanique de plus en plus précise et élaborée; l'ensemble s'est enrichi de fonctions utilisant des capteurs associés à une électronique qui progresse en puissance et rapidité et contribue au raffinement des technologies concernées. Les besoins et contraintes engendrés par la demande de mobilité accrue, par une prise de conscience environnementale généralisée et du fait d'une sobriété énergétique indispensable, ont orienté les progrès essentiellement vers la qualité de la combustion au sens large et vers la dépollution par post-traitement catalytique. Ces fonctions, de plus en plus intégrées, font partie de systèmes dont les performances sont optimisées de façon programmée et/ou paramétrique.

2.1.1.2 Classifications

Le moteur à combustion interne, dispositif qui fournit de l'énergie mécanique par transformation de l'énergie calorifique, libérée par calcination d'un combustible.

Il existe quatre types principaux de moteurs à combustion interne : le moteur à allumage commandé, ou moteur à explosion, le moteur Diesel, le moteur à piston rotatif et la turbine à gaz. De nombreux types de moteurs utilisent le principe de la propulsion à réaction, Voir Fusée. Le moteur à allumage commandé, inventé par le technicien allemand Nikolaus August Otto, est le moteur classique à essence, utilisé pour la propulsion des automobiles et des avions ; le moteur Diesel, conçu par Rudolf Christian Karl Diesel, fonctionne suivant un principe différent et utilise du gazole ou de l'huile lourde comme carburant. Ce moteur est utilisé dans les générateurs électriques, la propulsion des navires, des camions et des bus, ainsi que dans certaines automobiles. Le moteur à allumage commandé et le moteur Diesel existent en deux temps ou quatre temps.

Les moteurs diesel sont classés selon le type d'injection et de chambre de combustion qui les équipe. Deux grandes familles de types de combustion existent [26]:

- L'injection directe, qui désigne tous les procédés ne comportant pas de fractionnement de la chambre de combustion (l'injecteur pulvérise le combustible directement dans la chambre principale du cylindre).
- L'injection indirecte, regroupant les différentes solutions de chambres de combustion divisées (l'injecteur pulvérise le combustible dans une chambre auxiliaire où a lieu le début de combustion), les gaz rejoignant ensuite la chambre de combustion principale à travers un passage ou des canaux de liaison.

a. Moteur à injection directe

Deux techniques de combustion sont employées :

- Par énergie des jets d'injecteur : utilisé dans les gros moteurs lents, l'injecteur central comporte de 6 à 8 trous, pulvérise le combustible (tarage de 200 à 350 bars) à la circonférence de la chambre de combustion de grand diamètre et peu profonde du piston. Le système fonctionne sans tourbillon d'air (swirl), mais exige une grande

précision du positionnement de l'injecteur (à proximité de la chambre) et un excès d'air très important.

- Par mouvement tourbillonnant de l'air (swirl) : c'est le procédé le plus utilisé sur tous les moteurs modernes, le mouvement tourbillonnant de l'air est amorcé par la forme du conduit d'admission la chambre de combustion dans le piston est plus réduite, et comporte une forme variable selon le constructeur, en perpétuelle évolution en fonction de la normalisation antipollution, afin d'améliorer sans cesse l'homogénéité du mélange air-combustible. L'injecteur utilisé est du type à trous multiples (3 à 6) [26].

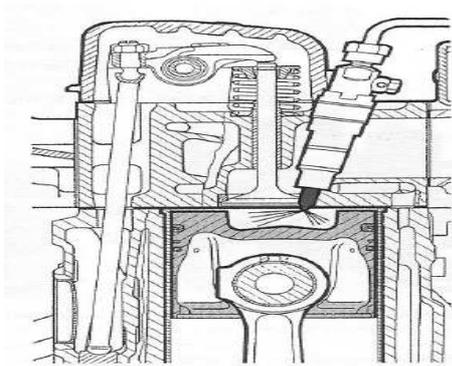


Figure 2.1 : Injection directe

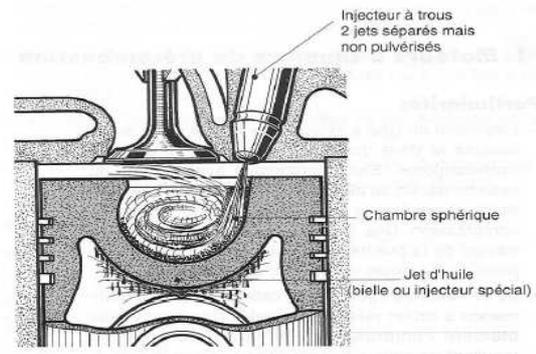


Figure 2.2 : La chambre de tourbillon d'air

Le principe de fonctionnement est le suivant :

Pendant l'admission, l'air pénètre dans le cylindre par la volute d'admission. Elle lui imprime un mouvement tourbillonnant très intense, créant un cyclone qui se poursuit pendant la compression.

En fin de compression, l'injecteur introduit le combustible dans la chambre sphérique du piston. Le jet très court est dirigé sur la paroi, et s'étale sur elle en un film mince. Les fines gouttelettes qui forment un brouillard autour de ce jet s'oxydent et amorcent la combustion.

Ce début de combustion s'effectuant avec une faible quantité de combustible, le cognement est éliminé. Le reste du combustible étalé en film mince s'évapore lentement, permettant aux vapeurs de se mélanger à l'air tourbillonnant.

b. Moteurs à injection indirecte

b.1 Moteurs à chambre de précombustion

L'injecteur du type à téton est placé sur la culasse et dans une cavité non refroidie appelée "préchambre". Elle communique avec le haut du cylindre par un ou plusieurs orifices de passage restreint, et représente entre 20 et 30% du volume de compression [26].

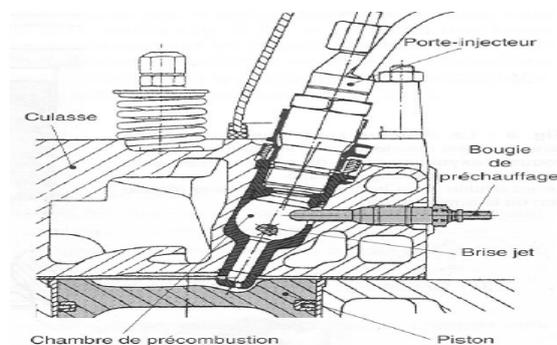


Figure 2.3 : Moteur à chambre de précombustion

Le combustible injecté dans cette préchambre commence à brûler puisqu'elle contient de l'air préalablement comprimé et l'élevation de pression résultant de cette précombustion expulse le mélange vers le cylindre où la combustion se poursuit. Cette combustion étagée assure un fonctionnement moins bruyant car les pressions d'injection sont modérées (100 à 150 bars) et le rapport volumétrique varie de 12/1 à 15/1.

Le démarrage s'opère généralement à l'aide d'une bougie de préchauffage car le taux de Compression adopté ne permet pas de porter l'air ambiant à une température suffisante lorsque la culasse est froide.

b.2 Moteurs à chambre de turbulence

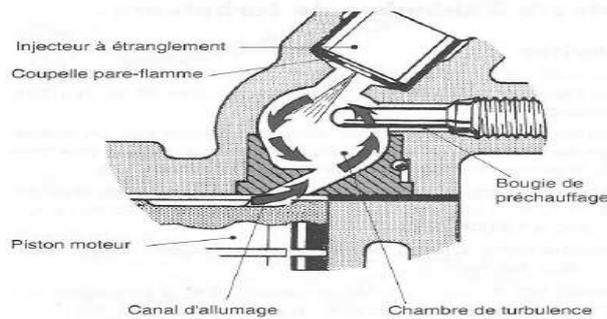


Figure 2.4 : Chambre de turbulence " Ricardo "

Ce dispositif est une variante du précédent : la chambre de turbulence représente presque la totalité du volume de la chambre de combustion. Cette préchambre communique avec le cylindre par un orifice de large section de forme tronconique; comme dans le cas précédent, l'injecteur débouche dans la chambre [26].

Pour ces moteurs, le rapport volumétrique est compris entre 15/1 et 18/1, et la pression d'injection est de 110 à 130 bars.

b.3 Moteurs à chambre d'air

La réserve d'air communique avec le cylindre par un orifice important mais l'injecteur est placé en dehors de cette chambre et il est disposé de façon telle que le jet de combustible vient à la rencontre de l'air comprimé qui sort de la chambre.

Il en résulte une grande souplesse de fonctionnement car un brassage énergique de l'air et du combustible favorise la combustion.

Ces systèmes ont été abandonnés depuis plusieurs années.

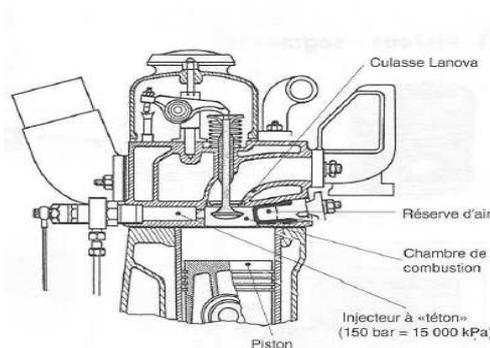


Figure 2.5 : Système Lanova

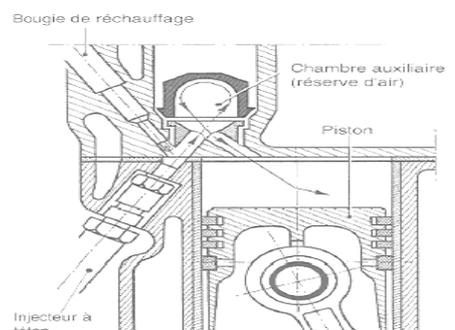


Figure 2.6 : Chambre Saurer

2.1.1.3 Principe de fonctionnement du moteur Diesel

Architecture d'un moteur Diesel

Il semble utile avant d'aborder le fonctionnement du moteur Diesel de décrire les principaux organes qui le composent. Les parties essentielles du bloc moteur du moteur à allumage par compression sont les suivantes :

Le bloc-moteur :

Le bloc-moteur ou carter-cylindres est la partie la plus massive, il contient les cylindres et reçoit l'ensemble des organes du moteur : Equipement d'injection, vilebrequin, distribution, auxiliaires Electriques,...etc. Le bloc moteur doit être étanche et robuste afin de résister aux pressions élevées qui règnent dans les cylindres pendant la combustion [28].



Figure 2.7 : Moteur diesel injection direct à quatre cylindres en ligne

Le moteur Diesel fait partie des moteurs à combustion interne. Ces moteurs comportent une ou plusieurs chambres de combustion, chacune étant délimitée par la culasse (en haut), la chemise du cylindre (surface latérale) et la tête de piston (en bas). Le piston est mobile et son mouvement alternatif est contrôlé par les forces de combustion et d'inertie. La position du piston détermine le volume de la chambre ; ses positions extrêmes sont appelées point mort haut (PMH) et point mort bas (PMB). Le volume de la chambre est respectivement minimal et maximal aux PMH et PMB. La chambre présente des lumières prévues pour l'admission des gaz frais et l'échappement des gaz brûlés. Ces lumières sont équipées de soupapes permettant leur ouverture ou leur fermeture. Les soupapes sont généralement actionnées par un arbre à cames. La combustion du mélange air gasoil se produit aux alentours du PMH; elle crée une forte surpression qui repousse le cylindre vers le PMB. Ce mouvement est transformé en mouvement rotatif et transmis au vilebrequin par la bielle.

Le fonctionnement d'un moteur à combustion interne se décompose en étapes élémentaires plus connues sous le nom de temps moteur. Un temps moteur correspond à un trajet du PMH vers le PMB, ou inversement (soit un demi tour de vilebrequin). La succession de ces temps est équivalente au cycle moteur, c'est-à-dire à la période de fonctionnement du moteur. On distingue deux types de moteurs, les moteurs deux temps (le cycle complet s'étend sur un tour de vilebrequin) et les moteurs dont la période correspond à quatre temps (deux tours de vilebrequin).

Moteurs à cycle deux temps

Le moteur à 2 temps réalise le cycle Beau de Rochas (aspiration, compression, détente, échappement) en 2 courses de piston au lieu de 4 prévues dans le moteur 4 temps [25].

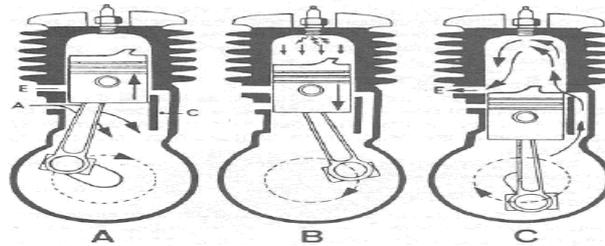


Figure 2.8 : Moteur 2 temps à compression dans le carter

- A. Admission dans le carter et compression dans le cylindre.
- B. Compression dans le carter et explosion-détente dans le cylindre.
- C. Transfert carter/cylindre et échappement du cylindre

1er temps (du PMB au PMH):

Le piston étant au PMB, l'air est introduit sous une faible pression de 1.2 à 1.4 bars. Au 1/7 environ de sa course, le piston ferme les lumières pour permettre la compression.

2ème temps (du PMH au PMB) :

La combustion commence un peu avant le PMH; après le PMH, la descente du piston réalise le "temps moteur". Au 6/7 environ de sa course, le piston découvre l'orifice d'échappement pour permettre l'évacuation des gaz brûlés. PMB.

Moteurs à cycle quatre temps

Ce séquençage des opérations a été formulé pour la première fois en 1860 par le français Alphonse-eugène Beau de Rochas et sa première réalisation pratique en 1876 est due à l'allemand Nicolaus August Otto (1831-1891) sur un moteur à allumage commandé. Voici la description des quatre temps élémentaires dans le cas du moteur atmosphérique à allumage par compression [27]:

1er temps : Admission

Initialement, le piston se trouve au PMH, la soupape d'admission S_{adm} est ouverte et la soupape d'échappement S_{ech} est fermée. Durant sa première course du PMH vers le PMB, le piston crée une dépression. L'air frais est alors aspiré à la pression atmosphérique à travers la soupape S_{adm} . La phase d'aspiration ou d'admission s'achève par la fermeture de la soupape S_{adm} lorsque le piston atteint le PMB. Chaque temps du cycle a son importance : ici, la qualité de l'admission conditionne la puissance du moteur car la quantité de combustible qui peut être brûlée est intimement liée à la charge d'air dans les cylindres.

2e temps : Compression

Tout au long de cette étape, les deux soupapes sont fermées. Le volume de la chambre de combustion diminue à mesure que le piston se déplace du PMB vers le PMH. L'air admis est alors comprimé, sa pression et sa température augmentent considérablement. L'élévation de la pression dans le cylindre dépend du rapport volumétrique : en général, à l'issue de cette phase, la pression de l'air atteint de 10 à 25 fois sa valeur initiale.

3e temps : Détente

Le combustible liquide est injecté sous forme de très fines gouttelettes lorsque le piston atteint le PMH (le carburant est parfois injecté avant le PMH, ainsi la combustion s'effectue "à cheval" entre la fin de la compression et le début de la détente). Au contact de l'air chaud comprimé, ce carburant commence à s'évaporer puis s'enflamme spontanément. La combustion libère l'énergie du carburant. Il en résulte une augmentation de la pression des gaz dans le cylindre. Le piston, sous l'effet de cette pression, est repoussé jusqu'au PMB. C'est

pendant cette phase que l'énergie mécanique est transmise à l'arbre moteur via le piston et le système bielle-manivelle. Le troisième temps s'achève lorsque le piston atteint le PMB.

4e temps : Echappement

Au PMB, la soupape d'échappement s'ouvre laissant s'échapper les gaz brûlés sous l'effet de leur pression et du déplacement du piston. Lorsque le piston se retrouve au PMH, un nouveau cycle peut alors commencer. Cette étape joue un rôle primordial ; En effet, si l'expulsion des gaz brûlés est incomplète, la quantité d'air frais admissible au cycle suivant sera moindre et le mélange n'aura pas la même composition. La variation de la richesse du mélange d'un cycle à l'autre est l'une des causes de la dispersion cyclique et, par conséquent, de bruits et de vibrations indésirables.

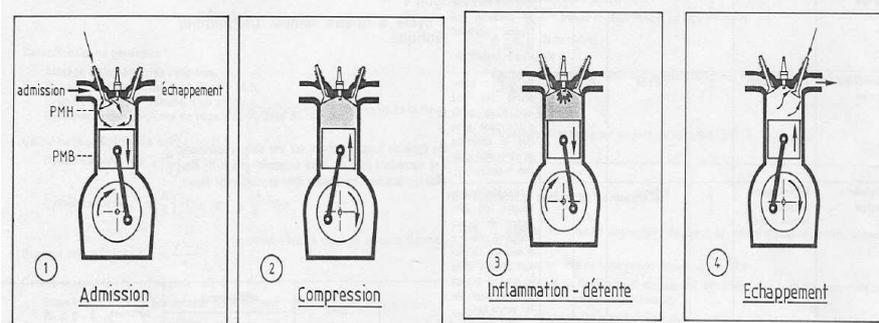


Figure 2.9 : Cycle à 4 temps

2.1.1.4 Particularités du moteur Diesel

La particularité du moteur Diesel se situe au niveau de l'allumage du mélange air-carburant. Le mélange est comprimé jusqu'à ce qu'il dépasse sa température d'auto-inflammation. Le moteur Diesel nécessite un rapport volumétrique élevé, de l'ordre de 1/15 à 1/25, pour que cette auto-inflammation puisse se produire. A titre de comparaison, le rapport volumétrique d'un moteur à essence est de l'ordre de 1/5 à 1/10. Ce type de moteur ne nécessite pas d'atteindre des pressions aussi élevées puisque la combustion est initiée par un arc électrique ; on parle donc de moteur à allumage commandé. L'allumage se produit toujours au même endroit, là où la bougie produit l'arc électrique, et le front de flamme se propage progressivement dans la chambre. Les pressions atteintes sont beaucoup plus élevées, et l'inflammation est beaucoup plus brutale dans les moteurs Diesel ; ces moteurs doivent donc posséder une structure massive capable de résister à des forces colossales, ce qui entraîne un coût de production élevé.

2.1.1.5. Comparaison entre moteur Diesel et essence

La différence essentielle entre un moteur du type diesel et un moteur à essence réside dans le mode d'inflammation du carburant et de la caractéristique d'autoinflammation de celui-ci. Si dans une masse d'air suffisamment comprimée pour que sa température atteigne une valeur déterminée, on introduit un combustible finement pulvérisé, la combustion se déclenche par auto-inflammation.

Le phénomène d'auto-inflammation résulte lui-même :

- d'une part, d'un rapport volumétrique très élevé : 16/1 à 24/1
- d'autre part, de la haute température engendrée par ce rapport. 600°C.

Le déroulement du cycle à quatre temps du moteur Diesel diffère peu de celui du moteur à allumage commandé (essence) mais les conditions de combustion sont très différentes. Le moteur Diesel opère avec un large excès d'oxygène contrairement au moteur à essence dont le mélange carburant/comburant est proche de la stœchiométrie. Il faut noter que la température des gaz d'échappement d'un moteur Diesel est comprise entre 150 et 500°C, pour un moteur essence la gamme de température est plus élevée (600 à 800°C). Mais, la différence essentielle entre ces deux types de moteur réside dans le mode d'inflammation du carburant. Pour le moteur Diesel, lorsque l'on introduit le gazoil finement pulvérisé, la combustion se déclenche par auto-inflammation tandis que pour le moteur essence la combustion est provoquée par l'étincelle d'une bougie. Ainsi, pour le Diesel, la combustion est beaucoup plus hétérogène car le mécanisme de mélange turbulent entre le combustible et l'air se traduit par des concentrations d'espèces chimiques et par des températures très variables au sein de la chambre de combustion. Cette hétérogénéité est d'ailleurs à l'origine de la formation des NOx dans les zones de très haute température et de la formation des particules de suies dans les zones localement déficitaires en oxygène [24].

2.1.2 Caractéristiques de la combustion diesel

2.1.2.1 Définitions

La combustion est à l'origine de la force motrice d'un moteur, c'est à travers d'elle que l'énergie contenue dans le carburant se libère. Les performances d'un moteur à combustion interne dépendent intrinsèquement de la capacité à générer cette réaction au bon moment et dans les meilleures conditions ; puis de canaliser la puissance qui en dérive. La caractéristique principale de la combustion dans un moteur à allumage par compression, ce qui fait aussi l'originalité du brevet de Rudolf Diesel, réside en l'introduction du carburant à l'état liquide dans le cylindre rempli d'air chaud fortement comprimé. Selon ce mode opératoire, la combustion revêt un caractère assez complexe. Pour extraire les principaux mécanismes qui la contrôlent, la définition phénoménologique proposée selon [29] est un point de départ adéquat:

On peut définir la combustion comme étant un ensemble de réactions chimiques, généralement de type bien spécifique, constituant globalement une oxydation et donc (fortement) exothermique pouvant entrer en interaction avec certains phénomènes physiques, se manifestant ainsi comme des phénomènes mixtes ou régimes de combustion.

a. Théorie de base de la combustion

La Combustion : science pluridisciplinaire (chimie, mécanique des fluides, thermodynamique, modélisation informatique, physique des systèmes dynamiques...).

La Combustion : réaction entre un combustible et l'oxygène pur, l'oxygène dilué (air) ou une espèce chimique riche en oxygène (ozone, peroxyde d'hydrogène, acide nitrique) Réaction chimique globalement et généralement fortement exothermique, autonome, susceptible de s'accélérer brutalement et d'être accompagnée d'émission de rayonnements (visible, proche UV et proche IR).

Le dégagement de chaleur de la réaction de combustion : expansion rapide du milieu réactionnel ou forte augmentation de pression (jusqu'à l'explosion), Combustion lente (phase du processus qui précède l'éventuelle accélération brutale de la réaction) ou vive (phase du

processus débutant avec l'accélération brutale et caractérisée par une vitesse réactionnelle élevée, formation d'une flamme).

b. Applications industrielles de la combustion

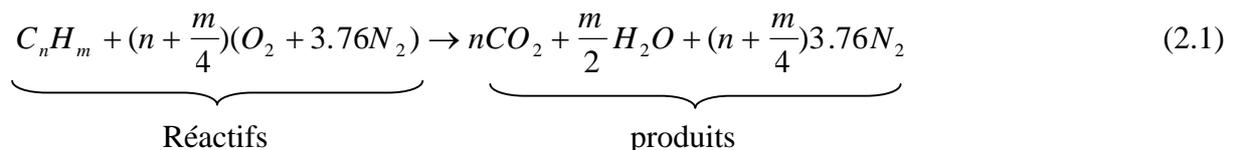
- Moteurs à combustion interne (essence, Diesel)
- Turbine à gaz
- Chaudières industrielles et domestiques
- Statoréacteur, turboréacteur

La conversion d'énergie chimique potentielle en énergie thermique, mécanique, rayonnante, électrique. Utilisée, directement ou indirectement, pour le chauffage, la propulsion, la production d'électricité.

La combustion est aujourd'hui un des principaux moyens de conversion de l'énergie. Elle est utilisée dans de nombreux systèmes pratiques aussi bien pour produire de l'énergie thermique (chaudières ou fours domestiques et industriels) ou de l'électricité (centrales thermiques), que pour le transport (moteurs automobiles et aéronautiques, moteurs fusée, ...) ou encore la destruction de déchets (incinérateurs). La combustion peut être caractérisée comme une (ou des) réaction(s) irréversible(s) fortement exothermique(s) entre un combustible (ou réducteur) et un comburant (ou oxydant) selon le schéma global :



Une réaction complète de combustion est représentée par une équation chimique ou équation de combustion. Celle-ci traduit la relation entre la composition des réactifs présents dans le cylindre et celle des produits formés à l'issue de la combustion. L'équation chimique comporte deux membres, les réactifs sont placés dans le membre de gauche et les produits dans le membre de droite, elle respecte le principe de conservation de la masse de chaque molécule. Par exemple, la réaction globale de combustion d'un hydrocarbure C_nH_m avec une quantité stœchiométrique d'air obéit à l'équation [29]:



La relation (2.1) ne reflète pas exactement la combustion d'un carburant dans l'air. Premièrement, tous les gaz qui composent l'air atmosphérique ne sont pas pris en compte (H_2O , CO_2 , gaz rares). Deuxièmement, le combustible est représenté par une formule unique alors que sa formule réelle est plus complexe. A l'issue de cette réaction, l'hydrogène s'est combiné à l'oxygène pour former de l'eau (sous forme de vapeur) et l'oxydation du carbone a produit du dioxyde de carbone ; en revanche, l'azote n'a pas subi de transformations.

Le rapport stœchiométrique, Φ_s , (voire eq 2.2), correspondant au rapport massique air-carburant dans les conditions d'équilibre chimique, est calculé à partir des masses molaires de chaque élément :

$$M_{O_2} = 38 \text{ g/mol}, M_{N_2} = 28.16 \text{ g/mol}, M_H = 1.008 \text{ g/mol}, M_C = 12.011 \text{ g/mol}$$

Il dépend uniquement de la composition du carburant (c'est à dire de la teneur massique en carbone et en hydrogène) [29]:

$$\phi_s = \frac{(n + \frac{m}{4}) \times (32 + 3.76 \times 28.16)}{12.011 \times n + 1.008 \times m} \quad (2.2)$$

c. Caractérisation du mélange carburé

c.1 Rapports air-carburant et carburant-air

Considérons un mélange carburé de masse $m = m_f + m_{air}$, ou m_f et m_{air} correspondent respectivement aux masses de carburant et d'air. La caractéristique la plus basique de ce mélange est le rapport air-carburant ou son inverse [29], le rapport carburant-air ; on note :

$$\text{rapport air - carburant} \left(\frac{m_{air}}{m_f} \right) = \frac{(\text{masse d'air})}{(\text{masse de combustible})} \quad (2.3)$$

Et

$$\text{rapport carburant - air} \left(\frac{m_f}{m_{air}} \right) = \frac{(\text{masse de combustible})}{(\text{masse d'air})} \quad (2.4)$$

c.2 Richesse du mélange carburé :

Les relations (2.3) et (2.4) sont valables pour tous types de combustible mais elles ne tiennent pas compte de la composition de ceux-ci. Or la relation (2.2) indique clairement l'importance de la nature du combustible sur le rapport carburant-comburant à la stoechiométrie. Pour une meilleure caractérisation du mélange carburé, on introduit une variable sans dimension : la richesse qui est définie par le rapport carburant-comburant réel relatif au rapport stoechiométrique Φ_s . Ainsi, la richesse ϕ quantifie l'écart entre le mélange contenu dans le cylindre et celui qui mènerait à une oxydation complète. La richesse est donnée par la relation [29]:

$$\phi = \frac{\left(\frac{m_f}{m_{air}} \right)_{réel}}{\left(\frac{m_f}{m_{air}} \right)_{stoechiométrie}} = \frac{1}{\phi_s} \left(\frac{m_f}{m_{air}} \right)_{réel} \quad (2.5)$$

On rencontre parfois dans la littérature l'inverse de la richesse ϕ ; c'est le coefficient d'excès d'air λ :

$$\lambda = \phi^{-1} = \frac{\left(\frac{m_{air}}{m_f} \right)_{réel}}{\left(\frac{m_{air}}{m_f} \right)_{stoechiométrie}} \quad (2.6)$$

Les moteurs à combustion interne ne fonctionnent pas toujours dans les conditions de la stoechiométrie ($\Phi = \lambda = 1$). Le mélange est alors qualifié de :

- mélange pauvre pour une carence en carburant $\phi < 1$ et $\lambda > 1$
- mélange riche en cas d'excès de carburant $\phi > 1$ et $\lambda < 1$

Pour un moteur à allumage commandé la richesse idéale avoisine généralement la valeur stoechiométrique, dans le cas des moteurs à allumage par compression, le mélange est toujours excédentaire en air (mélange pauvre).

Pour les moteurs diesel et réacteurs d'avion :

Moteurs mélange pauvre ($\phi = 0,10$ à $0,80$), milieu très hétérogène.

Pour les moteurs essence selon les technologies :

Mélange riche, stœchiométrique ou pauvre ($\varphi = 0,98$ à $1,02$).

Moteur HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) :

Mélange pauvre et homogène ($\varphi = 0,5$).

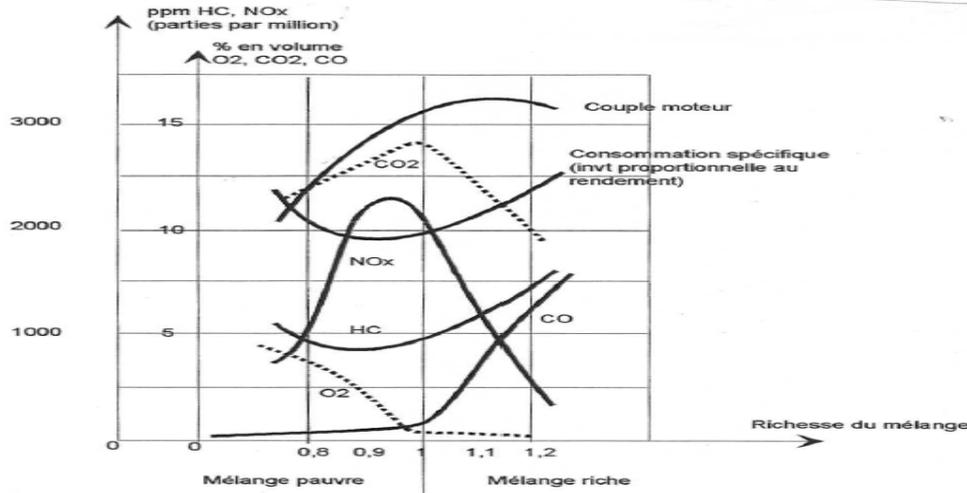


Figure 2.10 : Concentration des produits de combustion en fonction de la richesse du mélange

d. Formation du mélange air-carburant

Une fois l'injection réalisée, il se crée un mélange, entre l'air présent dans la chambre de combustion et le carburant, dont les qualités doivent être propices à la propagation d'une flamme. La première étape de formation de ce mélange est l'entraînement de l'air ambiant vers l'intérieur du spray. Ensuite, sous l'effet des échanges thermiques entre l'air et le liquide, les gouttes se vaporisent pour finalement former un mélange gazeux inflammable. L'effet d'un impact éventuel du spray sur une paroi de la chambre de combustion doit également être pris en compte car il peut entraîner des modifications dans le processus de formation du mélange.

d.1 Entraînement d'air

L'introduction d'un spray à haute vitesse dans la chambre de combustion modifie les caractéristiques des mouvements aérodynamiques résultant de l'admission d'air dans le cylindre du moteur. La colonne de fluide en cours d'atomisation primaire ou secondaire génère un brassage de l'air environnant jusqu'à lui imposer une vitesse proche de la sienne par transfert d'énergie cinétique. Ce phénomène, appelé entraînement d'air, est illustré par la figure 2.11 représentant le mouvement aérodynamique induit par un jet cylindrique pénétrant dans une atmosphère initialement au repos.

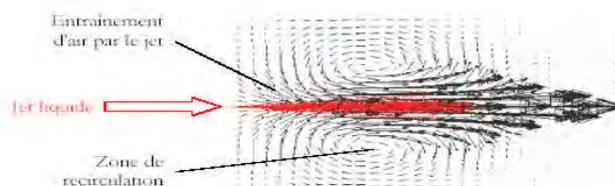


Figure 2.11 : Entraînement d'air par un jet liquide (document PSA Peugeot Citroën)

Turbulence due au spray

Par effet de cisaillement, la pénétration d'un jet liquide dans l'air tend à casser les structures turbulentes initiales pour en constituer d'autres. La turbulence générée par le spray est alors très énergétique et conditionne les mouvements aérodynamiques autour des gouttelettes et, par là même, leur taux d'évaporation.

La propension des gouttes à suivre l'écoulement turbulent détermine la capacité de mélange entre le carburant et l'air.

Les processus d'entraînement d'air et de modification de la vitesse turbulente sont des phénomènes interdépendants qui contrôlent le développement du jet. Il est par conséquent difficile de les découpler et de les hiérarchiser

d.2 Evaporation du carburant

L'évaporation d'une goutte est un processus résultant de deux transferts couplés. Le premier est un transfert de masse, par convection et diffusion entre la goutte de liquide et l'environnement gazeux. Le second est un transfert de chaleur, en sens inverse, qui s'effectue par conduction et convection.

Le taux d'évaporation dépend des propriétés physiques du liquide ainsi que des conditions locales de pression et de température du gaz pour que s'établissent les flux conductif, convectif et diffusif. L'intensité de turbulence locale joue alors un rôle important sur l'évaporation d'une goutte puisque elle est dissipatrice d'énergie.

d.3 Interactions avec les parois

L'injection de carburant dans un moteur, qu'il soit à injection directe ou pas, se fait dans un milieu très confiné. Il est donc nécessaire de s'intéresser également à l'influence des parois sur la formation du mélange.

D'une manière générale, l'effet d'un dépôt de carburant liquide sur les parois d'une chambre de combustion doit être considéré comme négatif sur la formation d'un prémélange inflammable. Un film de gazole ou d'essence est en effet plus difficile à évaporer qu'une goutte de même volume. Ces dépôts sont des sources importantes de formation d'hydrocarbures imbrûlés et c'est pourquoi ils doivent être évités ou au moins minimisés.

On fait généralement l'hypothèse que le spray se développe sous la forme d'un cône [29] (Fig 2.12), la zone centrale liquide étant enveloppée par des couches de caractéristiques différentes. Dans la couche la plus proche du jet central, le mélange est hétérogène, il s'apparente à un brouillard dense de très fines gouttelettes non encore évaporées. A la Périphérie, la vapeur de combustible se mélange avec l'air pour former des couches homogènes dont la distribution de richesse varie de l'infini (gazole liquide), à proximité des régions hétérogènes, à zéro (air pur) à la limite extérieure du cône.

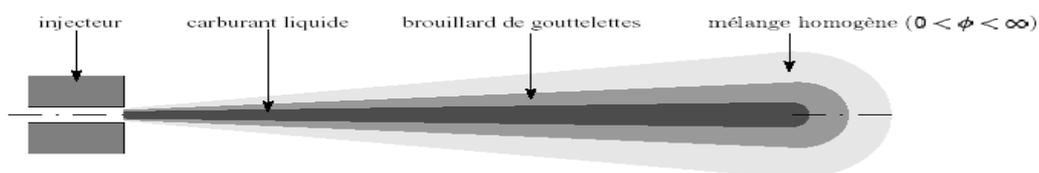


Figure 2.12 : Représentation simplifiée d'un jet de gazole

Remarque : La notion de richesse est valable uniquement quand le mélange est homogène (c'est à dire que les réactifs sont à l'état gazeux) ; or l'hétérogénéité du mélange liée au mode d'injection ne permet pas de l'employer au sens strict. Elle peut cependant caractériser certaines régions du cylindre où le mélange est homogène. Toutefois, pour désigner le

mélange contenu dans le cylindre d'un moteur Diesel à injection directe, il est préférable de faire mention de la richesse globale. On admet par ailleurs que le moteur à allumage par compression fonctionne à richesse globale variable.

e. Caractéristiques de la combustion

e.1 Combustion rapide

La combustion rapide est une forme de combustion au cours de laquelle de grandes quantités de chaleur et d'énergie sous forme de lumière sont relâchées, donnant naissance au feu. Elle est utilisée dans certaines machines telles que les moteurs à combustion interne ou les armes thermobariques.

e.2 Combustion lente

La combustion lente est une réaction se réalisant à des températures peu élevées.

- On peut citer le cas de la respiration cellulaire : cette lenteur due à des enzymes spécifiques permettent d'augmenter les réactions d'oxydoréduction et ainsi d'obtenir un très bon rendement par récupération d'une grande partie de l'énergie.

e.3 Combustion complète

Lors d'une combustion complète, le réactif réagira avec le comburant jusqu'à former des produits qui ne pourront plus être oxydés, c'est-à-dire que ces produits ne peuvent plus réagir avec le comburant: les produits ont atteint un degré de stabilité qu'une réaction de combustion ne peut modifier. Dans le cas d'un hydrocarbure réagissant avec le dioxygène, les produits de combustion sont le dioxyde de carbone et de l'eau. Il existe pour chaque élément un produit de combustion stable, ainsi une combustion complète fournit les mêmes produits de réactions quels que soient les réactifs.

Une combustion complète permet d'obtenir la quantité maximale d'énergie disponible par une substance et cette énergie est définie comme étant le pouvoir calorifique.

e.4 Combustion turbulente

La combustion turbulente est une combustion caractérisée par des flux de chaleur. Elle est souvent utilisée dans l'industrie (par exemple, les turbines à gaz, les moteurs diesel...) car la chaleur facilite l'opération de mélange entre le combustible et l'oxydant.

5. Combustion incomplète

La combustion incomplète a lieu quand il n'y a pas assez de comburant pour permettre la réaction complète du combustible ou lorsque le temps de contact à une température rendant la combustion possible est trop faible. Elle produit donc des résidus de combustion, sous forme de cendres qui génèrent des fumées, dont certains composés sont très toxiques pour l'homme et pour l'environnement tel que le monoxyde de carbone (gaz mortel), des particules de carbone pur (suie, goudron, cendres), des oxydes d'azote, des hydrocarbures (cancérogènes tels le benzène, ou fortement toxiques tels les HAP), des composés organiques volatiles.

La réaction de combustion est habituellement incomplète et seul contrôle des conditions permet d'obtenir une combustion complète, telle que la combustion en présence d'un excès d'oxygène à haute température. En cas de combustion incomplète, il est possible de traiter les fumées une seconde fois pour réduire les imbrûlés comme dans le cas des moteurs d'automobiles où les pots d'échappement et les filtre à particule permettent une seconde combustion à plus faible température grâce à des catalyseurs.

2.1.2.2 Modélisation de la cinétique chimique de combustion

a. la Modélisation : généralités et objectifs.

L'équation de combustion (1) donne un bilan de matière entre les réactifs et les produits, mais elle ne retranscrit pas le mécanisme réel de la transformation car l'oxydation des produits ne se déroule pas en un seul "mouvement". Si c'était le cas, lors de la réaction (1.5), la molécule d'hydrocarbure aurait rencontré simultanément 26 molécules d'air ; or la probabilité d'une telle collision est quasiment nulle. En réalité, cette réaction passe par des centaines d'étapes intermédiaires ou réactions élémentaires qui s'enchaînent jusqu'à l'épuisement complet des réactifs. La combustion simple de l'hydrogène dans l'oxygène fait appel à 17 étapes élémentaires. Dans le cas de la réaction méthane-oxygène, plus de 150 réactions réversibles ont été identifiées [29], soit 300 au total. Pour des hydrocarbures plus complexes le nombre de réactions élémentaires augmente considérablement.

Le premier objectif de la modélisation est de reproduire des résultats expérimentaux à partir d'un mécanisme chimique postulé au préalable. Suivant que les données cinétiques à modéliser seront globales (chaleur de réaction, vitesse propagation de flamme, délais d'auto-inflammation,...) ou détaillées (profils d'évolution des espèces moléculaires et radicalaires...). On distingue différents types de mécanismes chimiques, les mécanismes moléculaires (globaux et semi - globaux) et les mécanismes détaillés. La comparaison entre les résultats issus de la modélisation et les mesures expérimentales permet de tester le mécanisme postulé dans des conditions expérimentales bien définies. Lorsque l'accord modélisation / expérience est satisfaisant, le mécanisme est alors validé. Dans le cas contraire, les désaccords observés permettent d'optimiser et d'affiner le schéma cinétique. L'objectif final reste la volonté de disposer d'un mécanisme chimique plus ou moins détaillé, validé dans une gamme de conditions expérimentales la plus large possible, et permettant de prévoir l'évolution d'un système chimique réactif spécifique.

L'évolution des performances des calculateurs et les progrès obtenus dans la description des mécanismes de combustion des hydrocarbures permettent aujourd'hui de résoudre des systèmes complexes d'équations cinétiques, correspondant à des schémas cinétiques détaillés comportant plusieurs centaines d'espèces et de réactions. Ces schémas s'appuient sur l'hypothèse que les combustibles complexes brûlent suivant des successions de mécanismes élémentaires relativement bien connus valables pour des combustibles plus simples. Pour résoudre les systèmes cinétiques, des codes de calcul performants sont aujourd'hui disponibles, tels CHEMKIN II (Kee et col., 1993).

La modélisation peut donc intervenir à différents niveaux : estimation d'une chaleur de réaction, calcul d'une vitesse de propagation de flamme, détermination des profils d'évolution des espèces présentes dans le milieu réactif, ... Dans le cas de l'étude de flammes plates prémélangées (Fig 2.13), l'objectif est d'estimer l'évolution de la concentration des espèces moléculaires et réactives dans les différentes zones du milieu réactionnel (gaz frais, zone réactionnelle et gaz brûlés).

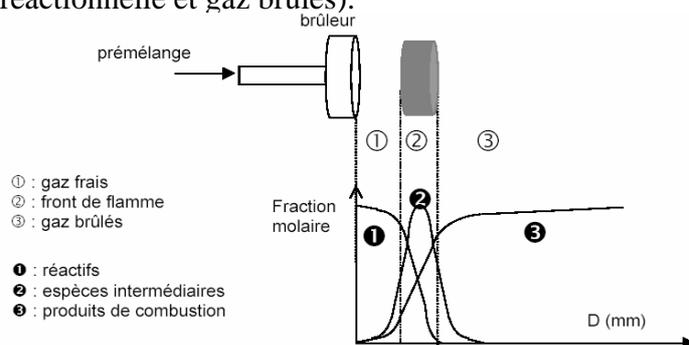


Figure 2.13 : Structure schématique flamme plate de prémélange

Les réactions élémentaires d'un processus de combustion ne mettent en jeu que deux (ou trois) partenaires parmi lesquels se trouvent des molécules de carburant, de comburant ou de produits intermédiaires mais aussi des éléments indispensables, les radicaux libres. Un radical libre est une atome ou une combinaison d'atomes qui possède un (au plus deux ou trois) électron de valence non-apparié. Les radicaux s'engagent facilement dans des réactions avec les molécules de co-réactants pour produire de nouveaux radicaux qui, à leur tour, vont participer à ce processus. L'oxydation complète des produits passe donc par des réactions en chaîne qui, selon la nature de leur contribution à la réaction globale, se classent parmi l'une des quatre catégories (Tableau 2.1) ci-dessous [29] :

1. *Les réactions d'initiation* qui produisent les premiers radicaux libres nécessaires à la propagation de la chaîne. L'Energie d'activation de ces réactions est très élevée. Elle doit être suffisante pour rompre les liaisons covalentes des molécules initialement présentes dans le cylindre.

2. *Les réactions de propagation* qui sont les seules responsables de la transformation des réactifs (gazole et air) en produits. La propagation se caractérise par une variance radicalaire nulle et compte au minimum deux étapes, mais elle peut théoriquement se poursuivre à l'infini. Elle s'achève avec la reformation du radical propageur R_x (Tableau 2.1).

3. *Les réactions de ramification* qui prennent le relais de l'initiation lorsque la concentration de radicaux libres est suffisante. La ramification assure la multiplication de ces derniers, elle résulte de la collision entre un co-réactant et un radical (ramification directe) ou un produit intermédiaire de combustion (ramification indirecte).

4. *Les réactions de rupture* sont responsables de la disparition des radicaux libres et interviennent soit en phase homogène, soit en phase hétérogène. Dans le premier cas, les radicaux se recombinaient pour former un produit stable, la seconde cause de disparition étant due à l'interaction avec les parois du cylindre dont le matériau comporte des valences libres qui peuvent capter les radicaux [29].

Réaction	Equation	Variance radicalaire
initiation	$A(\text{ou } B) + M \longrightarrow 2R + M$	$\Delta_R = +2$
propagation	$A + R_x \longrightarrow C + R_y$ $B + R_y \longrightarrow D + R_x$	$\Delta_R = 0$
ramification directe	$R + A(\text{ou } B) + M \longrightarrow 3R$	$\Delta_R = +2$
ramification indirecte	$A(\text{ou } B) + E \longrightarrow 2R$	$\Delta_R = +2$
rupture	$R_x + R_y + M \longrightarrow \underbrace{R_x R_y}_{\text{stable}} + M$	$\Delta_R = -2$
rupture sur paroi	$R + \text{paroi} \longrightarrow \text{produits stables}$	$\Delta_R = -2$

Tableau 2.1 : Classement et description des différentes réactions en chaînes radicalaire. Les lettres **A** et **B** désignent les réactifs, **C** et **D** les produits. **R_x** et **R_y** sont les radicaux et **R** représente un radical non spécifié. E est une molécule intermédiaire et **M** une espèce quelconque (molécule ou radicale).

b. Mécanismes globaux, semi-globaux et détaillés

b.1 Mécanismes globaux

Ces schémas, d'une grande simplicité, mettent en jeu un nombre très limité d'espèces et de réactions. Ils sont appréciables uniquement dans les conditions pour lesquelles ils ont été élaborés. Généralement basés sur des hypothèses simplificatrices, ils ne donnent pas toujours des résultats précis. Parmi les schémas empiriques, les plus simples font appel à une seule

équation mettant en jeu quatre espèces chimiques $n_1 \text{RH} + n_2 \text{O}_2 \rightarrow n_3 \text{CO}_2 + n_4 \text{H}_2\text{O}$ avec une vitesse de réaction de la forme $A T^n \exp(-E/RT) [\text{RH}]^a [\text{O}_2]^b$. Selon les auteurs, cette réaction peut être assimilée à une réaction élémentaire et dans ce cas $a = n_1$ et $b = n_2$, mais alors A et E sont fonction de la richesse, ou bien a et b sont différents de n_1 et n_2 et A et E sont des constantes. Ses domaines d'application sont limités à la prévision des vitesses de flammes et de certaines limites d'inflammabilité (pauvre et riche). Un tel modèle est incapable de prévoir l'évolution des espèces intermédiaires stables ainsi que des délais d'auto-inflammation; de plus il conduit à une température finale adiabatique trop élevée.

Pour prendre en compte l'évolution de l'intermédiaire CO , qui devient non négligeable pour des richesses élevées, on ajoute une étape réversible (2,-2) au mécanisme moléculaire à une étape :



Les améliorations concernent le calcul de CO à l'équilibre ainsi que la température adiabatique. Par contre ce type de modèle est incapable de calculer les délais d'autoinflammation. Pour tenir compte de l'évolution de l'hydrogène H_2 , il est nécessaire d'utiliser un mécanisme à 3 équations, en ajoutant la réaction $\text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2 = \text{H}_2\text{O}$.

b.2 Mécanismes semi-globaux

Légèrement différente, cette approche consiste à distinguer deux étapes dans la réaction, une première où le combustible est oxydé en CO et H_2 et une seconde où sont fabriqués CO_2 et H_2O . C'est ainsi que certains auteurs proposent un modèle où une première réaction $\text{C}_n\text{H}_m + n/2 \text{O}_2 = n \text{CO} + m/2 \text{H}_2$ est suivie d'un schéma cinétique détaillé correspondant à l'oxydation des systèmes H_2/O_2 et CO/CO_2 (environ 30 réactions élémentaires réversibles). Enfin, certains mécanismes prennent également en compte la chimie d'oxydation des hydrocarbures intermédiaires, tels C_2H_4 par exemple.

b.3 Mécanismes chimiques détaillés

Un mécanisme détaillé peut être écrit en considérant toutes les espèces intermédiaires possibles et toutes les réactions possibles entre ces espèces. Cette démarche n'est pas envisageable car le nombre de réactions deviendrait rapidement énorme, et ces réactions ne seraient pas nécessairement toujours permises thermodynamiquement.

Les réactions impliquées dans les schémas réactionnels détaillés des mécanismes de basse et de haute température sont généralement prises en compte. Leurs paramètres cinétiques sont issus de travaux antérieurs effectués sur le même système réactionnel, de mesures directes ou indirectes de constantes de vitesse de réactions élémentaires publiées dans la littérature (compilations de Baulch, NBS, NIST), de calculs ou d'estimations théoriques. A l'heure actuelle un grand nombre de constantes de vitesse n'ont pas été mesurées dans le domaine de température des flammes. De plus des incertitudes, des contradictions et des incohérences existent entre certaines données existantes.

Certains schémas cinétiques d'oxydation dans les flammes ainsi qu'un grand nombre de constantes de vitesse sont encore mal connus ou inconnus, par exemple dans le cas des aromatiques et des composés organiques volatils. La plupart des constantes de vitesse connues sont données avec une incertitude comprise entre 10 et 100. Certaines constantes de vitesse, de réactions de recombinaison, d'addition ou de dissociation par exemple, peuvent également être calculées.

2.1.2.3 Auto-inflammation du carburant

En peut citer différents processus d'inflammation :

- inflammation thermique : chaleur apportée par une source externe de chaleur (étincelle, compression, parois chaudes d'une enceinte...)
- inflammation chimique : sous des conditions isothermes, intermédiaires qui accélèrent la réaction jusqu'à l'inflammation.
- inflammation spontanée ou auto-inflammation : augmentation de la température d'un mélange combustible gazeux par compression adiabatique ou isentropique.
- inflammation forcée : source externe de chaleur (fil chaud, étincelle, particule incandescente, flamme pilote, laser focalisé...). Une flamme est initiée localement près de la source puis se propage.

a. Mécanisme d'auto- inflammation

Si le mélange de combustible et d'air se trouve exposé à une température progressivement croissante, il s'enflamme spontanément lorsqu'une température seuil est dépassée. C'est le mécanisme d'auto-inflammation. Cette température seuil est dite température d'auto-inflammation, souvent notée TAI.

Sans rentrer dans les détails compliqués de ce mécanisme chimique complexe, on peut le décrire qualitativement de la manière suivante :

— pour des températures encore inférieures à la TAI, le combustible mélangé à l'air s'oxyde pour donner des peroxydes dont la concentration croît avec la température

— à partir du moment où une concentration critique en peroxydes est atteinte, les réactions chimiques deviennent instables. Par un mécanisme de réactions en chaîne, elles s'emballent pour donner une combustion vive.

La température qui donne lieu à l'emballement des réactions est très variable selon la nature du combustible et sa structure moléculaire.

La TAI peut être fortement modifiée par la présence de petites quantités d'additifs. Des composés nitrés ou des peroxydes introduisent des molécules déjà oxydées et peu stables qui abaissent sensiblement les TAI. Ils peuvent être utilisés pour améliorer l'aptitude à l'auto-inflammation des gazoles (additifs procétane), mais ils peuvent poser des problèmes de stabilité lors du stockage du combustible. Inversement, la présence d'halogènes retarde l'apparition des réactions en chaîne, ce qui relève très sensiblement la TAI. C'est le principe de fonctionnement des extincteurs à hydrocarbures halogénés.

Les TAI de quelques composés classiques sont données ci-dessous [29] :

hydrogène	570 °C	méthane	580 °C
<i>n</i> -butane	420 °C	isobutane	420 °C
<i>n</i> -octane	220 °C	isooctane	670 °C

Ces quelques valeurs montrent la grande variabilité de la TAI. Les structures linéaires des *n*-paraffines donnent des TAI très faibles alors que les structures ramifiées des isoparaffines donnent des TAI très élevées.

b. Délai d'allumage

Dans le cas du moteur Diesel, l'auto-inflammation n'est pas instantanée, Le laps de temps qui s'écoule entre le début de l'injection et l'apparition de la flamme est appelé *délai d'inflammation*.

Plusieurs phénomènes ont lieu pendant le délai d'allumage [29]:

— le combustible est injecté à une température faible (30 à 80°C) dans les gaz dont la température est élevée par compression au-dessus de la TAI

— le mélange entre les gaz chauds et le jet de combustible chauffe les gouttelettes jusqu'à leur température d'ébullition, apporte la chaleur nécessaire pour former de la vapeur de combustible et pour chauffer celle-ci au voisinage de la TAI. Cette première phase

correspond à la partie physique du délai d'allumage où les températures sont trop faibles pour que les réactions d'oxydation puissent avoir lieu de manière appréciable

— lorsque de la vapeur atteint des températures supérieures à la TAI, un petit laps de temps est encore nécessaire pour que la concentration critique en peroxydes puisse être atteinte et provoquer l'inflammation. Cette seconde phase est liée essentiellement aux phénomènes chimiques

— l'allumage a lieu en périphérie du jet, en un ou plusieurs points, là où les concentrations critiques en peroxydes sont d'abord atteintes. Au voisinage de ce point, les concentrations en peroxydes sont proches du seuil critique. La chaleur dégagée par la combustion d'un premier point permet donc très rapidement d'enflammer son voisinage immédiat qui est presque prêt à s'enflammer spontanément ;

— cela explique que la flamme se propage très rapidement, en 1 à 2 degrés vilebrequin, à l'ensemble du jet.

Le phénomène d'auto-inflammation englobe deux délais, le premier s'apparente à un temps physique et le second à un temps chimique. Il n'y a pas véritablement de séparation entre ces deux composantes car les processus d'ordre physique et chimique ne sont pas consécutifs, ils se déroulent en parallèle et s'influencent l'un l'autre :

- Le délai physique correspond au temps qui s'écoule entre l'introduction du gazole et l'instant où il existe localement une région du cylindre au sein de laquelle le mélange est propice à l'auto-inflammation. Les principaux phénomènes intervenant pendant ce délai sont : l'atomisation du carburant, la vaporisation et le mélange en phase homogène du carburant avec l'air.
- Le délai chimique intervient quand un mélange homogène air-carburant est formé. Il représente le laps de temps entre le moment où les réactifs sont en phase gazeuse et l'instant d'initiation de la combustion.

La plupart du temps le délai d'auto-inflammation s'exprime par une équation de corrélation sous forme de loi d'Arrhenius (eq 2.7) [29] :

$$\tau_{ai} = A_p^{-n} \exp\left(\frac{E_A}{RT}\right) \quad (2.7)$$

Où τ_{ai} est le délai d'auto-inflammation (en seconde mais on l'exprime fréquemment en degrés de rotation vilebrequin. T la température moyenne de la réaction et P la pression. E_A est l'énergie d'activation nécessaire à l'initiation du processus cinétique et R la constante molaire des gaz parfaits. A et n sont des constantes positives déterminées expérimentalement sur des machines à compression rapide [29].

L'expression (2.7) ne reflète pas exactement le délai d'auto-inflammation dans le moteur Diesel puisque les essais sont réalisés pour des mélanges homogènes. Par conséquent, elle ne tient pas compte de tous les phénomènes physiques qui participent à la réaction complète. L'équation du délai peut néanmoins s'étendre à la combustion dans le moteur Diesel ; dans ce cas, les constantes A et n sont relatives à la fois aux mécanismes physiques et chimiques. Cette approximation induit un facteur d'erreur plus important.

L'importance du délai d'allumage sur le déroulement de la combustion conduit à utiliser, pour les moteurs Diesel rapides, du gazole, dont l'aptitude à l'auto-inflammation est spécifiée sous forme de l'indice de cétane.

c. Indice de cétane

L'indice de cétane permet de mesurer la qualité de combustion d'un gazole. L'indice se rapporte au délai d'inflammation - la période qui s'écoule entre le début de l'injection de carburant et le début de la combustion.

Une combustion de bonne qualité commence par une inflammation rapide suivie d'une combustion régulière et complète du carburant. Plus l'indice de cétane est élevé, plus le délai d'inflammation est court et meilleure est la qualité de la combustion. Inversement, les carburants de faible indice de cétane sont lents à s'enflammer puis brûlent trop rapidement, entraînant des gradients de pression élevés.

Si l'indice de cétane du gazole est trop faible, ces mauvaises caractéristiques de combustion produisent un bruit excessif du moteur, augmentent les émissions de gaz d'échappement et réduisent les performances du véhicule tout en accentuant les contraintes exercées sur le moteur.

L'aptitude à l'auto-inflammation d'un carburant pour moteur diesel est exprimée par l'indice de cétane. Dans ce type de moteur, on injecte le carburant sous haute pression dans l'air comprimé et l'inflammation naît spontanément après un temps très court, de l'ordre de 1 milliseconde. Ce processus est favorisé par accroissement du taux de compression qui peut varier entre 15 et 22, mais il faut en outre que le carburant présente une structure chimique favorable à l'auto-inflammation. Cette qualité s'exprime par l'indice de cétane. L'échelle des indices de cétane varie de 0 à 100. On attribue l'indice 0 à l' α -méthyl-naphtalène (aromatique) et l'indice 100 à l'hexadécane ($C_{16}H_{34}$).

L'indice de cétane IC est défini très précisément par rapport aux pourcentages de chacun des composants de référence par l'équation 2.8 [29] :

$$IC = \text{pourcentage de cétane} + 0.15 \times d' \alpha - \text{méthyl-naphtalène} \quad (2.8)$$

Plus l'indice de cétane d'un carburant est élevé, plus le délai d'auto-inflammation est court et inversement. L'indice de cétane a donc une influence sur le fonctionnement du moteur. Il intervient bien évidemment dans le réglage de l'avance à l'injection, la diminution de l'indice de 50 à 40 entraînant l'augmentation du délai d'inflammation d'environ deux degrés vilebrequin.

Le rendement du moteur n'est pas directement affecté par l'indice de cétane. En revanche, ce paramètre a un impact direct sur le niveau de bruit, les vibrations et les Emissions de polluants. Si le délai d'auto-inflammation est trop long (IC faible), la charge aura tendance à brûler en un même temps, entraînant une combustion violente. Si le délai est plus court (IC élevé), l'inflammation sera initiée en plusieurs endroits de la chambre de combustion, la flamme se propagera plus progressivement à l'ensemble de la charge. En général, la combustion est d'autant plus complète et l'échappement propre que l'indice de cétane est élevé. De surcroît, un indice de cétane trop faible engendre des difficultés de démarrage à froid.

2.1.2.4 Les écoulements swirlés

a. définitions

On dit qu'un écoulement est "swirlé" lorsque le fluide a un mouvement de rotation par rapport à la direction principale de l'écoulement. Les écoulements swirlés sont présents dans de nombreuses applications industrielles. Pour les écoulements non réactifs, on peut citer les séparateurs cyclone, les tourbillons de sillage des avions ou les machines d'épandage agricole.

Pour les écoulements réactifs, on peut citer les turbines à gaz, les moteurs à piston et certains fours industriels. Des phénomènes naturels tel que les tornades ou les cyclones entrent aussi dans la catégorie des écoulements swirlés [30].

Les écoulements swirlés se caractérisent par un fluide en rotation sur lui-même. Cette rotation crée une dépression au niveau de son axe qui peut engendrer une zone de recirculation dans l'axe de l'écoulement. La fig 2.15 [30] montre le type de configuration généralement utilisée pour l'étude des écoulements swirlés:



Figure 2.14 : Photographie d'une tornade

- Le divergent progressif (fig 2.15) permettent des études académiques sur le swirl des écoulements turbulents ou laminaires [30].
- Les expansions brusques comme celle représentée à la fig 2.15 est utilisée pour les études appliquées sur le swirl. Cette configuration permet l'étude des interactions entre le swirl et la combustion. Les écoulements sont dans ce cas presque toujours turbulents et ont des applications dans des secteurs industriels comme celui des turbines à gaz.

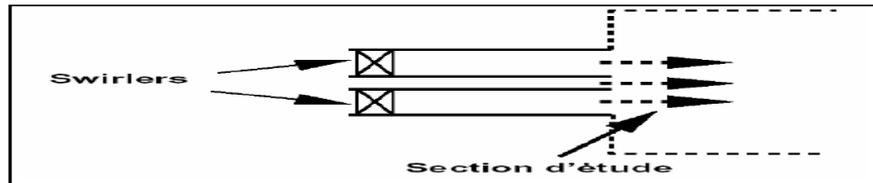


Figure 2.15 : Expansion brusque générique utilisée pour les études appliquées sur les écoulements swirlés. Ces configurations sont généralement axisymétriques

b. Le nombre de swirl

Les études expérimentales montrent que le Swirl affecte directement les caractéristiques principales d'un écoulement telles que l'angle d'un jet, la taille et la stabilité des flammes. On mesure le Swirl et on classe les écoulements Swirlés à l'aide d'un nombre adimensionnel appelé nombre de Swirl qui compare le flux axial de moment cinétique au flux axial de quantité de mouvement axiale.

Le swirl consiste à ajouter une composante azimutale au champ de vitesse d'un écoulement. Il en résulte, dans un écoulement confiné, un équilibre entre les forces centrifuges agissant sur les particules fluides et les forces de pression (Beér et Chigier 1972), conférant à l'écoulement un effet de courbure au niveau de la zone de mélange (Panda et McLaughlin 1994). Le swirl rend les structures cohérentes, fortement organisées dans le cas du jet libre, plus faibles en supprimant le vortex-pairing (appariement des tourbillons) et en favorisant un accroissement de la turbulence (Panda et McLaughlin 1994). Il a été observé qu'à partir d'une certaine intensité de swirl (i.e. une composante azimutale dans le champ de vitesse importante) une zone de recirculation apparaissait dans l'écoulement principal. La taille et la position de cette zone de recirculation varient avec l'intensité du swirl (Beér et Chigier 1972, Leuckel et Fricker 1976, Escudier et Keller 1985, Sheen et al. 1996). Cette zone est un élément essentiel

pour stabiliser les flammes car elle contient des gaz frais préchauffés et permet l'accrochage de la combustion. Le nombre de Swirl « S » est défini par (eq 2.9) [30] :

$$S = \frac{G_\theta}{RG_x}$$

avec: (2.9)

$$G_\theta = \int_0^\infty (\rho \bar{u} \bar{u}_\theta + \rho \bar{u}' \bar{u}'_\theta) r^2 dr, \quad G_x = \int_0^\infty (\rho \bar{u}^2 + \rho \bar{u}'^2 + (\bar{P} - P_\infty)) r dr$$

où u et u_θ sont respectivement les composantes axiale et orthoradiale de la vitesse, et R le rayon de l'injecteur. Pour un jet libre à grand nombre de Reynolds, G_x et G_θ se conservent et donc S est constant le long de l'axe du jet. Dans une chambre de combustion, S peut changer en fonction de l'endroit où on le mesure.

On utilise souvent une définition simplifiée pour S en négligeant les quantités turbulentes et le gradient de pression. Dans ce cas, on a [30] :

$$G_x = \int_0^\infty \rho \bar{u}^2 r dr$$

$$G_\theta = \int_0^\infty \rho \bar{u} \bar{u}_\theta r^2 dr \quad (2.10)$$

Le "classement" des écoulements swirlés en fonction de leur nombre de swirl est généralement admis dans la littérature. Toutefois, il est nécessaire d'être mis en garde contre l'imperfection d'un tel classement. En effet, puisque ce nombre est un simple rapport entre deux grandeurs intégrales, il se peut que deux écoulements aient le même nombre de swirl et une répartition de vorticité complètement différente (Panda et McLaughlin 1994). De ce fait on ne tient pas compte de la vorticité de la couche de mélange, pourtant à l'origine des instabilités centrifuges (Martin et Meiburg 1996). On trouve alors d'autres définitions du nombre de swirl (Sheen et al. 1996, Billant et al. 1998, Shtern et al. 2000).

c. Les écoulements swirlés réactifs

Le swirl est largement utilisé dans les configurations réactives telles que les réacteurs d'avions. Deux types d'écoulements swirlés sont intéressants pour les systèmes industriels réactifs, ils correspondent aux écoulements de types A et B de la fig 1.4. On cherche généralement à obtenir des écoulements de type B:

- La recirculation au niveau de l'axe du jet permet de stabiliser la réaction et ceci sans accroche-flammes.
- Une flamme swirlée est plus compacte ce qui permet de réduire la taille de la chambre de combustion.
- Cheng a montré que l'accroissement de swirl réduit la formation de NOx: le swirl crée des cisaillements plus importants qui homogénéisent le mélange de gaz frais, on évite la formation des flammes de diffusion génératrice de NOx. Le mélange gaz chauds/gaz frais est aussi accru, on évite ainsi la création de NOx thermiques [30].

Pour la conception de systèmes réactifs tels que les réacteurs d'avions, il est important d'étudier les écoulements swirlés et de pouvoir prévoir la stabilisation des zones de recirculation et les phénomènes qui remontée de la flamme dans l'injecteur et l'extinction. En effet, le phénomène de Vortex-Breakdown traduisant la présence d'une zone de recirculation au niveau de l'axe du jet est un phénomène instable. Il apparaît un point d'arrêt résultant de l'équilibre entre les vitesses positives du jet et les vitesses négatives de la zone de recirculation. Si les conditions amont changent rapidement cette zone de recirculation peut

être déstabilisée et provoquer une extinction ou une remontée de la flamme vers les injecteurs pouvant endommager le système.

2.1.2.5 Les types de flammes

On distingue trois types de flamme :

- la flamme de diffusion : dans ce cas-là, les réactants- combustible et comburant- sont séparés
- la flamme de prémélange : dans ce cas-là, les réactants forment une phase homogène.
- la flamme de décomposition

a. les flammes de diffusion

La flamme de diffusion est appelée ainsi car, les réactants étant séparés, ils doivent venir au contact l'un de l'autre, par le phénomène de diffusion. Les cas typiques sont :

- la combustion des solides (bois, bougie, papier, ...)
- la combustion des liquides (essence, gazole, pétrole, ...), sous forme « massive » (flaque, réservoir) ou de brouillard (moteur Diesel).
- le moteur-fusée utilise des flammes de diffusion, typiquement hydrogène/oxygène ou kérosène/oxygène.
- la combustion des gaz non mélangés à l'air, par exemple un gaz sortant directement d'une bouteille ne contenant pas d'air, une fuite sur une canalisation qui s'enflamme tout de suite.

Anatomie

La flamme de diffusion se compose de deux parties :

1. une partie bleue : c'est là que se déroule principalement la combustion, on a le combustible d'un côté, le comburant et les produits de réaction de l'autre ; la température est d'environ 1 200 °C ;
2. une partie allant du blanc au jaune ou à l'orange : les produits de combustion de la zone bleue chassent l'air, la zone est donc plus pauvre en dioxygène, on atteint une température de 1 500 °C et il y a production de suie.

À 1 500 °C, les particules de suie émettent une lumière blanche (rayonnement du corps noir). Puis, en s'élevant, leur température s'abaisse, et elles émettent une lumière jaune.

La forme de cette flamme est en grande partie due à la gravité et au phénomène de convection qui en découle : les gaz chauds montent du fait de la poussée d'Archimède. L'alimentation en comburant ne peut donc se faire que par les côtés.

Dans les flammes de diffusion, le carburant et l'oxydant sont de chaque côté de la zone de réaction et diffusent vers cette zone où ils brûlent et génèrent de la chaleur. La température est alors maximale dans cette zone de réaction et diffuse de la flamme vers les écoulements de carburant et d'oxydant. La Fig 2.16 est une illustration de la structure de flamme de diffusion de [Poinsot et Veynante, 2001] :

Pour modéliser ces flammes un scalaire passif est introduit : la variable de Zeldovich adimensionnée ou fraction de mélange Z . Les hypothèses suivantes sont faites [31] :

- le nombre de Lewis est fixé à 1
- la pression thermodynamique est constante et les nombres de Mach faibles
- la diffusion thermique (effet Soret) et les effets de diffusion de pression sont négligés, ce qui est acceptable en combustion.

La diffusion considérée résulte donc uniquement des gradients de concentrations.

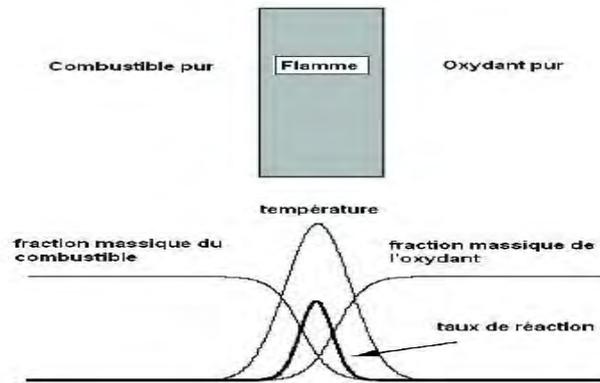


Figure 2.16 : Structure d'une flamme laminaire de diffusion
(d'après [Poinsot et Veynante,2001])

La loi de Fick est utilisée pour calculer les vitesses de diffusion. En flamme de diffusion laminaire, les fractions massiques Y_k des espèces suivent l'équation de bilan (eq 2.11) suivante [31] :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \Omega_k \quad (2.11)$$

L'équation dans l'espace des fractions de mélange : Z est obtenue:

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right) \quad (2.12)$$

Dans le cas d'un feu de solides ou de liquides, la combustion produit de la chaleur ; cette chaleur provoque un phénomène de distillation, de pyrolyse ou simplement de fusion puis de vaporisation qui produit un gaz inflammable, qui vient alimenter la flamme. Que ce soit donc un feu de solide, de liquide ou de gaz, on a :

- au centre de la flamme : un gaz combustible
- la flamme elle-même est une mince couche de gaz au sein de laquelle se déroule la réaction de combustion
- à l'extérieur de la flamme : le gaz comburant, en général le dioxygène de l'air, et les produits de réaction (gaz et particules).

Ce phénomène peut être très complexe ; par exemple, la combustion du kérosène dans les moteurs d'avion peut être décrite par 3 500 réactions faisant intervenir 225 espèces chimiques (Boyer, p. 57).

Cette réaction est en général incomplète, puisque sur le lieu de la réaction, la mince couche de la flamme, le rapport entre combustible et comburant n'est pas idéal (non-stœchiométrique). On a donc des gaz très divers — dioxyde de carbone (CO_2) et vapeur d'eau (H_2O), souvent monoxyde de carbone (CO), autres gaz de réaction et gaz imbrûlés — ainsi que des particules de suie qui brûlent à leur tour. De plus, la haute température atteinte grâce à la combustion provoque la formation d'oxydes d'azote.

b. les flammes de prémélange

Dans le cas de la flamme de prémélange, le combustible est toujours un gaz, qui est parfaitement mélangé au comburant. On parle aussi de flamme aérée. Les exemples les plus courant sont :

- le bec Bunsen et le brûleur de la cuisinière : ces dispositifs présentent une entrée d'air permettant aux gaz de se mélanger avant de sortir
- le chalumeau : il est alimenté en gaz combustible et en dioxygène pur, le mélange se faisant avant la buse
- le moteur à allumage commandé (moteur essence), l'allumage des gaz prémélangés étant réalisé par une bougie
- les explosions de gaz, et dans les incendies, les phénomènes de propagation rapide du feu (explosion de fumées, embrasement généralisé éclair, coup de grisou).

Même si le mélange n'est pas idéal, le mélange intime des réactants fait que la combustion est plus efficace ; la flamme est donc plus chaude et ne produit pas de particules imbrûlées, elle est donc bleue.

Anatomie

La flamme est là aussi une mince couche de gaz, qui est la frontière entre deux milieux :

1. les « gaz frais » (mélange combustible-comburant) d'un côté
2. les gaz brûlés (produits de réaction) de l'autre.

Le schéma ci-contre montre une flamme de bec Bunsen ; dans ce cas-là, les gaz frais arrivent avec une certaine vitesse, le front de flamme progresse en sens inverse, ce qui fait que globalement, la flamme est immobile.

Dans de nombreux cas, les gaz frais sont au repos par rapport au référentiel ; dans ce cas-là, le front de flamme se déplace. Selon sa vitesse de propagation, on parle de détonation (dans le cas supersonique) ou de déflagration (pour des vitesses de flamme subsoniques).

La structure des flammes laminaires de prémélange est représentée sur la Fig 2.17. Les gaz frais (combustible et oxydant) et les gaz brûlés (produits de combustion) sont séparés par une fine zone de réaction (dont l'épaisseur est de 0,1 à 1 mm). Un fort gradient de température est observé lors de la combustion des hydrocarbures (le rapport de la température des gaz brûlés sur la température des gaz frais varie communément de 5 à 7). Une flamme de prémélange se propage vers les gaz frais du fait du gradient de température et des flux thermiques correspondants qui permettent de préchauffer les gaz frais et de commencer leur combustion [31]. L'absence d'équilibre local entre la diffusion de la chaleur et la consommation chimique mène à la propagation du front de flamme. La vitesse de propagation S_L du front de flamme dépend de divers paramètres (compositions du combustible et de l'oxydant, température des gaz frais, pression...) et vaut entre 0,1 et 1 m/s. La vitesse de flamme laminaire : S_L s'écrit :

$$Le = \frac{D_{th}}{D_k}$$

$$S_L = \frac{dm_b / dt}{A_f \rho_u} \quad (2.13)$$

Le nombre de Lewis compare la diffusivité thermique et la diffusivité des espèces.

Pour un nombre de Lewis unitaire, sans perte de chaleur (combustion adiabatique) ni effet de compressibilité, les équations d'équilibre en masse et en énergie peuvent s'écrire en une seule équation (eq 2.14) fonction de la variable de progrès c [31]:

$$\frac{\partial \rho_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u c) = \nabla \cdot (\rho D \nabla c) + \Omega \quad (2.14)$$

La figure suivante est une illustration de la structure de flamme de prémélange de [Poinsot et Veynante, 2001] :

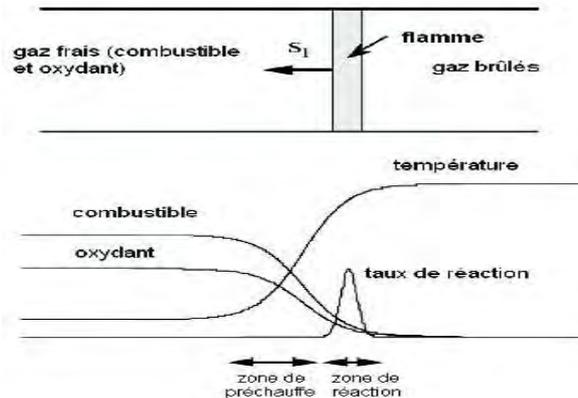


Figure 2.17: Structure d'une flamme plate laminaire de prémélange (d'après [Poinsot et Veynante, 2001])

2.1.2.6 Autres types de moteur à allumage par compression

a. concept

Moteur dual fuel

- Diesel-gaz ou Dual-fuel peuvent généralement fonctionner soit en Diesel, soit alimentés en mélange homogène d'air et de gaz naturel ou de gaz pauvre.
- Combustion déclenchée par une « flamme pilote » (10 % de gasoil injecté dans la chambre)

Moteur HCCI

- L'accroissement significatif des pressions d'injection (on parle actuellement de 4.000 bars) conduit à produire des gouttes de gasoil tellement fines qu'on peut pratiquement parler de mélange homogène « local » air/gasoil.
- Procédé HCCI (homogeneous combustion compression ignition) actuellement à l'étude
- On réalise des injections multiples et précoces du combustible suivies d'une auto-inflammation lente et contrôlée par une forte dilution des gaz brûlés (EGR)
- Ce système combinerait les avantages des moteurs à essence (puissance spécifique élevée, bruit faible) et les avantages des moteurs Diesel (faible consommation, faible pollution).

b. Simple comparaison entre la combustion Diesel et HCCI

Les modèles mathématiques décrivant les systèmes pratiques sont basés sur une description simplifiée des processus physiques. Pour construire des modèles capables de représenter la combustion Diesel et HCCI, il est nécessaire de décrire les processus complexes qui se déroulent pendant ces types de combustion. Dans un moteur Diesel classique, où la combustion est majoritairement hétérogène, le combustible liquide est injecté dans une charge gazeuse en fin de compression. Les gouttelettes de carburant échangent de la masse et de l'énergie avec la charge et produisent une quantité importante d'énergie cinétique turbulente dans la proximité du jet. L'évaporation des gouttelettes agit en tant que source de vapeur de

carburant dans le cylindre du moteur. Le mélange air - carburant formé juste après le début de l'injection doit s'allumer sans l'aide d'un apport externe de chaleur (une bougie d'allumage par exemple). Les conditions exigées pour que l'auto-allumage ait lieu ne sont en générale pas atteintes au moment de l'injection. L'allumage se fait après un retard de quelques degrés vilebrequin par rapport au début de l'injection. Pendant ce délai, des réactions chimiques complexes peuvent avoir lieu, décomposant les molécules de combustible gazeux en radicaux et en espèces intermédiaires. Ce processus continue jusqu'à ce que la température et la pression favorisent la cinétique chimique pour libérer l'énergie de façon fortement exothermique. Ce délai varie dans tout l'espace de la chambre de combustion en fonction des conditions thermodynamiques locales. Pendant cette période, le temps caractéristique de la chimie est plus grand que le temps caractérisant le mélange turbulent [32].

Pendant l'auto-allumage, une quantité considérable de combustible se vaporise et se mélange à l'air contenu dans le cylindre, formant ainsi un mélange fortement combustible. La consommation rapide du mélange, qui a été préparé pendant l'allumage, dégage l'énergie qui est responsable du transitoire initial trouvé dans le diagramme de dégagement de chaleur d'un moteur Diesel, pour certaines plages de charge et de régime. Ceci est indiqué dans la fig 2.18(a) 'Phase de combustion de prémélange'. Puisque le taux de mélange est élevé, les réactions au sein de cette charge pré-mélangée sont limitées essentiellement par la cinétique chimique et non par le mélange.

L'expansion thermique dans les zones à haute température favorise l'auto-allumage des régions voisines. A cet instant, des gouttelettes liquides sont encore contenues dans des volumes de gaz suivant deux alternatives :

- Elles brûlent déjà en régime prémélangé
- Elles ne sont pas encore allumées.

Une flamme de diffusion se forme alors pour consommer les volumes de gaz qui n'ont pas encore été allumés. Cette combustion par diffusion est limitée par la vaporisation du carburant et son mélange avec l'oxydant. La flamme de diffusion est plissée et étirée par la turbulence. La combustion continue en mode de diffusion jusqu'à l'épuisement des espèces réactives. Donc, la combustion Diesel en moteur classique peut être résumée par une succession de 3 étapes présentées sur la fig 2.18 (a) [32] :

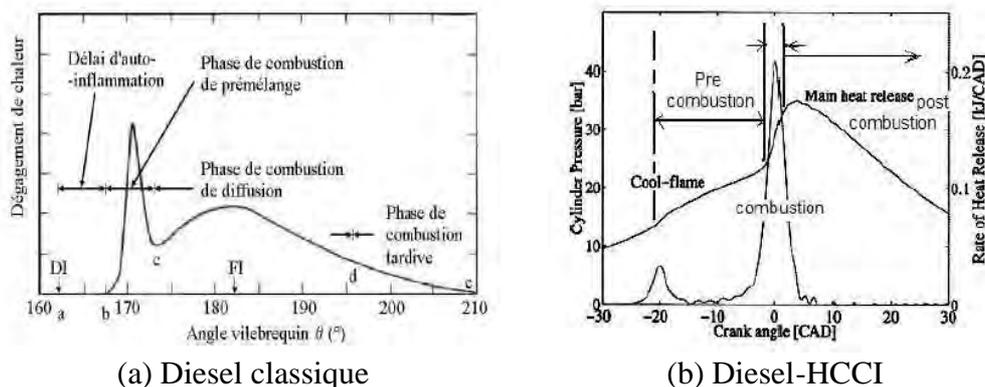


Figure 2.18 : Comparaison entre le dégagement de chaleur classique dans un moteur diesel (a) d'après [33] et en mode HCCI [34] (b)

- Réactions cinétiques d'allumage à basse température
- Combustion pré-mélangée limitée par la chimie
- Combustion en diffusion limitée par le temps de mélange.

Contrairement au moteur Diesel classique, en mode HCCI, la charge est censée être presque homogène ou peu stratifiée. La méthode de préparation du mélange homogène est d'ailleurs

un point délicat du mode HCCI.

La charge est comprimée pendant la phase de compression à une température telle que le mélange s'auto-allume en masse. En effet, la combustion est essentiellement pilotée par l'auto-allumage, qui lui-même dépend surtout de la cinétique chimique. En mode HCCI, la combustion se déroule majoritairement en mode prémélangée. Si le mélange est homogène, les flammes de diffusion sont quasiment absentes. En effet, la turbulence peut influencer l'initiation de l'allumage. Par contre, une fois la charge auto-inflammée, le dégagement de chaleur est très rapide et l'écoulement n'aura pas suffisamment de temps pour influencer fortement le déroulement de la chimie. On peut donc à nouveau énumérer trois phases distinctes, comme nous l'avons indiqué sur la fig 2.18 (b) et qui montre un dégagement de chaleur typique du mode HCCI obtenu expérimentalement [34] :

- Une phase de mélange et de précombustion pendant laquelle les effets de l'écoulement (turbulence) dominent
- Une phase de combustion pilotée par la chimie, avec un dégagement de chaleur très rapide où le mélange turbulent intervient peu
- Une dernière phase de combustion, pendant laquelle la chimie et la turbulence peuvent interagir, mais où le dégagement de chaleur est limité.

En conclusion, le mélange turbulent est le phénomène physique dominant pour les applications moteur Diesel classique. La fiabilité des résultats des modèles numériques dépend donc beaucoup des aspects liés au mélange turbulent. Pour la combustion HCCI, le modèle d'auto-allumage est sans doute plus important que celui représentant la combustion établie. Le mélange turbulent ne peut cependant pas être négligé avant l'auto-inflammation car il influence directement l'instant et la localisation des points où la combustion démarre. Les modèles d'auto-inflammation utilisés dans les codes CFD sont souvent basés sur une chimie simple à une étape, ou bien sur une chimie réduite. Pour intégrer tous les détails de la cinétique chimique dans un code CFD, il faudrait des ressources informatiques importantes car le système réactif contient des centaines d'espèces et des milliers de réactions chimiques. Bien sûr, la turbulence a un impact sur la chimie pendant la phase d'auto-allumage, surtout sur l'initiation car le temps chimique est plus élevé que le temps de mélange.

Le procédé de combustion appelé "Homogeneous Charge Compression Ignition" (HCCI), est aujourd'hui devenu un sujet de grand intérêt pour les chercheurs dans les domaines automobile et de la combustion [4, 5]. Plusieurs abréviations peuvent en effet être trouvées dans littérature, à savoir, HCCI, ATAC, PCCI, PREDIC, CAI, et NADI [6, 7, 8, 9, 10, 11]. Toutes rapportent au même processus de combustion homogène par auto-inflammation. La motivation principale pour cette technologie est la nécessité de développer des moteurs qui fournissent un bon rendement thermique, avec moins d'émissions d'oxydes d'azote (NOx) et de particules de suies.

Le moteur Diesel est reconnu pour son rendement thermique élevé, grâce à un taux de compression important et à une absence de vannage à l'admission évitant ainsi les pertes de charge. En contrepartie, du fait du mode de combustion dans ce type de moteurs, essentiellement par flamme de diffusion, deux polluants majeurs sont inévitables : les NOx et les particules de suies. Le moteur à allumage commandé de son côté emploie une charge prémélangée avec un allumage par bougie. Le mode de combustion de type pré-mélangée implique des niveaux d'émissions de suies proches de zéro. En contrepartie, ce mode de combustion est très sensible à l'auto-allumage (connu sous le nom 'cliquetis') et donc, des taux de compression élevés ne peuvent pas être utilisés. De plus, le remplissage du mélange de carburant et d'air est une contrainte liée aux pertes de charge à l'admission limitant ainsi le fonctionnement à pleine charge et contribuant à une forte réduction du rendement.

Une solution possible pour améliorer le rendement et diminuer les émissions des moteurs à combustion interne consisterait à combiner les meilleures caractéristiques du moteur essence avec celles du moteur Diesel. Autrement dit, un mode de combustion qui aurait un potentiel de rendement thermique comme le moteur Diesel et des émissions de suies équivalentes à celles des moteurs essence tout en gardant de faibles émissions de NO_x à l'aide d'une combustion à plus basse température. A l'heure actuelle, les moteurs conventionnels (moteur à allumage commandé et moteur Diesel) font face à des nombreux obstacles techniques pour atteindre simultanément ces objectifs.

Le concept HCCI pourrait être une solution attractive pour atteindre ces objectifs, malgré les problèmes techniques de mise en place et de contrôle qui limitent aujourd'hui son implantation industrielle. Dans ce chapitre, le principe de la combustion HCCI, ses avantages et ses inconvénients sont décrits en détails. Nous présenterons un sommaire du développement historique du HCCI afin de fournir une idée générale sur les différentes approches qui peuvent être employées pour ce mode de combustion.

Le mode HCCI est un procédé de combustion qui offre un potentiel de réduction substantiel des NO_x et des particules tout en fournissant des niveaux de rendement thermique équivalents à ceux des moteurs Diesel conventionnels. Le principe du mode de combustion HCCI est l'auto-inflammation à faible température d'un mélange combustible/air pré-mélangé. Le mélange homogène d'air et de combustible (en général en excès d'air) est comprimé à une température suffisamment élevée pour que l'auto-inflammation puisse avoir lieu près du point mort haut (PMH).

2.2 Formation des polluants dans les MCI

2.2.1 Particules et gaz d'échappement issus d'un moteur Diesel

2.2.1.1 Composition des gaz d'échappement issus d'un moteur Diesel avant traitement

Le moteur Diesel, dans l'état actuel de son développement, est devenu une alternative très compétitive au moteur à allumage commandé. En Europe, la proportion des véhicules neufs équipés de moteur Diesel est en progression constante et a atteint pour la première fois 50% du marché durant l'année 2000. Face à cette augmentation, il est indispensable de s'interroger sur la nature et la quantité des rejets occasionnés par le fonctionnement d'un moteur Diesel [24].

Le moteur Diesel convertit l'énergie chimique (c'est-à-dire le carburant, le gazole) en énergie mécanique.

Le carburant utilisé dans la combustion diesel est un mélange complexe d'hydrocarbures paraffiniques, cycloparaffiniques, aromatiques et d'oléfines dans la plage de C₁₀ à C₂₂. Il peut, également, contenir des polyaromates en infime concentration. Les caractéristiques chimiques de ces composants permettent à ce mélange de s'auto-enflammer sous haute pression en présence d'oxygène. Cette combustion, réalisée dans des conditions optimales, produit du dioxyde de carbone (CO₂) et de la vapeur d'eau (H₂O). Le diazote (N₂) contenu dans l'air est idéalement rejeté sans intervenir dans la réaction comme une part du dioxygène (O₂) apportée en excès. Cependant, le fonctionnement réel de ce type de moteur entraîne le rejet de composés agressifs du point de vue environnemental et sanitaire. En effet, la répartition du carburant introduit sous forme d'un spray liquide dans la chambre de combustion s'avère fortement hétérogène. Le mélange combustible/comburant peut présenter avant l'inflammation, des disparités importantes avec des zones très pauvres en carburant et des gouttelettes liquides incomplètement évaporées. Cette disparité est une des causes principales de formation de produits de combustion indésirables.

- Le Tableau 2.2 présente la composition typique des gaz d'échappement issus d'un moteur Diesel selon [35].

CO ₂	2 à 12 %
H ₂ O	2 à 12 %
O ₂	3 à 17 %
NO _x	50 à 1000 ppm
HC	20 à 300 ppm
CO	10 à 500 ppm
SO ₂	10 à 30 ppm
N ₂ O	≈ 3 ppm

Tableau 2.2 : Composition typique des gaz d'échappement issus d'un moteur diesel

- Les principaux polluants atmosphériques formés dans la chambre de combustion des moteurs Diesel selon Chiron (1996) sont:
 - * Le monoxyde de carbone (CO) provenant de la combustion incomplète du carburant dans les zones où la concentration en oxygène est insuffisante.
 - * Les oxydes d'azote (NO_x), principalement NO et NO₂, formés à haute température par l'oxydation de l'azote de l'air.
 - * Les composés organiques volatils (COV) (comprenant des hydrocarbures (alcanes, alcènes, aromatiques, ...), des composés oxygénés (aldéhydes, cétones, ...)) et les composés aromatiques polycycliques (HAP) (comme le benzo(a)pyrène) provenant de la combustion incomplète de composés plus lourds.
 - * Le dioxyde de soufre (SO₂) provenant de l'oxydation du soufre contenu en faible quantité dans le carburant.
 - * les métaux (plomb notamment) présents initialement dans les huiles et les carburants.
 - * Les particules solides majoritairement composées de carbone (C) provenant de la combustion incomplète à basse température du carburant et du lubrifiant des pistons.

On peut noter qu'une partie de ces effluents gazeux (CO, NO_x et COV) évolue chimiquement dans la troposphère (couche de l'atmosphère entre 6 et 17 km d'altitude) sous l'effet du rayonnement solaire. Ils sont à l'origine d'une pollution photochimique caractérisée par une production d'ozone (O₃) et d'autres espèces dangereuses pour la santé et l'environnement (acide nitrique, eau oxygénée, ...).

On peut noter que le secteur des transports en France est un des plus gros émetteurs de ces polluants gazeux avec, tous types de motorisation confondus, environ 50% des rejets de CO, COV et NO_x et environ 25% des émissions de CO₂ (Chiron (1996)). Ces proportions approximatives concernent les émissions polluantes par des sources liées à l'activité humaine. Il convient de mentionner que viennent s'y ajouter des rejets par différentes sources naturelles qui, pour certains polluants (CO₂, CO, SO₂, ...), sont prédominantes à l'échelle du globe [36].

La gamme de température ainsi que la température moyenne des gaz d'échappement d'un moteur Diesel sont regroupées dans la Fig 2.19. Comparés aux moteurs à essence (600 à 800°C), les moteurs Diesel sont plus froids (150-500°C). La température moyenne des gaz d'échappement Diesel est de 240°C lors d'un fonctionnement en milieu urbain et de 345°C

sur autoroute. Cette faible température du gaz sortant rend problématique la combustion de la suie.

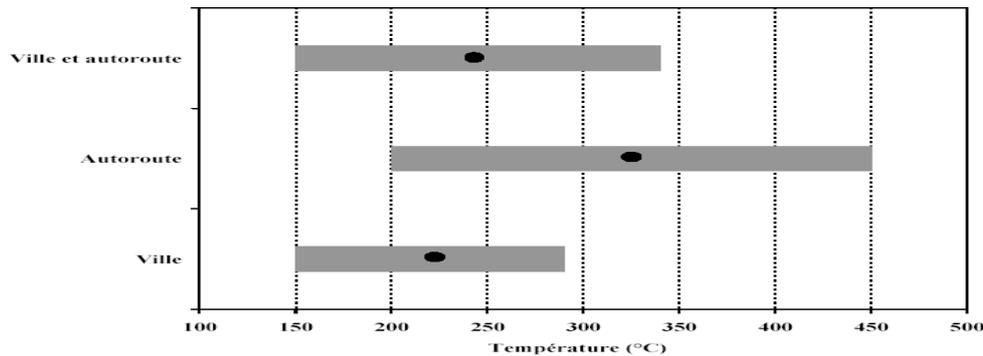


Figure 2.19 : Gamme de température des gaz d'échappement pour un véhicule diesel de moyenne gamme 1.9 L TDI fonctionnant à plusieurs régimes : ville, autoroute et mixte (ville et autoroute). Le point noir indique la température moyenne [36]

2.2.1.2 Composition et formation et structure des particules de suie

Les systèmes utilisant la combustion pour produire de l'énergie contribuent pour une part importante à la dégradation de la qualité de l'air. La préservation de l'environnement conduit les législateurs à imposer des normes de plus en plus restrictives pour les principaux polluants identifiés. Pour répondre aux normes automobiles Euro V et Euro VI (voir Tableau 2.3) et en particulier en ce qui concerne les émissions de particules de suie la solution actuelle basée sur le post-traitement est coûteuse. Il est préférable pour les constructeurs automobiles de réduire à la source la formation des particules de suie. Cette réduction nécessite une connaissance détaillée des mécanismes de formation et d'oxydation des particules de suie afin de modéliser avec précision ces phénomènes. Dans une situation idéale le post-traitement pourrait être économisé. Dans l'immédiat le développement d'un outil prédictif, basé sur une connaissance détaillée des processus impliqués, permettra d'optimiser les chambres de combustion et réduire la part du post-traitement [31].

Jusqu'à présent les normes concernant l'automobile ne portaient que sur la masse totale des particules de suie émises à l'échappement. Les études d'impact sur la santé ont montré que si la masse de particules constitue un paramètre important leur distribution en taille doit aussi être considérée. La taille des particules devient donc une information de première importance puisque la législation s'inscrit dans une démarche de limitation non seulement en masse mais aussi en nombre de particules dans le but d'éliminer les particules les plus fines. En effet, ces dernières sont classées comme les plus nocives [Parker, 2005 et O'Connor *et al.*, 2008]. Les normes Euro 5b et 6 vont limiter dès 2011 le nombre des particules à 6.10 par kilomètre en mode de combustion Diesel [31].

Normes	Particules [g/km]		
	Essence	Diesel	
	ID	ID	IDI
Euro 1 (1992/1993)	-	0,14	
Euro 2 (1996/1997)	-	0,08	0,1
Euro 3 (2000/2001)	-	0,05	
Euro 4 (2005/2006)	-	0,025	
Euro 5a (2009/2011)	0,005	0,005	
Euro 5b (2011/2014)	0,0045	0,0045	
Euro 6b (2014/2016)	0,0045	0,0045	

ID: Injection directe; IDI: Injection indirecte

Tableau 2.3 : Tableau récapitulatif des normes européennes
(Journal officiel de L'UE, 2007)

Il convient de noter que la limitation en masse et en taille des particules doit s'inscrire dans une démarche de réduction globale des émissions. Il est donc nécessaire de réduire les émissions de particules sans augmenter les concentrations de NO_x (et autres espèces polluantes également réglementées). En effet, la formation des suies dans les moteurs Diesel peut modifier les performances du moteur et affecter la formation des polluants.

a. Formation

Dans un moteur Diesel, le gasoil est finement pulvérisé dans la chambre de combustion. La combustion se déclenche alors par auto-inflammation. Il en résulte une combustion hétérogène qui est à l'origine de la formation des particules de suie dans les zones localement déficitaires en oxygène. Le terme suie est donc attribué au matériau carboné formé lors de la combustion du carburant dans des conditions sous-stœchiométriques, c'est-à-dire en manque d'oxygène. Ces particules de suie s'associent dans la ligne d'échappement pour former des agrégats. Enfin, lors du refroidissement des gaz d'échappement, des hydrocarbures et des sulfates s'adsorbent sur les agrégats de suie. Ainsi, les particules Diesel se composent d'un matériau carboné solide (la suie) engendré lors de la combustion, sur lequel sont adsorbées des espèces organiques diverses (SOF : Soluble Organic Fraction).

Les mécanismes de formation de la suie lors de la combustion Diesel sont encore mal connus, car ils concernent des phénomènes peu reproductibles, se passant à haute température, à forte pression, avec un carburant de composition complexe, au sein d'un mélange turbulent. Voici, cependant les principales étapes admises [24] :

- **1^{ère} étape** : formation d'espèces intermédiaires lors de la pyrolyse du gasoil, les précurseurs de suies. C'est de l'éthylène qui polymérise et forme des structures polycycliques ou plus exactement turbostratiques. Ces structures turbostratiques sont des empilements concentriques de feuillets constitués de cycles à 6 carbones arrangés de manière aléatoire.
- **2^{nde} étape** : nucléation et création des premières particules solides. Ces particules sont sphériques et leur diamètre est compris entre 1 et 2 nm.
- **3^{ème} étape** : croissance par coagulation (les particules entrent en collision et forment des particules plus grosses) jusqu'à l'obtention de sphérules (10-30 nm) généralement appelées particules de suie primaires.
- **4^{ème} étape** : agrégation des sphérules. L'agrégat peut alors atteindre plusieurs centaines de nm¹⁴.

Ces différentes étapes sont illustrées sur la Fig 2.20.

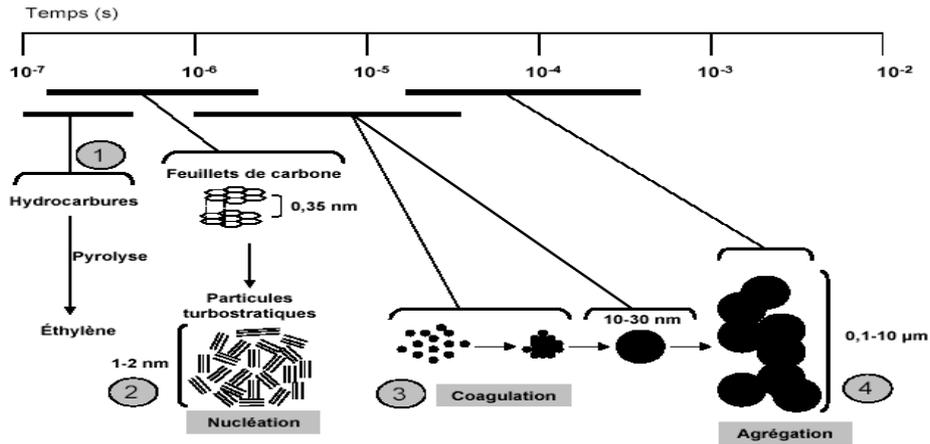


Figure 2.20 : Mécanismes de formation de la suie [24]

1 formation d'espèces intermédiaire / 2 Nucléation / 3 Coagulation / 4 Agrégation

b. Composition

La suie est produite lors de la pyrolyse à haute température ou lors de la combustion d'hydrocarbures. La suie est composée essentiellement de carbone, d'autres éléments tels que l'hydrogène et l'oxygène sont également présents en faibles quantités. La suie contient souvent une fraction organique soluble dont les composants incluent des hydrocarbures imbrûlés [Daido *et al.*, 2000], des dérivés oxygénés (cétones, esters, aldéhydes, lactones, éthers, acides organiques) et des PAHs accompagnés de leurs dérivés nitrés, oxygénés, etc. Des dérivés minéraux (SO₂, sulfates...) et métalliques sont également présents [31].

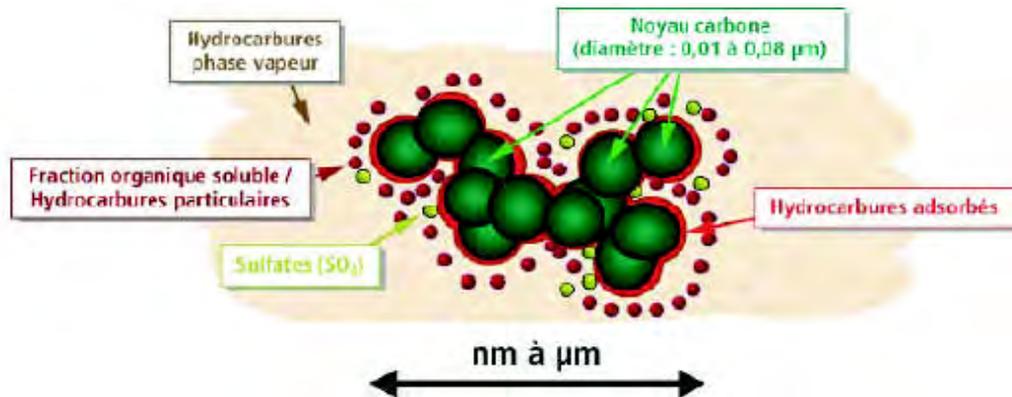


Figure 2.21 : Structure élémentaire d'une particule de suie automobile

[Barbusse et Plassat, 2005]

La composition d'une particule de suie est donnée dans le tableau 2.4 [Marcucilli *et al.*,1994].

Elément	C	H	O	N	S
Suie vierge	83,5	1,04	10,5	0,24	1,13
Suie dégazée	83,8	0,85	10,7	0,22	0,1

Tableau 2.4 : Composition des particules de suie diesel (Pourcentage massiques)

La suie contenant 1% en masse d'hydrogène, une formule de composition empirique : C₈H fut proposée [Palmer et Cullis, 1965]. Quand les particules de suies sont jeunes, le rapport des nombres d'atomes H/C peut s'élever à 1 [31].

c. Structure

La structure des suies a été et demeure le sujet de nombreuses publications [Coran et Donnet., 1994]. Les particules de suie sont formées par des agglomérats dont la taille est d'environ 100 μm . Ces agglomérats sont composés de particules plus petites ou sphérules, qui sont sphériques ou presque [Dobbins et Subramaniasivam, 1994]. Les agglomérats peuvent contenir jusqu'à 4000 sphérules. La taille des sphérules varie entre 10 et 80 nm de diamètre et plus généralement entre 15 et 50 nm [Walker *et al.*, 1966]. La Fig 2.22 présente une micrographie de particules de suie Diesel. On distingue nettement un agglomérat constitué de sphérules [Stanmore *et al.*, 2001] [31].

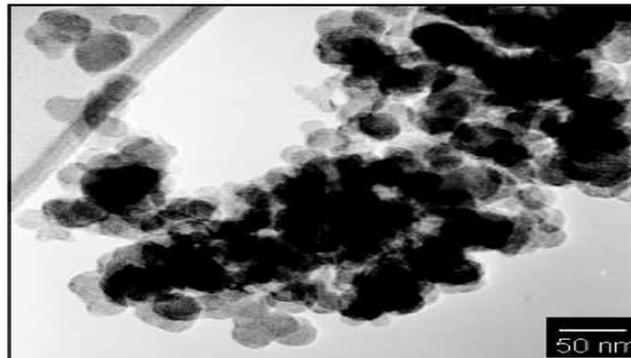


Figure 2.22 : Micrographie de suie diesel [Stanmore *et al.*, 2001]

L'observation des sphérules par microscopie électronique à transmission (TEM) révèle des laminations avec des sauts de surface, qui sont produites par de nombreux cristallites concentriques [Haynes et Wagner, 1981]. La diffraction aux rayons X comme illustrée dans la Fig 2.23 [Glassman, 1996], montre que les atomes de carbone des particules primaires de suie sont insérés dans des structures hexagonales, généralement dénommées "plaquettes". Ces dernières sont disposées en couches pour former des cristallites qui contiennent typiquement de deux à cinq plaquettes par cristallite. L'espace inter-couche moyen est de 3,55 nm, légèrement supérieur à celui observé dans le graphite [Glassman, 1996]. L'épaisseur des cristallites est d'environ 12 nm [Glassman, 1996] et environ 100 cristallites composent les particules primaires de suie [31].



Figure 2.23 : Sous-structure d'une particule de suie

Les cristallites sont disposées de façon turbostratique, avec leurs plans plus ou moins parallèles à la surface des particules. Les dislocations des composés entraînent les plissements de surface. Quand les particules sont analysées sous microscopie électronique à transmission haute résolution (HRTEM), deux parties distinctes des particules primaires de suie Diesel peuvent être identifiées: une coquille extérieure et un noyau interne, comme montré dans la Fig 2.24 [Ishiguro *et al.*, 1997]

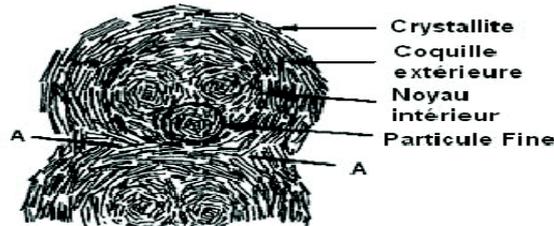


Figure 2.24 : Microstructure des particules de suie diesel [Ishiguro et al., 1997]

Le modèle de plaquette décrit précédemment s'applique à la coque externe. Néanmoins, le noyau interne contient de fines particules avec des noyaux sphériques enveloppés par des réseaux carbonés avec une structure courbée. Ceci indique que la coque externe, composée de cristallites en graphite, est une structure rigide, alors que le noyau interne est chimiquement et structurellement moins stable à cause des instabilités thermodynamiques de sa structure.

La structure des particules de suies émises par les moteurs Diesel dépend de la charge moteur [Kennedy, 2007], à faible charge les particules formées sont de formes variables avec une forte concentration de carbone organique [31]. A charge élevée les émissions forment un matériau graphitique plus ordonné avec des particules de taille plus faible et moins de carbone organique. Une microstructure désordonnée des éléments carbonés peut engendrer plus de sites réactifs à la surface des particules.

2.2.1.3 Composition des particules Diesel

Le terme particule désigne l'ensemble des matières solides ou liquides récupérées sur filtre après prélèvement des gaz d'échappement dans le cadre de la réglementation sur les émissions (Guibert (1997)).

Les particules Diesel sont constituées de grains de 0,3 μm . Ces grains sont eux-mêmes formés à partir de sphérules de carbone d'environ 10 à 60 nm de diamètre associés entre eux sous forme de chaînes et d'agrégats qui donnent à la suie son aspect « floconneux » caractéristique. Les particules Diesel sont un mélange complexe de corps organiques et non organiques comme le montre la structure schématique des particules Diesel présentée sur la Fig 2.25. La phase solide est constituée de la suie c'est-à-dire d'un cœur en carbone et la phase condensée se compose de corps organiques c'est-à-dire de la couche d'hydrocarbures adsorbés SOF et de sulfates. La quantité de SOF est fonction du type de moteur utilisé, des dispositifs accessoires (EGR), du carburant et des conditions de marche du moteur. Le taux de SOF peut varier de 5 à 60% en masse (5% en pleine charge, 60% au point mort) [24].

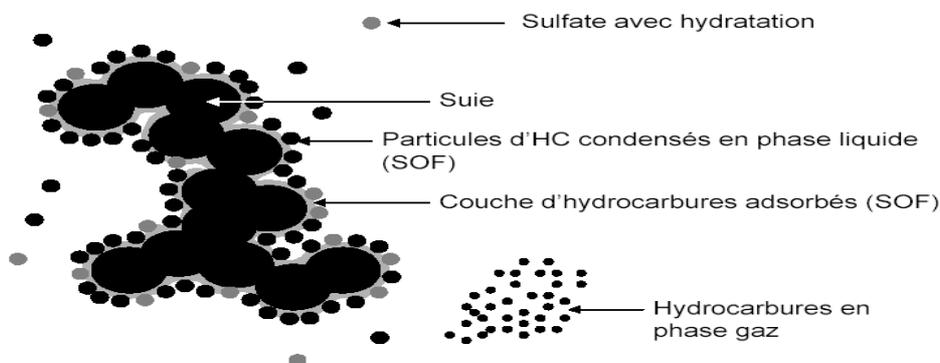


Figure 2.25 : Structure d'un agrégat de particules de suie et des composés qui lui sont associés

Les sulfates dans les gaz d'échappement Diesel proviennent des composés organiques soufrés présent dans le carburant. Lors de la combustion, le soufre dans les composés organiques est transformé en SO_2 , qui va être lui même (2%) oxydé en SO_3 . C'est ensuite SO_3 qui réagit avec l'eau pour former des gouttes d'acide sulfurique. En 2005, le taux admis de soufre présent dans le carburant va passer de 500 à 50 ppm en Europe et en 2007, de 5 à 30 ppm aux Etats-Unis.

D'après Kittelson, la composition des particules Diesel est variable suivant où et comment elles sont collectées. Dans la ligne d'échappement, où les températures sont élevées, la plupart des composés volatils (hydrocarbures, acide sulfurique) sont en phase gaz. Lorsque les gaz d'échappement se refroidissent en se mélangeant à l'atmosphère, des phénomènes de nucléation, condensation et adsorption transforment les composés volatils en particules solides ou liquides. Lors d'un test sur banc à rouleaux, ces phénomènes sont simulés dans le tunnel de dilution. Ainsi, la mesure des particules se fait dans des conditions se rapprochant au plus de la réalité. La Fig 2.26 [24] montre la distribution en taille des particules typique d'un moteur Diesel. La vie d'une particule est un phénomène complexe que l'on ne maîtrise pas encore. Elle dépend de sa composition chimique, de son état de surface. Elle est réactive vis-à-vis de l'extérieur et est donc en constante transformation. Aucun consensus n'existe sur l'évolution des particules dans l'atmosphère. Les particules automobiles ont pour origine le phénomène de combustion imparfait dans le moteur, suivi de processus de condensation et d'absorption sur toute la ligne des gaz d'échappement. La composition physique et chimique des particules dépend indirectement du carburant et des caractéristiques fonctionnelles du moteur mais les mécanismes de formation de ces particules sont communs aux moteurs essence et Diesel. Les anciens moteurs Diesel émettent davantage de fumée visible en régime urbain. Ces fumées noires ont été fortement réduites sur les moteurs Diesel au cours des 20 dernières années, de nouvelles technologies apparaissent (injection directe, haute pression, filtre à particules ...) qui les supprimeront. Aujourd'hui, la mesure réglementaire pour l'homologation des véhicules Diesel en ce qui concerne les particules suit une méthodologie normalisée : mesure de la masse des particules récoltées sur un filtre.

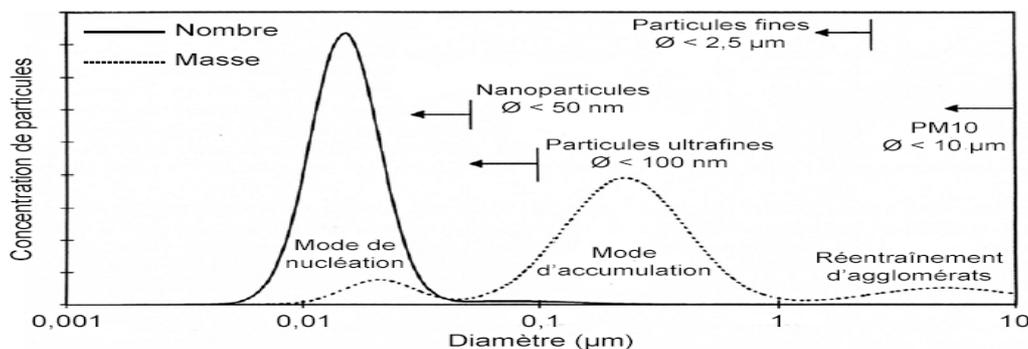


Figure 2.26 : Distribution typique des particules pour un moteur diesel en masse et en nombre en fonction de leur taille

La Fig 2.26 [24] montre la distribution modèle des particules pour un moteur Diesel en masse et en nombre en fonction de leur taille. Le classement des particules se fait en fonction de leur taille :

- mode de nucléation ($\varnothing < 50 \text{ nm}$) : ces particules sont essentiellement des composés organiques solubles et des sulfates. Elles peuvent être liquides ou solides. On peut noter aussi que de petites variations de température peuvent en modifier la taille et le nombre. Cette catégorie représente un faible poids mais un grand nombre par rapport à l'ensemble des particules. On nommera par la suite « nanoparticules » les particules en mode de nucléation.

- mode d'accumulation ($50 \text{ nm} < \varnothing < 1 \text{ }\mu\text{m}$) : ces particules sont constituées principalement d'agglomérats de type graphitique qui sont stables dans le temps. Ces particules sont souvent englobées sous le terme « **particules de suie ou pic suie** ».
- Réentraînement d'agglomérats ($\varnothing > 1 \text{ }\mu\text{m}$) : ces particules sont émises par réentraînement de particules plus petites préalablement déposées sur la ligne d'échappement. Le taux de ces particules dépend de l'encrassement de la ligne.

Ainsi, les nanoparticules représentent un faible poids mais un grand nombre par rapport à l'ensemble des particules contrairement aux particules en phase d'accumulation qui représentent la majorité de la masse mais un petit nombre. Il faut aussi noter le paradoxe car à priori les nanoparticules sont les plus dangereuses pour la santé mais ce sont aussi celles qui échappent à la réglementation puisque la législation actuelle se fait par pesée.

2.2.1.4 Les normes européennes

Depuis 1992 des normes européennes ont été mises en place afin de réduire les émissions polluantes des véhicules automobiles. L'évolution de ces normes est détaillée dans le Tableau 2.5. Il est à noter que les normes Euro 5b et 6 vont intégrer une limitation du nombre des particules à 6.10 par kilomètre en mode de combustion Diesel.

La restriction des NOx et des particules implique donc un compromis NOx-particules. Pour satisfaire les nouvelles normes, différentes technologies ont été développées dans le domaine de l'automobile [31].

Normes	CO [g/km]		HC [g/km]	NOx [g/km]		Particules [g/km]		
	Essence	Diesel		Essence	Essence	Diesel	Essence	
		ID/IDI	ID				ID	IDI
Euro 3 (2000/2001)	2.3	0.64	0.2	0.15	0.5	—		0.05
Euro 4 (2005/2006)	1	0.5	0.1	0.08	0.25	—		0.025
Euro 5a (2009/2011)	1	0.5	0.1	0.06	0.18	0.005		0.005
Euro 5b (2011/2014)	1	0.5	0.1	0.06	0.18	0.0045		0.0045
Euro 6b (2014/2016)	1	0.5	0.1	0.06	0.08	0.0045		0.0045

ID: Injection directe; IDI: Injection indirecte

Tableau 2.5 : Tableau récapitulatif des normes européennes
[Journal officiel de l'union européenne]

2.2.1.5 Les oxydes d'azote (NOx)

Plusieurs types d'oxydes d'azote, de propriétés physiques et chimiques différentes existent (Tableau 2.6) [37].

<i>Oxydes d'azote</i>			
Nombre d'oxydation	Formule	Nom	Remarques
+1	N_2O	Oxyde nitreux	Gaz sans couleur, peu réactif.
+2	NO	Oxyde nitrique	Gaz sans couleur, gaz réactif paramagnétique.
+3	N_2O_3		Forme un solide bleu et se dissocie en NO et NO_2 en phase gazeuse.
+4	NO_2	Dioxyde d'azote	Brun, gaz réactif paramagnétique.
+4	N_2O_4		Liquide incolore en équilibre avec NO_2 en phase gazeuse.
+5	N_2O_5		Solide ionique coloré [NO_2][NO_3]; instable.
<i>Ions d'oxyde d'azote</i>			
+1	$N_2O_2^{2-}$	Hyponitrite	Réagit comme agent réducteur.
+3	NO_2^-	Nitrite	Base faible, réagit comme agent oxydant et réducteur.
+3	NO^+	Cation nitrosyl	Agent oxydant
+5	NO_3^-	Nitrate	Base très faible, agent oxydant.
+5	NO_2^+	Cation nitronium	Agent oxydant et nitrant. Acide de Lewis.

* Les oxydes d'azote peuvent être considérés comme donneurs de un, deux ou trois électrons et/ou comme accepteur d'électrons

Tableau 2.6 : oxydes d'azote* et ions d'oxyde d'azote (Shriver et Atkins, 1999)

Cependant, leur caractérisation lorsqu'ils sont adsorbés sur différentes surfaces fait encore l'objet de discussions (Hadjiivanov, 2000). Le monoxyde et le dioxyde d'azote (NO et NO_2), rassemblés sous le nom de NO_x sont les principaux oxydes d'azote formés par la combustion de la biomasse et des combustibles fossiles. NO est le produit primaire de la combustion et représente environ 95% du total des NO_x (Bosch et Jansen, 1988 ; Fritz et Pitchon, 1997 ; Janssen, 1999).

Les NO_x sont produits non seulement par la combustion mais aussi par oxydation de NH_3 formé par décomposition microbienne de protéines dans le sol et par l'activité volcanique. La Fig 2.27 montre les sources d'émissions de NO_x et leurs contributions relatives [37].

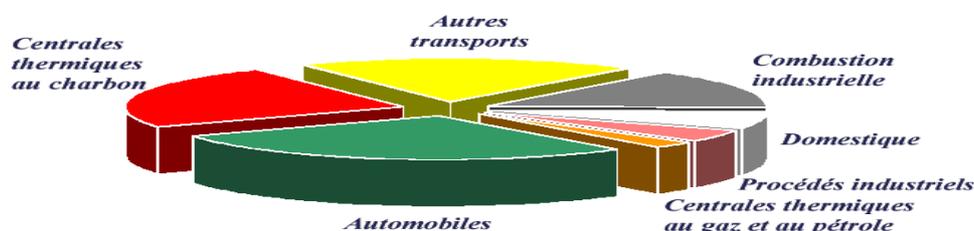


Figure 2.27 : Sources d'émissions des NO_x (Schnelle et Brown, 2002)

La très grande quantité de NO_x générée par les centrales thermiques apparaît clairement de même que la forte contribution des véhicules à moteurs et des autres moyens de transport. Il faut remarquer que les sources naturelles ne représentent qu'une faible partie des NO_x formés, alors que les activités anthropogènes sont les sources principales d'émissions. En se basant sur des données récentes (Armor, 1997), on peut estimer que uniquement aux Etats-Unis, 21 millions de tonnes de NO_x sont émises chaque année. Sur ces 21 millions de tonnes, 95% proviennent des véhicules à moteur et de la production d'énergie.

La formation de NO_x se fait, au cours de la combustion, selon trois chemins réactionnels, chacun ayant ses propres caractéristiques (Fig 2.28) [37]:

1. Formation thermique des NO_x par réaction de l'azote et de l'oxygène de l'atmosphère à haute température : " NO_x thermique".
2. Oxydation des dérivés azotés contenus dans les carburants : " NO_x carburants".

3. Réaction des intermédiaires hydrocarbures oxydés formés au cours de la combustion avec l'azote atmosphérique: "NO_x rapides".

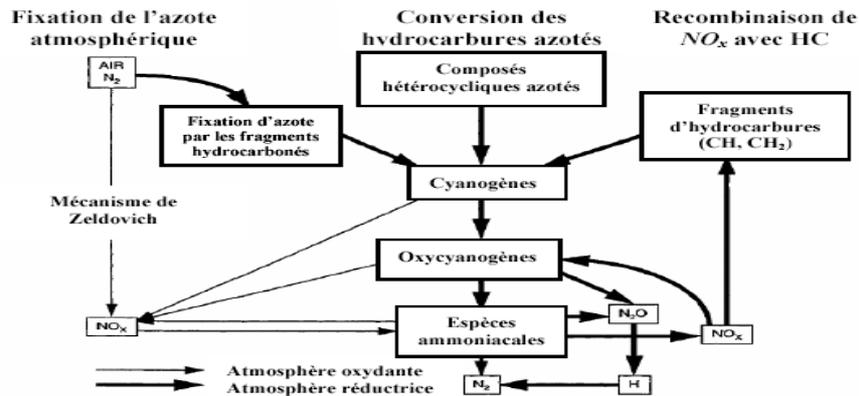


Figure 2.28 : Différents chemins de formation des NO_x pendant la combustion (Perry et al., 1997)

a. NO_x thermique

La majorité de NO est formée par réaction entre l'azote et l'oxygène selon le mécanisme établi par Zeldovich (1946):



Ce mécanisme propose une réaction en chaîne des atomes O* et N* activés (équations 2.15 et 2.16). La quantité de NO produit dans la combustion dépend de la quantité de N₂ et de O₂ présents dans les produits de la combustion et de la température. Elle n'est pas directement liée à la nature du combustible. La vitesse de production de NO selon le mécanisme de Zeldovich est donnée avec une bonne exactitude selon [37]:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k[O^*][N_2] \tag{2.18}$$

Avec $k = 1.8 \times 10^{11} \exp(-38370/T) \text{ m}^3 \cdot \text{kmoI}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ (T en °K) comme proposé par Miller et Bowman (1989). Comme indiqué, la vitesse de formation de NO augmente exponentiellement avec la température et augmente avec la concentration d'oxygène O* et de N₂.

Ainsi, la formation de NO_x thermique est rapide dans les zones de flamme où la température est élevée et où la concentration en hydrocarbures est faible. L'équation 2.18 montre que la formation de NO est contrôlée essentiellement par la réaction (2.15). Elle montre aussi l'importance à la fois de la température et de la concentration en oxygène atomique. Le mécanisme radicalaire en chaîne de Zeldovich est le mécanisme le plus important dans les conditions classiques de fonctionnement des moteurs. Cependant, d'autres mécanismes mettant en jeu les intermédiaires N₂O et des radicaux hydrocarbures tels que CH peuvent être importants (Perry et al., 1997). La formation des NO_x décroît si on diminue la température de combustion du moteur en travaillant en excès d'air ou en recirculant les gaz d'échappements dans le moteur. Cette solution est souvent utilisée bien que cette approche, en réalité, ne soit pas aussi efficace que souhaité.

La conversion de NO en NO_2 se fait à basse température au moment du passage des gaz d'échappements dans l'atmosphère. Cette réaction est donnée par l'équation 2.19.

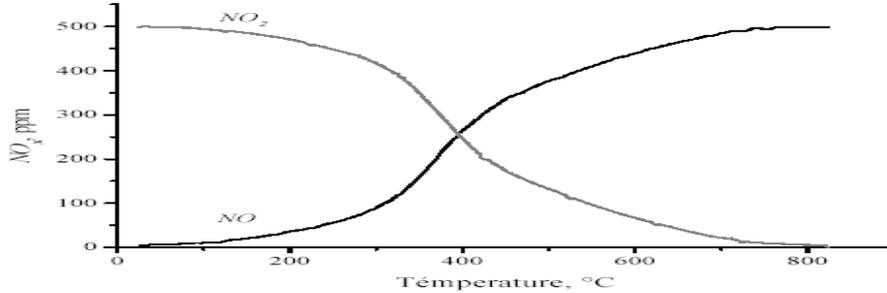


Figure 2.29 : Equilibre thermodynamique entre NO et NO_2 d'un gaz contenant 500 ppm de NO_2 , 5% de O_2 et 10% d'eau

On constate qu'à hautes températures ($> 600^\circ C$) les NO_x sont presque exclusivement sous la forme de NO . A environ $400^\circ C$ le mélange devient équimolaire. Si la température diminue, NO_2 devient très largement majoritaire [37].

La richesse locale du mélange conditionne la température de la flamme et donc la production de NO thermique. [Correa, 1992] montre que seuls les fonctionnements dans un régime proche de la stœchiométrie produisent des taux élevés de monoxyde d'azote dans les gaz brûlés (fig 2.30).

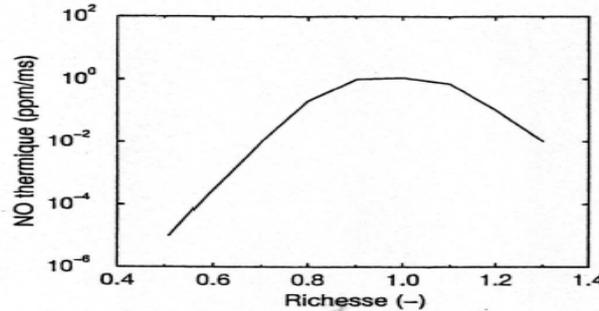


Figure 2.30 : Evolution de la production de NO -thermique En fonction de la richesse [Correa, 1992]

b. NO_x carburants

Les dérivés azotés des hydrocarbures sont la source principale des NO_x lors de la combustion des pétroles lourds, du charbon et du coke. La formation des NO_x est décrite de la manière suivante :



où $C(N)$ correspond à l'azote contenu dans les résidus carbonés et $I(N)$ à l'azote contenu dans des espèces intermédiaires telles que CN , HCN , NH ou NH_2 . Dans les conditions d'atmosphère réductrice, les composés hydrocarbures azotés localisés autour des particules ou

des gouttelettes enflammées sont transformés en composés azotés tels que HCN ou NH_3 . Ces derniers sont alors rapidement oxydés en NO qui est ensuite réduit par les espèces hydrocarbonées ou les résidus provenant du charbon. La réaction avec les résidus carbonés est particulièrement complexe et mal comprise (Tomita, 2001). Les principales réactions de transformation des dérivés azotés hydrocarbonés sont montrées sur la Fig 2.31 [37].

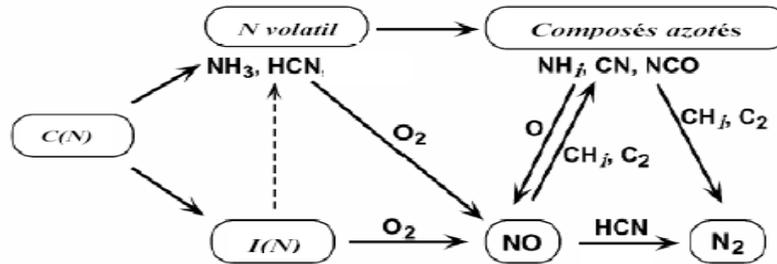


Figure 2.31 : Chemins réactionnels de la formation et de la destruction de NO au cours de la combustion du charbon (Perry et al., 1997)

c. NOx rapides

Les fragments hydrocarbonés tels que C , CH , CH_2 peuvent réagir avec l'azote de l'atmosphère dans des conditions réductrices (riches en hydrocarbures) pour former des espèces telles que NH , HCN , H_2CN , et CN (Fenimore, 1972). Celles-ci sont oxydées en NO dans la zone de flamme pauvre en hydrocarbures. Ce mécanisme n'est responsable que de la formation d'une faible partie de l'ensemble des NO_x , mais le contrôle de cette réaction est important lorsqu'on cherche à atteindre les taux d'émissions de NO_x les plus bas possibles [37].

2.2.1.6 La production de CO Le monoxyde de carbone

Le monoxyde de carbone (CO) est un produit intermédiaire de combustion formé au cours des phases où la température de la flamme est suffisamment élevée pour briser les liaisons des molécules de dioxyde de carbone (CO_2) [28]. La réaction de dissociation mise en cause dans la formation du CO est la suivante :



La majeure partie du monoxyde de carbone produit pendant la combustion est ensuite oxydée en CO_2 au cours de la phase de détente. Le moteur Diesel fonctionnant en mélange pauvre, la quantité d'oxygène disponible durant cette période est suffisante pour assurer la recombinaison (la réaction 2.22 étant réversible). Ainsi, le moteur Diesel rejette beaucoup moins de monoxyde de carbone que le moteur à allumage commandé fonctionnant dans des plages de richesse avoisinant la stœchiométrie. Le CO est un gaz nocif pour l'organisme, il affecte en particulier le transport de l'oxygène dans le sang et provoque l'évanouissement à forte concentration. D'après l'Organisation Mondiale de la Santé, la teneur en CO est acceptable tant qu'elle reste inférieure à 50 ppm [50]. D'autre part, le monoxyde de carbone réagit avec un agent purificateur de l'atmosphère, le radical hydroxyle (OH). Du fait de sa forte réactivité, ce dernier contribue à réduire le niveau des gaz à effet de serre dont le méthane. En se combinant avec le radical OH, le CO perturbe l'équilibre chimique de l'atmosphère. Le monoxyde de carbone a un impact indirect mais notable sur l'effet de serre [28].

Le CO résulte d'une combustion incomplète de l'hydrocarbure. L'émission de CO est par conséquent minimum à la stœchiométrie et devient maximale proche des extinctions pauvres et riches. Les productions de NO_x et CO ont des évolutions différentes en fonction de la richesse (fig 2.32) dans le cas d'une flamme parfaitement prémélangée. Il est donc nécessaire de trouver un compromis entre la production de CO et de NO_x.

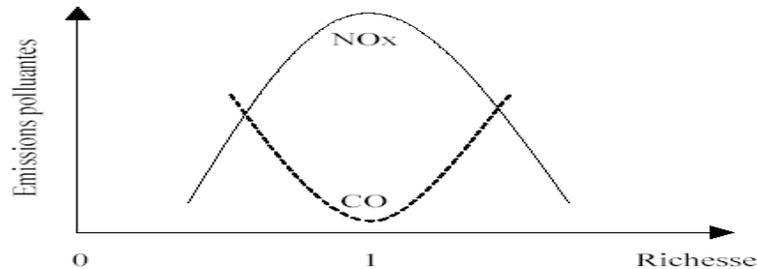


Figure 2.32 : Production de CO et NO_x en fonction de la richesse

2.2.1.7 Les hydrocarbures imbrûlés

La formation des hydrocarbures imbrûlés est consécutive à une combustion incomplète ou, tout simplement, à l'absence de combustion. La majeure partie des HC rejetés correspond à la partie du carburant qui n'a pas participé à la combustion. Les mécanismes de production des HC sont nombreux, les plus significatifs sont listés ci-dessous [28].

- La première cause est associée à la formation d'un mélange dont la richesse se trouve à la limite inférieure du mélange pauvre ($\Phi \sim 0.3$). Les régions du cylindre présentant cette caractéristique se trouvent généralement à la périphérie du spray de carburant et sont formées pendant le délai d'auto-inflammation. Ce mélange participe malgré tout à la combustion via une oxydation lente mais ne conduit pas à une réaction complète. Plus le délai d'auto inflammation est long, plus il favorise la formation des zones de mélange pauvre.
- La vidange du carburant contenu dans le sac de l'injecteur (volume mort au nez de l'injecteur situé entre l'extrémité de l'aiguille et la buse) peut être la cause des émissions d'hydrocarbures imbrûlés. Du combustible peut aussi s'échapper de l'injecteur suite à la levée accidentelle de l'aiguille causée par un retour d'onde de pression. Quelle qu'en soit l'origine, le carburant libéré tardivement et avec une vitesse d'entraînement faible, se mélange difficilement avec l'air restant et ne prend pas part à la combustion.
- La température de combustion, si elle est insuffisamment élevée, ralentit l'oxydation du gazole et peut stopper la réaction. En l'occurrence, la combustion à proximité des parois peut en être la cause car la température y est relativement faible. La combustion peut aussi se bloquer si le carburant est pulvérisé directement sur les parois du cylindre.

Les hydrocarbures imbrûlés se composent d'hydrocarbures simples et d'aromatiques comme le toluène ou le benzène. Ces derniers sont particulièrement nocifs et ont un effet cancérigène sur l'organisme [28]. Une fois dans l'atmosphère, ils participent à la formation de polluants secondaires, tels que l'ozone en se combinant aux oxydes d'azote sous l'effet du rayonnement solaire.

Chapitre 3

Le code de calcul CFD Kiva-3v

3.1 L'OUTIL CFD

3.1.1 Histoire

L'histoire plus tôt présente le développement des méthodes CFD dans Groupe (T-3) de la Dynamique des Fluide au Laboratoire National Los Alamos dans les années de 1958 à la fin des années 1960. Plusieurs méthodes numériques actuellement utilisées - PIC, MAC, ICE, la méthode ALE et $k-\epsilon$ pour turbulence - est provenu pendant ce temps (à ce temps le laboratoire connu sous laboratoire scientifique Alamos et puis selon laboratoire los Alamos) Computational fluid dynamic (CFD) est basé sur un ensemble d'équations qui ont été dérivées en 1827. Les équations de Navier-Stokes, comme ils sont appelés, décrivent l'espace-temps, variation de masse, quantité de mouvement, et l'énergie dans écoulement de fluide. Jusqu'à l'invention des superordinateurs, leur solution devait être accompli par les techniques analytiques sophistiquées, qui empêcher l'analyse de la plupart des problèmes scientifiques complexes de l'ingénierie, qui ont rencontré dans la technologie d'aujourd'hui [38].

L'utilisation du CFD est dans 1950, comme un outil pour modéliser les armes nucléaires. Les Premiers codes n'étaient pas très sophistiqués, mais ont un rôle de comprendre quelques problèmes comme le fission nucléaire. Finalement, les codes ont été créés pour étudier l'autre genre de problèmes de flux, effet de la turbulence, forces matérielles, le taux chimique de la chaleur dégagé Champs magnétiques, et le transfert de la chaleur. Les premiers modèles CFD ont calculé des solutions pour des flux instable avec une symétrie unidimensionnelle. Avec l'évolution des ordinateurs, il est devenu possible de calculer correctement des flux en deux et ensuite à trois dimensions.

CFD joue un rôle intégrant dans plusieurs champs scientifique et techniques, y compris l'énergie nucléaire, explosifs, physique du plasma, propulsion, science d'espace et astronomie, océanographie. Aujourd'hui CFD est largement utilisé pour résoudre des problèmes des flux, tel que la modélisation des moteurs, avion, sécurité du réacteur nucléaire. Computational Fluid Dynamics, connue aujourd'hui par CFD, est définie comme l'ensemble des méthodologies qui permettent à l'ordinateur de nous fournir une simulation numérique des flux des fluides.

Nous utilisons le mot 'simulation' pour indiquer que nous utilisons l'ordinateur pour résoudre numériquement les lois qui gouvernent le mouvement de fluides, dans ou autour d'un système matériel, où sa géométrie est aussi modélée par l'ordinateur. D'où, le système entier est transformé dans un environnement 'virtuel' ou produit virtuel. Celle la peut être s'opposé à une étude expérimentale, caractérisé par un modèle matériel ou un prototype du système, tel

qu'un avion ou modèle d'automobile dans un tunnel de vent, ou quand mesurer les propriétés dans un prototype moteur.

3.1.2 Pourquoi un tel outil ?

CFD est l'acronyme anglais de « **Computational Fluid Dynamics** ». Il désigne conventionnellement le large domaine des outils numériques, résolvant les équations décrivant le mouvement d'un fluide (équations de Navier-Stokes, de continuité ainsi que de toutes les autres équations de conservation).

La CFD pour "Computational Fluid Dynamics" est l'application particulière de l'outil numérique à l'étude de la dynamique des fluides, qu'ils soient liquides ou gazeux, ou bien même les deux conjugués. Le champ d'investigation est ainsi au moins aussi vaste que celui de la mécanique des fluides elle-même. La manoeuvre consiste à trouver une solution discrète approchée aux équations de Navier-Stokes, avec éventuellement et même très certainement des hypothèses simplificatrices. En effet, l'outil mathématique n'est pas aujourd'hui en mesure de nous donner une solution analytique excepté des cas spéciaux et simplistes, les choses auraient été bien trop simples . . . Autant la précision des données de mesures issues de l'expérience dépend de la qualité et de la technicité des outils utilisés, autant la précision d'une solution numérique dépend fortement de la qualité de la discrétisation, autrement dit de la qualité des schémas et méthodologies numériques utilisés dans le sens mathématique du terme [39].

L'étude des écoulements de fluides a longtemps été confinée à l'expérience et à l'analyse de stabilité. L'outil numérique apporte ainsi une troisième voie d'étude complémentaire. Si au début des années 80, ce domaine était quasi réservé à la recherche et peu au développement de solutions industrielles, la tendance a largement évolué avec l'arrivée de codes de simulation commerciaux comme KIVA, FLUENT ou STAR CD. La puissance des super calculateurs toujours de plus en plus importante est aussi un paramètre essentiel dans cette évolution. On obtiendra une solution discrète approchée d'autant plus précise que le maillage utilisé sera d'autant plus fin. Il est nécessaire d'avoir à l'esprit que doubler le nombre de cellules de discrétisation dans chaque direction revient à multiplier le nombre total de cellules par 2^3 . Les temps de calcul étant approximativement linéairement dépendant du nombre de cellules, ils peuvent devenir très rapidement extrêmement coûteux. Or, l'évolution des puissances de calcul est telle aujourd'hui qu'elle est multipliée d'une décade tous les 4 ans. Une ère nouvelle pour la simulation numérique va certainement voir le jour dans un proche avenir. Les calculs tridimensionnels d'écoulements instationnaires commencent à être de l'ordre du réalisable avec des techniques numériques toujours de plus en plus sophistiquées [39].

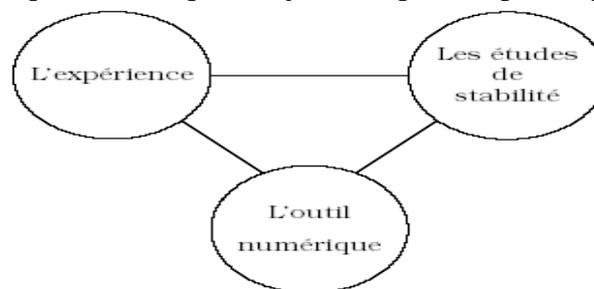


Figure 3.1 : Les trois outils à la disposition de l'industriel ou du chercheur pour l'étude de la dynamique des fluides

Que ce soit les industriels, pour dimensionner de nouvelles technologies, ou les chercheurs, pour comprendre les mécanismes de la physique des écoulements, les trois outils que sont

l'expérience, l'analyse de stabilité et l'outil numérique deviennent aujourd'hui tous nécessaires et complémentaires.

Depuis son essor véritable vers la fin des années soixante, la CFD a évolué à un rythme soutenu. Les progrès significatifs dans le domaine des méthodes numériques (schémas de discrétisation spatiale et d'intégration temporelle, techniques de maillage) ont permis de multiplier les applications de la simulation numérique : élargissement de la gamme de nombre de Mach, prise en compte de la turbulence, complexification des géométries. Parallèlement, l'amélioration continue des performances des ordinateurs a permis à la CFD de trouver une place à part entière dans les cycles de conception, en réduisant suffisamment les temps de calculs pour traiter des configurations représentatives de la réalité industrielle. La maturité des codes de calculs acquise dans la dernière décennie doit maintenant être complétée par un questionnement sur la crédibilité qualitative et quantitative des résultats numériques. En effet, l'une des principales qualités de la CFD est de permettre d'analyser rapidement des options de conception, sans recourir à de longues et coûteuses campagnes d'essais. Se dégage donc clairement la nécessité de quantifier la confiance dans les résultats de simulations [40].

La figure 3.2, donne le cadre conceptuel dans lequel s'inscrit la simulation numérique

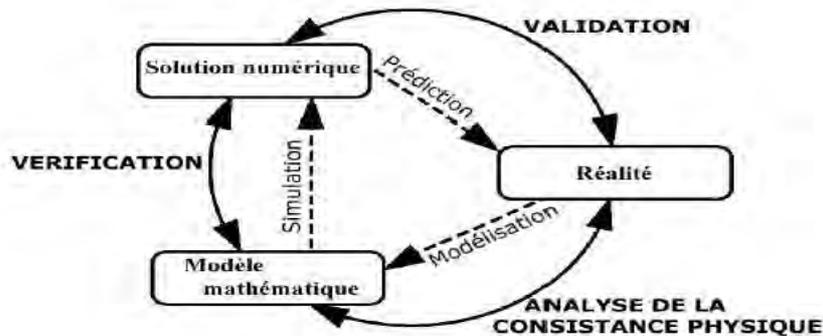


Figure 3.2 : Représentation synthétique des liens entre la Réalité et les résultats de simulation

La CFD (Computational Fluid Dynamics) est simplement le calcul numérique appliqué à la mécanique des fluides. Cela consiste à résoudre dans une géométrie donnée les équations fondamentales de la mécanique des fluides, que l'on peut éventuellement coupler aux équations de transfert thermique ou de réaction chimique. Historiquement, la CFD a commencé à se développer en génie mécanique, pour étudier les écoulements autour d'un objet afin de mieux le profiler (ailes d'avions, automobiles) [47]. 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.

L'augmentation de la puissance des ordinateurs a autorisé la prise en compte de plusieurs paramètres dans des conditions plus complexes. Cette tendance continuera certainement et les modèles proposés dans les codes de calcul seront de plus en plus complets et de mieux en mieux validés; ils devraient déboucher sur la possibilité de mieux traiter les interactions entre la turbulence et la chimie [41].

L'augmentation de la puissance des moyens de calcul ces dernières années a encore accentué l'intérêt de la mécanique des fluides numérique (en anglais, CFD : Computational Fluid Dynamics). En effet, son faible coût, en regard de celui des mesures expérimentales,

permet de multiplier les essais numériques. Cela constitue généralement une première étape dans l'élaboration d'un nouveau procédé.

Le fonctionnement des moteurs automobiles actuels pose de nombreux problèmes physiques nécessitant une modélisation. Parmi ceux-ci, on peut citer :

- L'injection directe du carburant dans la chambre de combustion. Dans le cas des moteurs Diesel à rampe commune (en anglais common rail), la pression d'injection atteint aujourd'hui 1700 bars.
- Le développement de nouveaux modes de combustion comme le mode CAI (Controlled auto-Ignition) ou le mode HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) qui nécessitent l'adaptation ou la reformulation des modèles de combustion existants
- L'utilisation des gaz résiduels dans les nouveaux modes de combustion. Ces gaz conduisent à une stratification de composition et de température qu'il faut prendre en compte.
- Les émissions de polluants. Bien que les moteurs soient de plus en plus propres, les normes ne cessent de devenir de plus en plus strictes, ce qui constitue un vrai challenge pour les constructeurs.
- L'utilisation de nouveaux carburants (biocarburants, hydrogène). En effet, ces derniers ont des caractéristiques différentes des carburants classiques, ce qui influence considérablement la formation du mélange et la combustion par la suite.

Le mouvement du piston implique des phénomènes fortement instationnaires qui représente une difficulté supplémentaire dans la modélisation. L'amélioration des modèles physiques permet sans cesse d'augmenter la prédictivité des simulations numériques. Cette étude s'inscrit dans cette perspective d'amélioration en développant un nouveau modèle pour la description écoulements diphasiques dans les moteurs. Ce modèle 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.

Dans les vingt dernières années, un domaine de la recherche appelé la CFD (Computational Fluid Dynamics) est apparu. La CFD est l'étude des écoulements fluides par des méthodes numériques. Ce domaine complète les techniques d'expérimentation physique a fin de mieux comprendre les écoulements de fluides et leurs effets sur un solide. La visualisation des résultats tant ex-périmentaux que numériques apparaît nécessaire à la compréhension de ces phénomènes.

La visualisation de l'écoulement d'un fluide autour d'un objet n'est pas immédiate ; spécialement quand le fluide est transparent comme l'air ou l'eau et qu'il se déplace à grande vitesse. La visualisation des écoulements fournit une aide précieuse pour la compréhension des phénomènes de mécanique des fluides.

3.1.3 Principes physiques de CFD

Les codes de champ, ou codes CFD (Computational Fluid Dynamics), résolvent les équations régissant les mouvements d'un fluide. Ces équations traduisent la conservation de la masse et de la quantité de mouvement du fluide (équations de Navier-Stokes), ainsi que la conservation de son enthalpie. Certains codes sont aussi en mesure de décrire le transport de polluant ou les réactions chimiques au sein d'un fluide. Il existe un grand nombre de codes CFD disponibles (plus d'une centaine), qu'ils soient commerciaux, du domaine public ou encore propre à certaines institutions. Le tableau 3.1. Recense les codes de calcul les plus

répandus. On peut observer que l'essentiel des codes est d'origine anglo-saxonne, et que la méthode des volumes finis, que nous décrirons ultérieurement, est la plus employée [42]. 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. Les problèmes à résoudre peuvent être en régime permanent comme en régime instationnaire.

Pour accomplir l'objectif de cette étude, un outils CFD KIVA-3v code originairement développé par le laboratoire utilisé.

Nom du code	Origine	Type	Méthode
ARIA	Abacus, Royaume-Uni	C	FV
ASTEC	Harwell, Royaume-Uni	C	FV
CALC-BFC	Chalmers, Suède	R	FV
CHAMPION	TUD, Pays-Bas	R	FV
EOL-3D	INRS, France	R	FV
EXACT3	NIST, Etats-Unis	R	FV
FEAT	Royaume-Uni	C	FE
FIDAP	FDI, Etats-Unis	C	FE
FIRE	AVL, Allemagne	C	FV
FLOTRAN	Computflow	C	FE
FloVENT	FLOMERICS, Royaume Uni	C	FV
FLOW -3D	Harwell, Royaume- Uni	C	FV
FLUENT	Fluent Inc., Etats-Unis	C	FV
JASMINE	BRE-FRS, Royaume- Uni	R	FV
KAMELEON	SINTEF, Norvège	R	FV
KIVA	Etats-Unis	C	FV
PHOENICS	CHAM, Royaume- Uni	C	FV
SIMULAR AIR	AVL, Allemagne	C	FV
STAR-CD	CD, Royaume-Uni	C	FV

Tableau 3.1 : Codes CFD. C = code commercial, R= code de recherche, FV = volumes finis, FE = Éléments finis (d'après (IEA , 1993)).

3.2 LE CODE DE CALCUL

3.2.1 Description générale du code de simulation KIVA 3v

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. L'Amélioration des processus de combustion est par conséquent à une grande importance pour réduire la consommation du combustible et les émissions.

Origine de kiva

Les origines de KIVA peuvent être trouvées dans les méthodes computationnelles utilisées pour les modèles des armes nucléaires. Avant les années 1970, Dan Butler et une petite équipe du computational fluid dynamics (CFD) groupe au laboratoire Los Alamos National (États Unis d'Amérique) ont développé un programme de la dynamique des fluides réactif pour étudier l'hydrogène fluor (HF) systèmes laser chimiques. En 1976 La fondation de Science Nationale a parrainé une réunion dans laquelle les participants étaient demandés proposer des méthodes de fabriquer des moteurs automobiles plus propres. Un participant invité à cette réunion, Butler rendu en compte que le programme pour modéliser les lasers chimiques pourrait être adaptés pour simuler des flux réactifs dans un moteur de combustion interne. C'était évident que CFD multidimensionnel avait été pour une grande part oublié par l'industrie comme un outil de l'analyse. Les participants conclurent donc qu'ils existent évidemment un travail lié au laboratoire Los Alamos et les chercheurs de la combustion [43].

Le rôle du groupe de la dynamique des fluides à Los Alamos était le développement de plusieurs programmes de la simulation de la combustion, initialement, être utilisés exclusivement par les participants du groupe actifs. A ce moment, l'industrie n'avait ni CFD ni les besoins informatiques nécessaires justifier un tel développement, mais les deux pourraient être satisfaites par Los Alamos. Avec la parution de l'industrie automobile, le programme évolua dans plusieurs directions. Initialement, il y avait un programme à deux dimensions, appelé APACHE avec des limites fixes. Ensuite, dans CONCHAS, ou la possibilité de déplacer les limites a été ajoutée pour représenter le mouvement d'un piston, lequel a permis à un mélange de air-combustible d'être comprimé. Le troisième CONCHAS-SPRAY, inclut un modèle sophistiqué fuel-spray avec évaporation. La quatrième étape de l'évolution ajouta une possibilité de trois dimensions; ce programme est devenu KIVA.

Comme nous avons vu, KIVA a évolué à travers une série de programmes qui étaient considérés innovateurs pour leur temps. La version initiale de KIVA, écrite en 1981-82, était trop lente, être d'usage pratique pour les problèmes complexes. En conséquence, l'algorithme de la solution numérique a été révisé et la technique de la solution implicite en usage à ce moment était remplacée par une méthode du subcycling explicite. Pour une méthode explicite, la valeur pour le nouveau temps d'une quantité telle que la pression ou la température est une fonction des valeurs anciennes (précédentes), et peut être obtenue directement. Pour la méthode implicite, la nouvelle valeur au nouveau temps est une fonction d'autres valeurs de nouveau temps, et en général doit être obtenue au moyen d'une itération.

KIVA a été libéré pour faire des tests par les laboratoires de recherches sur les moteurs en 1983. Bientôt par la suite il a été libéré aux moteurs Compagnie, Université de Princeton, Université de Purdue, et le Laboratoire National Sandia à Livermore [43].

La première parution publique [47], [48] de KIVA a été faite dans 1985 à travers le Centre national de logiciel d'énergie National (NESC) au Laboratoire National Argonne.

Intervalle large d'utilisation du code kiva

En 1987, l'équipe de Los Alamos a présenté un papier dans un congré Internationale de la Société d'Ingénieurs d'automobiles (SAE) [49]. Il a discuté un calcul KIVA d'un moteur à injection direct à charge stratifié (DISC) avec une géométrie à trois dimensions complexe prend en considération la modélisation de la compression d'air, le processus d'injection, l'allumage, et la brûlure du mélange air combustible. Les calculs ont été effectués sous trois différentes conditions de la charge du moteur; les résultats obtenue son comparés avec les données expérimentales, l'évolution de la pression dans le cylindre et l'analyse des produits des gaz d'échappement. Parmi ces résultats, une partie est validée avec l'expérimentales et l'autre n'est pas. Pour cela une première étude détaillée avait été rapportée; c'est le papier SAE en 1988 pour faire une contribution remarquable à la littérature automobile [43].

Une étude seule et complète constitue un banc d'essai complet. Le groupe de Los Alamos et autres utilisateurs mondiaux a bientôt commencé de tester KIVA pour des différentes applications complexe et difficiles. Avec le temps, un nombre considérable des papiers a étaient présentés, Le modèle était progressivement être plus effectif et réaliste, en résultant une version amélioré dans 1989, appelé KIVA-II [50], [51].

Usage et acceptation du programme ont grandi rapidement après la parution du KIVA-II ; à ce moment, il est utilisé par des grands fabricant d'automobile, des laboratoires fédéraux, des départements de génie mécanique des universités technique, ...etc.

En 1990, un brevet a été publié d'un Moteurs générale [52] avec une technique de piston à une haute, ou spécifiquement, simulation par ordinateur à trois dimensions identifiée pour faire l'invention possible. Le programme KIVA-II a joué un rôle majeur dans cette opération de développement.

Une autre région dans laquelle KIVA-II est utilisé lourdement est dans la modélisation de la combustion des turbines à gaz. Sous parrainage de NASA, les chercheurs mènent un programme professionnel combiné CFD-Expérimental pour étudier une variété models de chambre de combustion. Leur but est à Contribuez des modèles amélioré avec une réduction des NO, pour la production des prochaine génération des moteurs d'avion civils.

En 1992, le Laboratoire National Los Aiamos a accordé une licence pour KIVA pour Cray Research, limited to Cray platforms.

Une autre avenue pour le transfert de la technologie a été créée par l'utilisation croissante de KIVA dans les écoles d'ingénierie au États unis. Avec les thèses de magistères et doctorat, les étudiants d'ingénierie utilisant ce programme pour leur travail de thèse, sont immédiatement utiles à industrie.

Parce que KIVA-II est dans le domaine public, c'est aussi, utilisé par les fabricants automobiles et beaucoup d'universités et laboratoires en France, Italie, Angleterre, Allemagne, Suède, Canada, et Japon. Les Groupes Utilisateurs de KIVA publient des bulletins d'informations régulièrement aux États-Unis, Europe, et on peut dire aussi au Japon [43].

KIVA-3 : la version la plus tardive

Les deux premières versions de KIVA traites les écoulements des fluides dans le cylindre et des variétés problèmes de combustion des systèmes ouverte, mais ils peuvent devenir assez inefficaces pour l'utilisation dans des géométries complexes tels que les valves en mouvement, les préchambres diesel. Dans ces deux versions, le domaine entier d'intérêt, doit être compris par un seul bloc pour un calcul multizone qui peuvent exiger qu'un nombre considérable de zones. La version la plus tardive du programme KIVA, connue sous KIVA-3, est projetée pour vaincre ce manque [8]. Il diffère de KIVA-II dans cela il utilise une grille des géométries complexes modelés vraiment avec plus grande efficacité que KIVA- II [43].

KIVA-3 (1993) [53], KIVA-3V (1997) [54] et KIVA-3V Rel-2 (1999) [55] ont offert les options de faire un maillage structuré par blocs, d'ajouter des soupapes verticales ou obliques et des outils de visualisation « post-processeur ».

KIVA-3V a été employé intensivement par des laboratoires universitaires et industriels pour effectuer des simulations de la combustion dans les moteurs et pour faire des développements de sous-modèles physiques. Une nouvelle version du code KIVA (KIVA-4) a été développée pour résoudre le même système d'équations mais avec des possibilités de maillage non structuré.

Le mouvement du piston dans KIVA-3 est selon une approche Lagrangienne, mais comme dans premières versions de KIVA, et utilise une approche nouvelle appelée snapper.

3.2.2 Structure standard de KIVA-3V

Il est composé, comme tout code de type CFD, de trois modules qui sont : le pré-processeur "**K3prep**", le solveur "**Kiva3v**" et le post-processeur "**K3post**".

K3prep : " pré-processeur" génération de maillage : Il permet de construire la géométrie du domaine de calcul et de subdiviser ce dernier en petits volumes ou cellules de calcul. L'ensemble de ces volumes élémentaires constitue le maillage.

KIVA 3v : programme principal de calcul. L'ensemble des équations sont discrétisées et résolues.

K3post : " post-processor " produit les fichiers de résultats. Le Post-processeur permet de visualiser les différents résultats (champs de vitesse, lignes de courant, contours de la surface, etc.) [44].

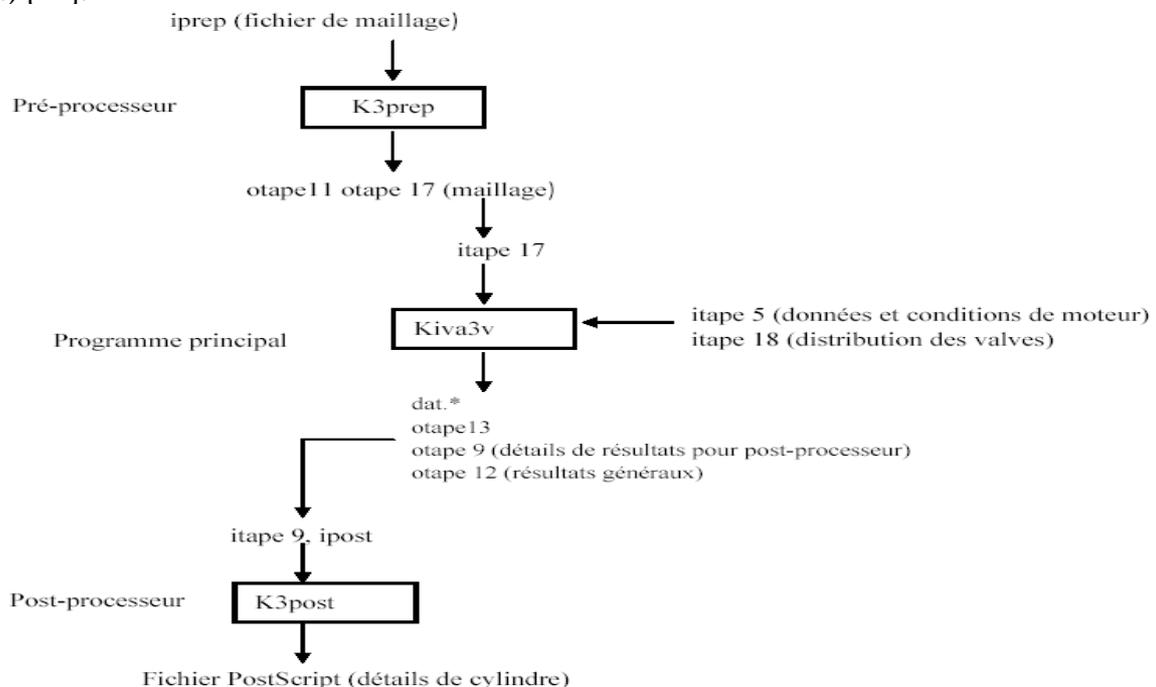


Figure 3.3 : Structure standard de KIVA-3V

3.2.3 Les différents types des mailles qui peuvent être utilisées dans KIVA:

Les différents types des mailles utilisées dans le code de calcul kiva-3v sont présentés par la Figure 3.4 [45].

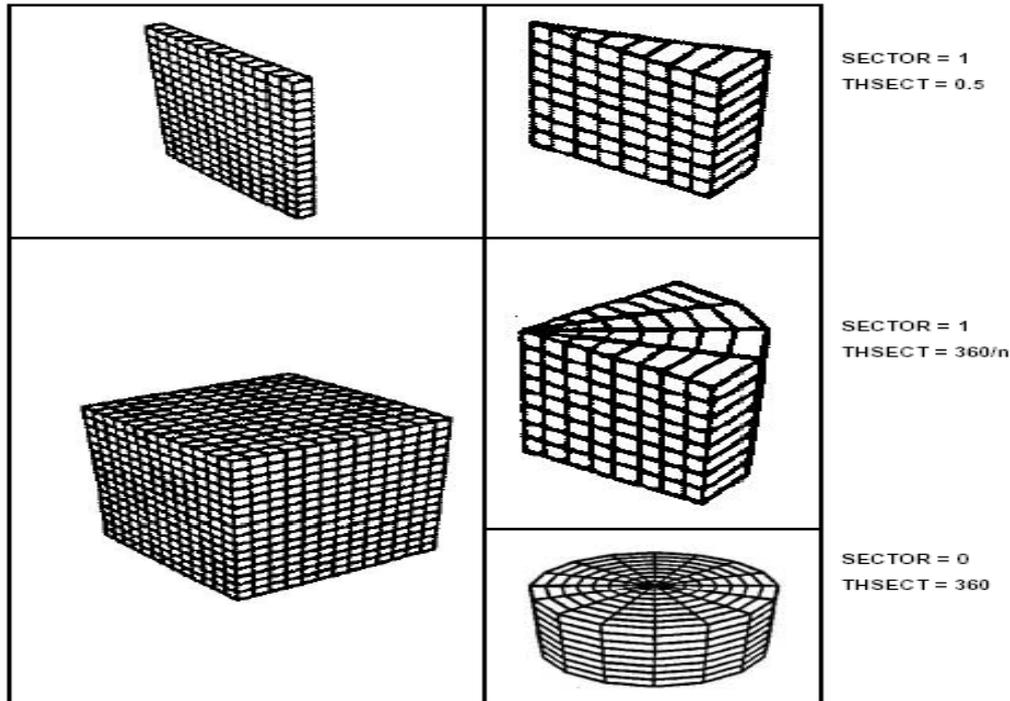


Figure 3.4 : Les différents types de maille utilisée

3.2.4 Modélisation numérique avec KIVA

Il existe plusieurs articles publiés portant sur la modélisation des moteurs à piston à l'aide du logiciel KIVA. En fait, ce logiciel est probablement celui qui est le plus utilisé pour modéliser l'écoulement du fluide ainsi que l'injection de carburant dans les moteurs à pistons. En plus d'être conçu principalement pour la modélisation des moteurs à pistons, la popularité du logiciel est également due au fait que son code de programmation est ouvert. Ceci implique donc, que l'utilisateur peut inclure dans le logiciel ses propres modèles de combustion ou d'écoulement ou encore, développer son propre sous-programme de génération de remaillage. La version 3V de KIVA et qu'elle est plutôt récente (1997), le nombre de publications fait sur cette version est plus difficile à trouver. Par contre la version précédente (1989) est largement utilisée et le nombre de publications est plus important [46].

Un des articles, très intéressant, est celui de Fabre et al. [19] où l'on illustre les possibilités du logiciel KIVA-11 ainsi que des améliorations apportées afin d'obtenir une modélisation 3D du phénomène étudié. Par la suite, les auteurs ont testé la robustesse du logiciel et validé les modèles physiques employés par KIVA-II. Les auteurs permettent ainsi de valider les résultats obtenus à l'aide du logiciel à ceux obtenus par l'expérimentation. Ils vérifient également les lois de paroi employées dans ce logiciel, qui inclut l'aspect mécanique et thermique en vérifiant le flux thermique tel que calculé par KIVA et selon leurs expérimentations. Finalement, ils vérifient le modèle de combustion employé. Leur conclusion est que le logiciel KIVA-II reproduit Mathématiquement de façon assez satisfaisante leurs observations expérimentales [46].

Le deuxième article d'intérêt est de Baritaud et al. [20] de l'Institut Français du Pétrole et qui partant de résultats expérimentaux, modifient le code KIVA-II afin d'obtenir un modèle numérique dont les résultats s'approchent davantage des résultats expérimentaux. Ils en viennent à la conclusion que le modèle modifié est valable et qu'il est envisageable dans un futur rapproché de modéliser et de prédire les émissions polluantes à l'aide de KIVA.

Finalement un dernier article portant sur KIVA-3 est celui écrit par Corcione et al. [21]. Ils utilisent KIVA pour mieux comprendre les phénomènes d'évaporation des gouttelettes de carburant dans un moteur 2 temps à injection directe utilisé dans une motocyclette. De plus, leur modélisation leur permet de visualiser les phénomènes se produisant à l'intérieur du cylindre. Leurs objectifs ultimes sont d'obtenir le positionnement optimal ainsi que le temps d'injection optimal permettant de réduire les émissions polluantes ainsi que la consommation de carburant. Ils utilisent KIVA-3 dont ils modifient le modèle de turbulence afin de tenir compte de la haute turbulence rencontrée dans les moteurs à pistons lorsqu'ils tournent à de hauts régimes. D'après leurs résultats, les moteurs à 2 temps à injection directe doivent injecter très tôt le carburant lorsque le régime moteur est élevé afin de favoriser un mélange homogène.

Par contre, lorsque la charge appliquée au moteur est partielle ou lorsque le moteur est au ralenti, il est préférable d'injecter beaucoup plus tard [46].

3.3 Le Modèle à trois dimensions

Le modèle présenté ici est basé sur KIVA-3v, un outil de simulation, développé au Laboratoires Nationaux Los Alamos (Etats Unis d'Amérique), pour la solution numérique des problèmes d'écoulements turbulents et réactifs avec spray. Les sections suivantes résument brièvement les traits principaux de cette base et les améliorations antérieures [56].

3.3.1 la base de kiva-3v

KIVA-3v résout des équations du transport qui décrivent le flux laminaire ou turbulent d'un mélange chimiquement réactif des gaz idéaux. La solution de la phase gaz est associée à la solution de l'équation de l'évolution de spray. Le modèle de la chimie est selon deux façon, la cinétique contrôlé et les réactions d'équilibre.

3.3.1.1 Solution de la phase gazeuse

Les équations de conservation de masse d'espèces et de masse totale, quantité de mouvement, l'énergie interne spécifique, l'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation sont résolus par l'utilisation de la technique des volumes finies : c'est la méthode arbitraire lagrangienne eulérienne (ALE) implanté dans kiva-3v, formulée pour toutes les formes de maillage.

Les options de condition aux limites disponible inclure la périodicité et la symétrie, limites ouvertes avec aussi la pression ou la vitesse spécifié et solide aussi bien que parois en mouvement. Les fonctions de paroi sont employées pour décrire la couche limite turbulente, y compris un modèle de transfert de la chaleur à travers la couche limite turbulente au paroi à Température constante. Les parois Adiabatiques sont la deuxième option respectée en ce qui concerne le transfert de chaleur [56].

Les conditions initiales pour l'état thermodynamique sont communément prescrit comme des valeurs uniforme à l'intérieur du domaine de calcul et à toutes limites ouvertes. Le champ de flux est initialisé en repos ou par spécifiant d'un tourbillonnant en mouvement. Les valeurs initiales de l'énergie cinétique turbulente et du taux de la dissipation sont exigées pour définir l'état initial des flux turbulents. Le dernier peut être Initialisé en basons sur des suppositions communes pour une échelle de longueur associée.

3.3.1.2 Modèle de spray

a. généralités

Un modèle discret des gouttelettes (DDM) est appliqué pour décrire la dynamique de la phase liquide. Pour ce but, l'équation d'évolution du spray est discrétisé et appliqué à un nombre prescrit des gouttelettes représentatives caractérisées par des propriétés identiques. les valeurs initiales des propriétés de la gouttelette sont définies à travers l'injection des conditions aux limites.

L'état ambiant dans les calculs de l'évaporation est sélectionné comme l'état computationnelle des cellules dans lesquelles les gouttelettes représentatives individuelles résident. En conséquence, la source terme résulter d'évaporation est assigné aux cellules environnantes respectifs.

La collision des gouttelettes représentatives est autorisée seulement pour les gouttelettes résider dans la même cellule computationnelle. La probabilité et les caractères d'un événement de collision potentiel sont déterminés stochastiquement : Il peut résulter aussi dans une déviation des autres gouttelettes inchangées ou dans la coalescence. L'option de la modélisation fractionnement pour les collisions à haut impact n'est pas fournie, ainsi les gouttelettes résultantes peuvent être instable.

Le breakup des gouttelette est modélisé par le modèle TAB (voyez 3.1.2.3). KIVA-3 dans son état de base ne fournit pas de modèle pour la désintégration de jet. L'effet de l'interaction Droplet/wall n'est pas estimé en détail [56].

KIVA-3 seulement prend en considération le phénomène de collage des gouttelettes qui s'heurte sur une paroi. L'interaction entre la gouttelette et la paroi, par exemple transfert de la chaleur, est négligée.

b. Introduction des nombres adimensionnels caractéristiques d'un jet liquide turbulent

Afin de qualifier a priori les différents phénomènes physiques que peut rencontrer un jet liquide turbulent comme un spray Diesel, il est donc tout d'abord nécessaire d'introduire les principales Forces/ énergies qu'un spray rencontre lors de son développement dans une chambre de combustion. Il y a tout d'abord la notion de force aérodynamique ou force d'inertie, ce qui revient à caractériser la quantité de mouvement du jet issue de la pression d'injection imposée dans la rampe commune en amont de l'injecteur. Face à l'aérodynamique du jet, la phase liquide possède une certaine résistance à la rupture en plusieurs paquets liquides : la force de tension de surface. Enfin, la notion de viscosité, qu'elle soit celle de la phase liquide ou de la phase gazeuse, est également importante à introduire car elle symbolise les effets de dissipation de l'énergie cinétique.

Comparer les différentes forces mises en jeu lors de l'atomisation d'un jet liquide est intéressant car cela permet de définir certains régimes de fractionnement ou telle force sera prépondérante.

C'est dans cette optique que sont définis les nombres adimensionnels suivants [57]:

Le nombre de Weber We permet de quantifier le rapport entre les forces d'inertie et les forces de tension de surface donné par l'équation 3.1 :

$$We = \frac{\text{Forces d'inertie}}{\text{Forces de tension de surface}} \quad (3.1)$$

Il est possible de définir plusieurs nombres de Weber, à partir de l'expression (Eq 3.2) suivante :

$$We = \frac{\rho U^2 L}{\sigma_l} \quad (3.2)$$

ρ étant une densité, U une vitesse et L une longueur, toutes les trois choisies comme étant caractéristiques du phénomène que l'on souhaite identifier. σ_l est la tension de surface de la phase liquide [57].

Le nombre de Weber permet par exemple de caractériser la capacité d'une goutte à résister grâce à la tension de surface aux forces aérodynamiques exercées par le gaz environnant, en le définissant de la façon suivante :

$$We_g = \frac{\rho_g (U_l - U_g)^2 D_d}{\sigma_l} \quad (3.3)$$

Les indices "l" et "g" signifiant respectivement "liquide" et "gaz". D_d est la longueur caractéristique choisie ici, à savoir le diamètre de la goutte ("d" pour "droplet").

Il est aussi possible de définir un nombre de Weber caractérisant la résistance de la goutte par l'effet de la tension de surface aux forces aérodynamiques mises en jeu lors de la collision de deux gouttes numérotées 1 et 2 :

$$We_l = \frac{\rho_l (U_{l,1} - U_{l,2})^2 (S_{coll})^{1/2}}{\sigma_l} \quad (3.4)$$

S_{coll} étant la surface de contact lors de la collision des deux gouttes.

Le nombre de Reynolds Re caractérise le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses, ou de façon plus qualitative, le rapport des transferts par convection et par diffusion de la quantité de mouvement.

$$Re = \frac{\text{Forces d'inertie}}{\text{Forces visqueuses}} \quad (3.5)$$

Il s'écrit de façon générale ainsi :

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (3.6) \quad \nu$$

étant la viscosité dynamique caractéristique.

Il est ainsi possible de définir un nombre de Reynolds "gazeux" pour la goutte, caractérisant le ratio des forces aérodynamiques exercées par le gaz environnant la goutte et des forces de viscosité du gaz :

$$Re_g = \frac{|U_l - U_g| D_d}{\nu_l} \quad (3.7)$$

Suivant le même schéma que pour le nombre de Weber d'écrit plus haut, il est possible de définir un nombre de Reynolds collisionnel, quantifiant le rapport des forces d'inertie mises en jeu lors de la collision des gouttes numérotées 1 et 2 sur les forces dissipées dans les gouttes lors de la collision :

$$Re_l = \frac{|U_{l,2} - U_{l,1}| D_d}{\nu_l} \quad (3.8)$$

Le nombre d'Ohnesorge Oh est une combinaison des deux précédents.

$$Oh = \frac{\sqrt{We}}{Re} \quad (3.9)$$

Il peut ainsi être défini comme étant le rapport entre les forces de viscosité d'un coté et les forces aérodynamiques et de tension de surface de l'autre (Eq 3.10):

$$Oh = \frac{\text{Forces visqueuses liquides}}{\text{Forces d'inertie}^{\frac{1}{2}} \text{ Forces de tension de surface}^{\frac{1}{2}}} \quad (3.10)$$

Il est utilisé pour introduire l'effet de la viscosité du liquide dans le processus de déstabilisation d'une goutte, par glissement dans le gaz ou lors de collisions entre gouttes [57].

Ces nombres adimensionnels étant définis, ils vont permettre de classer les différents régimes de fractionnement d'un jet liquide, tels qu'ils sont observés expérimentalement.

c. Les modèles de fractionnement (breakup)

Le phénomène étudié est le fractionnement d'un jet liquide cylindrique ou annulaire pénétrant dans un milieu gazeux. Plusieurs modèles de fractionnement d'un jet liquide ont été proposés dans les codes CFD par différents groupes de recherche (voir, un résumé récent par Tanner, 1997). Les détails de l'implantation du modèle sont disponibles dans la littérature (Reitz and Diwakar, 1987; Pilch and Erdman, 1987; Hsiang and Faeth, 1992; Hsiang and Faeth, 1995).

A une distance très proche de l'injecteur, le jet se fractionne en gouttes, dont la gamme des tailles varie selon les conditions d'écoulement, qui peuvent ensuite elles-mêmes se fractionner. L'effet de fractionnement de la gouttelette sur les moteurs à spray a été étudié par **Reitz et Diwakar (1986)** qui a modélisé des expériences sur les cônes creux des sprays d'un injecteur oscillant.

L'injection du liquide a été simulée par l'utilisation de la méthode d'injection 'blob' de Reitz et Diwakar [32]. Dans cette méthode le liquide est introduit dans l'orifice de sortie sous forme de taches à un diamètre caractéristique égale au diamètre d'orifice de sortie [33]. Le processus d'atomisation est une conséquence de

1. Les troubles dans l'orifice intérieur, principalement dû à la formation de cavité au coin d'entrée d'orifice, qui est responsable de la formation d'une partie intéressante du liquide fragmenté.
2. Forces aérodynamiques qui cassent les fragments du liquide à des très petites gouttelettes minuscules.

On distingue ainsi le fractionnement primaire (primary breakup), pour lequel les particules liquides sont arrachées directement au cœur liquide du jet, et le fractionnement secondaire (secondary breakup), pour lequel les particules sont issues du fractionnement d'une particule déjà existante. Le précédent prend une place dans une région près de l'orifice à un grand nombre de **Weber**. Ce nombre de Weber W joue donc un rôle primordial.

Dans le KIVA, le fractionnement des particules liquides s'effectue automatiquement selon la modélisation qui est en est faite, en fonction des conditions locales qu'elles rencontrent dans le domaine de calcul [58].

Divers auteurs ont élaboré des modèles de fractionnement [58]. Ces modèles traduisant l'évolution des déformations de la surface des particules ou des jets sous l'action des forces d'inertie dues au gaz environnant et des forces de tension superficielle.

Le processus d'atomisation n'est pas seulement déterminé par l'interaction entre les phases liquides et gazeuses mais aussi par les phénomènes internes de l'orifice comme la turbulence et la cavitation (Fig 3.5) [58]. L'atomisation qui a lieu en aval le plus loin du spray dû aux processus d'interaction aérodynamiques, et il est très indépendant du type de l'orifice est appelé fractionnement secondaire. Les modèles de fractionnement classiques comme TAB (Taylor Analogy break-up), et la WAVE break-up basé sur l'analyse de l'instabilité du jet

liquide ne distinguez pas entre les deux processus. Les paramètres de ces modèles ont été réglés habituellement pour rendre pareil les données expérimentales en aval le plus loin la région de fractionnement secondaire [58]. Originaires, ces paramètres sont supposés dépendre seulement de la géométrie l'orifice, en réalité, ils expliquent aussi les effets numériques.

Autre modèles comme ETAB (Enhanced TAB), FIPA (Fractionnement obtenue par Accélération) ou KH-RT (Kelvin-Helmholtz - Rayleigh-Taylor) traite la région d'où le fractionnement primaire séparément. D'où, il offre en principe la possibilité de simuler les deux processus de fractionnement indépendamment

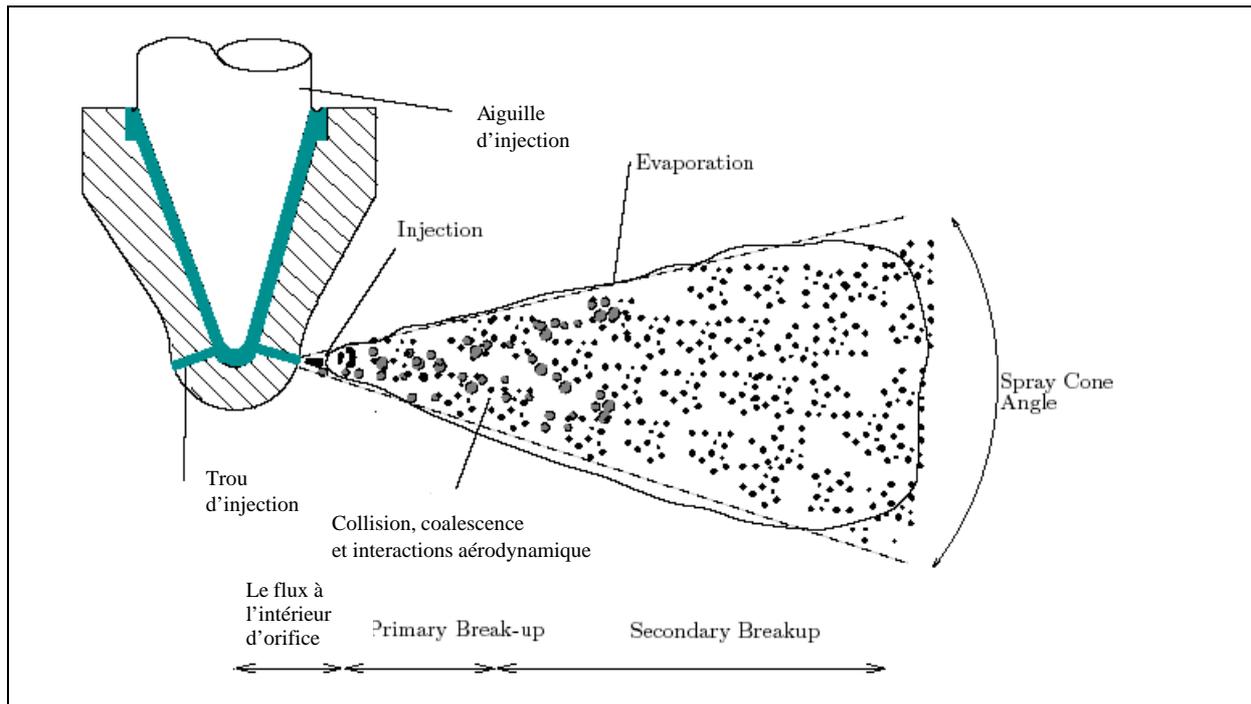


Figure 3.5 : Schéma d'un spray orifice montre différents flux (collision, coalescence, atomisation, évaporation) régimes.

1. le model TAB

Le model Taylor Analogy Breakup (TAB) basé sur l'analogie de Taylor est une méthode classique pour l'estimation et le calcul du fractionnement de la gouttelette [36]. Il est résumé comme:

1. la déformation de la gouttelette est en terme de changement radial d'une petite section le terme de force F , survient de la résistance aérodynamique, la force réparatrice kx est donné par la tension de la surface, (dx/dt) due à la viscosité du liquide. Le fractionnement de la goutte est obtenue quand $x > a/2$, ou a est le rayon de gouttelette correspond à $We > We_{crit} = 6$.
2. La dimension de la goutte produite est déterminée par une considération d'énergie égale surface, oscillation et énergies cinétiques radiales du la goutte produite.
3. Les défauts du modèle de TAB: Ne convenu pas pour L'atomisation et le produit la dimension de la gouttelette est sous-estimée.

Les modèles employés dans KIVA pour l'injection de gouttelettes sont longuement discutés dans [24] et résumé brièvement par Corcione et al. [21].

Le modèle TAB (pour “Taylor Analogy Breakup”) à été proposé par O’Rourke et Amsden [57] en 1987 et se base, comme son nom le suppose, sur une analogie proposée par Taylor entre L’oscillation d’une goutte et celle d’un système [Masse + Ressort] de masse m . En effet, dans cette analogie, la force de raideur k du ressort est apparentée à celle de tension de surface σ_l . De plus, les forces aérodynamiques sont considérées comme un forçage extérieur. Les auteurs ont ajouté à cette analogie la notion de force d’atténuation, ou force d’amortissement dû aux forces de viscosité du liquide. L’équation d’un oscillateur harmonique forcé et amorti est [57]:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F - cx - b \frac{dx}{dt} \quad (3.11)$$

$$m \ddot{x} = F - kx - d \dot{x} \quad (3.12)$$

x étant défini comme le déplacement de l’équateur de la goutte liquide de sa position d’équilibre (fig 3.6) [57].

En se référant à l’approche de Taylor, les paramètres adaptés au cas d’une goutte sont les suivants :

$$\frac{F}{m} = C_f \frac{\rho_g u_r^2}{\rho_l r_1}; \quad \frac{k}{m} = C_k \frac{\sigma_l}{\rho_l r_1^3}; \quad \frac{d}{m} = C_d \frac{\mu_l}{\rho_l r_1^2} \quad (3.13)$$

Adimensionnant x par $y = x / (C_b r_1)$ dans l’équation 12, on obtient finalement l’équation 14 :

$$\ddot{y} + C_d \frac{\mu_l}{\rho_l r_1^2} \dot{y} + C_k \frac{\sigma_l}{\rho_l r_1^3} y = \frac{C_f}{C_b} \frac{\rho_g u_r^2}{\rho_l r_1} \quad (3.14)$$

C_b , C_d , C_k et C_f sont des constantes de modélisation introduites par les auteurs, déterminées à l’aide de comparaisons avec des résultats expérimentaux : $C_b = 0.5$, $C_d = 10$, $C_k = 8$ et $C_f = 1/3$.

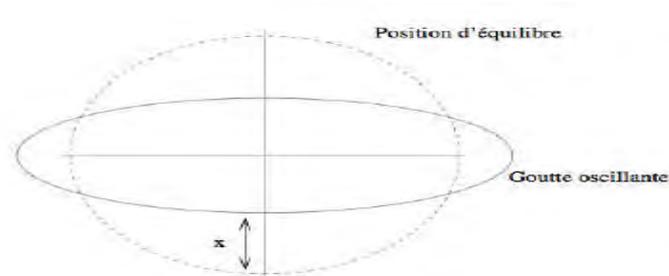


Figure 3.6 : Oscillation de la goutte liquide autour de son état d’équilibre

Ce modèle prévoit aussi une évolution de la taille des gouttes après rupture primaire. C’est une méthode basée sur la conservation de l’énergie, en appliquant un bilan au niveau de la goutte mère avant rupture et au niveau des gouttes filles après rupture. Une loi d’évolution de la taille des gouttes peut ainsi être proposée [57]:

$$\frac{r_1}{r_{32}} = 1 + \frac{8K}{20} + \frac{\rho_l r_1^3}{\sigma_l} y^2 \left(\frac{6K - 25}{120} \right) \quad (3.15)$$

r_{32} est le rayon moyen de Sauter des gouttes filles. Ce rayon est un rapport entre le volume du spray et la surface du spray. La taille des gouttes filles est ainsi déterminée par un tirage aléatoire dans une distribution en x^2 ayant comme rayon moyen de Sauter $r = r_{32}$. La valeur de K est une constante de modélisation, déterminée grâce à des comparaisons expérimentales. Les auteurs proposent $K = 10/3$.

2. le Modèle WAVE

Une alternative au modèle TAB pour les flux à nombre de Weber élevé est le modèle de WAVE de fractionnement développé par Reitz [37]. Il considère l'atomisation des gouttelettes induite par la vitesse relative entre les phases liquide et gaz. Il suppose que le temps exigé pour le fractionnement et la dimension de la gouttelette résultante est en rapport avec l'agrandissement rapide de la vague d'instabilité Kelvin-Helmholtz (KH) [58].

Le modèle de Reitz ou modèle "Wave" [57] se base sur l'étude de l'instabilité linéaire d'une colonne de liquide injectée dans un environnement gazeux incompressible. L'auteur suppose que l'atomisation est due au développement d'instabilités de surface de type Kelvin - Helmholtz à la sortie de l'injecteur. Une représentation schématique est proposée en figure 3.7.

Ce modèle, appliqué avec un formalisme lagrangien, consiste à représenter la colonne de liquide par des particules liquides plus ou moins sphériques ("blobs"), initialement de diamètre égal à l'orifice d'injection. Le nombre de particules créées par pas de temps de calcul est déterminé en fonction du débit de carburant liquide.

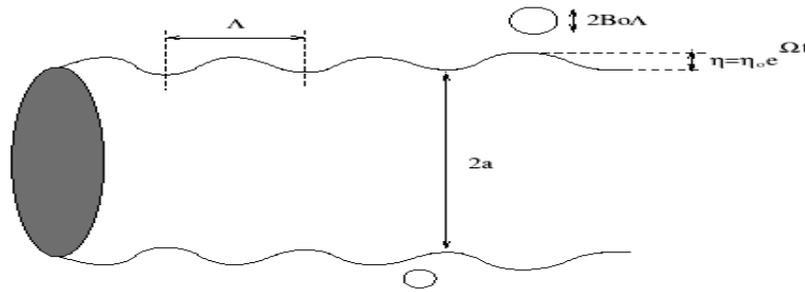


Figure 3.7 : Etude de stabilité d'une colonne de liquide en vue d'une modélisation de type "Wave" [57]

Cette analyse linéaire permet à Reitz [57] de déterminer la longueur d'onde Λ_{KH} dont l'amplitude croit le plus rapidement, ainsi que son taux d'accroissement KH. Les expressions suivantes sont obtenues suite à des études théoriques sur le comportement des nombres adimensionnels d'Ohnesorge et de Weber.

$$\frac{\Lambda_{KH}}{r_1} = 9.02 \frac{(1 + 0.45\sqrt{Oh})(1.14T_a)^{0.7}}{(1 + 0.865We_g^{1.67})^{0.6}} \quad (3.16)$$

$$\Omega_{KH} \sqrt{\frac{\rho_l r_1^3}{\sigma_l}} = \frac{0.34 + 0.385We_g^{1.5}}{(1 + Oh)(1 + 1.4T_a^{0.6})} \quad (3.17)$$

Avec $T_a = Oh\sqrt{We_g}$. r_1 est le rayon de la goutte mère. On appelle "goutte(s) mère(s)" la ou les goutte(s) avant rupture, et "goutte(s) fille(s)" la ou les goutte(s) issue(s) de la goutte mère, après rupture. Ces gouttes filles ont, après rupture, un rayon r_2 déterminé ainsi :

$$r_2 = \begin{cases} B_0 \Lambda_{KH} & \text{si } B_0 \Lambda_{KH} \leq r_1 \\ \min \left[\left(\frac{3\pi a^2 u_l}{2\Omega_{KH}} \right)^{\frac{1}{3}}, \left(\frac{3a^2 \Lambda_{KH}}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \right] & \text{si } B_0 \Lambda_{KH} > r_1 \end{cases} \quad (3.18)$$

B_0 est une constante de modélisation prise généralement égale à 0.61. Le cas particulier $B_0 \Lambda_{KH} > r_1$ correspond au régime de fractionnement de Rayleigh. En effet, c'est uniquement

en présence de ce régime de rupture que les gouttes détachées de la colonne liquide ont un diamètre plus grand que celui de la colonne elle-même [58]. En ce qui concerne les injections haute pression de type spray Diesel, comme il a déjà été vu précédemment, c'est en régime d'atomisation que le jet liquide se fractionne. Ainsi, le rayon des gouttes filles prédit par le modèle "Wave" sera plutôt de l'ordre de grandeur de Λ_{KH} .

La taille de la goutte fille est ainsi déterminée à partir du volume de liquide contenu dans une onde de surface. Avec un formalisme lagrangien, la taille des gouttes décroît pendant le temps de breakup $\tau_{bu,KH}$, suivant cette loi d'évolution temporelle [57] :

$$\frac{dr_1}{dt} = \frac{r_2 - r_1}{\tau_{bu,KH}} \quad (\text{avec } r_2 \ll r_1) \quad (3.19)$$

Contrairement au modèle TAB, la diminution de la taille des gouttes mères est linéaire dans le temps (fig 3.8). Il est possible d'exprimer le temps de breakup $\tau_{bu,KH}$ en fonction de la longueur d'onde Λ_{KH} , de son taux de croissance KH et le rayon des gouttes mères r_1 :

$$\tau_{bu,KH} = 3.726B_1 \frac{r_1}{\Lambda_{KH} \Omega_{KH}} \quad \text{avec } r_1(t = t_0) = a \quad (3.20)$$

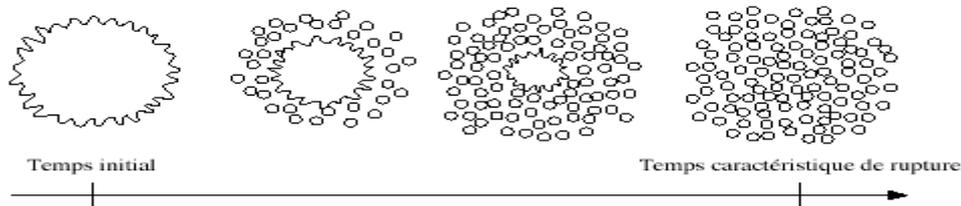


Figure 3.8 : Désintégration de la goutte mère pendant le temps de rupture τ_{bu} selon le modèle "Wave" [57]

La constante B_1 fixe aux alentours de 10, admettant que cette valeur peut être modifiée sous influence de la géométrie de l'injecteur sur le spray formé dans la chambre. De plus, ce modèle prévoit une composante de vitesse radiale pour les gouttes filles :

$$V_0 = U_0 \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (3.21)$$

Elle est uniformément distribuée entre 0 et θ , angle du spray, défini par la relation suivante :

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = A_1 \Lambda_{KH} \frac{\Omega_{KH}}{U_0} \quad (3.22)$$

A_1 étant une constante de modélisation qui est fonction du design de la buse. Selon [57] propose de la prendre égale à 0.188.

d. model de collision-coalescence

Dans le modèle standard de collision de la gouttelette [114] deux parties peuvent entrer en collision quand ils occupent la même cellule computationnelle et la collision est basée sur une fonction de la probabilité. Le modèle de la collision est un des modèles les plus faible pour les sous model de spray [111].

On distingue deux types de collisions:

- Pour donner une gouttelette simple. Dans ce cas-ci, la température et la vitesse de la nouvelle gouttelette est calculée en utilisant un procédé faisant la moyenne de masse. La nouvelle taille de gouttelette peut être calculée à partir du volume de gouttelette.

-Les deux gouttelettes peuvent entrer en collision, mais sans aucun transfert de masse et d'énergie entre les deux gouttelettes. Elles maintiennent leurs tailles et leurs températures, mais subissent des changements de vitesse.

Pour distinguer quel type de collision, un paramètre d'impact de collision, b est comparé au paramètre critique d'impact, le b_{cr} qui est donné par :

$$b_{cr} = \frac{1}{We} \left[\left(\frac{r_2}{r_1} \right)^3 \right] - 2.4 \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^2 + 2.7 \left(\frac{r_2}{r_1} \right) \quad (3.23)$$

Le nombre de Weber s'écrit de la manière suivante :

$$We = \frac{\rho_d |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| r_1}{r_1^3 + r_2^3} \quad (3.24)$$

$$\bar{T}_d = \frac{r_1^3 T_{d1} + r_2^3 T_{d2}}{r_1^3 + r_2^3} \quad (3.25)$$

Où ρ_d est la densité, α_d coefficient de tension superficielle de liquide.

Si $b < b_{cr}$, alors la collision existe. Ainsi, on peut obtenir une fonction de densité de probabilité de collision σ qui donne le nombre probable de gouttelettes résultant d'une collision entre la gouttelette 1 et 2.

$$\begin{aligned} \sigma = & \frac{b_{cr}^2}{(r_1 + r_2)^2} \delta \left[r - (r_1^3 + r_2^3)^{\frac{1}{3}} \right] \delta \left[\vec{v} - \frac{r_1^3 \vec{v}_1 + r_2^3 \vec{v}_2}{r_1^3 + r_2^3} \right] \delta(T_d - \bar{T}_{d1}) \delta(y - y_2) \delta(\dot{y} - \dot{y}_2) \\ & + \frac{2}{(r_1 + r_2)^2} \int_{b_{cr}}^{r_1+r_2} \left[\delta(r - r_1) \delta(\vec{v} - \vec{v}_1) \delta(T_d - T_{d1}) \delta(y - y_1) \delta(\dot{y} - \dot{y}_1) + \right. \\ & \left. \delta(r - r_2) \delta(\vec{v} - \vec{v}_2) \delta(T_d - T_{d1}) \delta(y - y_2) \delta(\dot{y} - \dot{y}_2) \right] b db \end{aligned} \quad (3.26)$$

Ou

$$\vec{v}_1 = \frac{r_1^3 \vec{v}_1 + r_2^3 \vec{v}_2 + r_2^3 (\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \frac{b - b_{cr}}{(r_1 + r_2 - b_{cr})}}{r_1^3 + r_2^3} \quad (3.27)$$

$$\vec{v}_2 = \frac{r_1^3 \vec{v}_1 + r_2^3 \vec{v}_2 + r_2^3 (\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \frac{b - b_{cr}}{(r_1 + r_2 - b_{cr})}}{r_1^3 + r_2^3} \quad (3.28)$$

Le terme source \dot{f}_{coll} de collision est donné par la relation :

$$\begin{aligned} \dot{f}_{coll} = & \frac{1}{2} \iint f(\vec{x}, \vec{v}_1, r_1, T_{d1}, y_1, t) f(\vec{x}, \vec{v}_2, r_2, T_{d2}, y_2, \dot{y}_2, t) \pi(r_1 + r_2)^2 |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \\ & \left[(\sigma(\vec{v}, r, T_d, y, \dot{y}, \vec{v}_1, r_1, T_{d1}, y_1, \dot{y}_1, \vec{v}_2, r_2, T_{d2}, y_2, \dot{y}_2)) (-\delta(\vec{v} - \vec{v}_1) \delta(r - r_1) \right. \\ & \delta(T_d - T_{d1}) \delta(y - y_1) \delta(\dot{y} - \dot{y}_1)) - \delta(\vec{v} - \vec{v}_2) \delta(r - r_2) \delta(T_d - T_{d2}) \delta(y - y_2) \\ & \left. \delta(\dot{y} - \dot{y}_2) \right) \times (d\vec{v}_1 dr_1 dT_{d1} dy_1 d\dot{y}_1 d\vec{v}_2 dr_2 dT_{d2} dy_2 d\dot{y}_2) \end{aligned} \quad (3.29)$$

e. Model d'évaporation

La gouttelette liquide reçoit son énergie thermique du gaz. Cette énergie est utilisée pour Augmenter la température du liquide et vaincre la chaleur latente d'évaporation pour faire évaporer le combustible. À moins que le gaz soit saturé par de la vapeur de combustible, l'évaporation toujours a lieu et réduit le rayon de la gouttelette. Si la chaleur transférée délivrée par le gaz est insuffisante, la température de la gouttelette diminue. L'équation différentiel pour le rayon de la gouttelette est donnée par :

$$\frac{d(r^2)}{dt} = \frac{(\rho D)_{gas}(\hat{T})}{\rho_d} B_d Sh_d \quad (3.30)$$

Où, $(\rho D)_{gas}(\hat{T})$ est la diffusivité de la vapeur de combustible dans le gaz à la température du film $\hat{T} = \frac{1}{3}(T + 2T_d)$, avec :

T_d est la température de la gouttelette. ρ_d la densité de la gouttelette. Le nombre de Sherwood pour le transfert de masse est :

$$Sh_d = (2.0 + 0.6Re d^{1/2} Sc_d^{1/3}) \frac{\ln(1 + B_d)}{B_d} \quad (3.31)$$

Où le nombre de transfert de masse est

$$B_d = \frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*} \quad (3.32)$$

Et le nombre de Schmidt est donné par :

$$S_{cd} = \frac{\mu_{gas}(\hat{T})}{(\rho D)_{gas}(\hat{T})} \quad (3.33)$$

Y_1 est la fraction de masse du carburant dans la phase gazeuse, $Y_1 = \frac{\rho_1}{\rho}$, Y_1^* la fraction de masse sur la surface.

Le taux de changement de la température de la gouttelette est déterminé par l'équation de flux d'énergie [58]:

$$4\pi r^3 \rho_d c_l \frac{dT_d}{dt} = 4\pi r^2 Q_d + 4\pi r^2 \frac{dr}{dt} L(T_d) \quad (3.34)$$

C_L est la chaleur spécifique du liquide. Le taux de conduction de la chaleur Q_d à la surface de la gouttelette par unité de volume est obtenu par l'utilisation de la corrélation de Ranz-Marshall :

$$Q_d = K_{gas}(\hat{T}) \frac{T - T_d}{2r} Nu_d \quad (3.35)$$

Où le coefficient de la conduction de la chaleur est donné par [58]: $\hat{T} = \frac{2}{3}T_d + \frac{1}{3}T$

$$K_{gas}(\hat{T}) = \frac{K_1 \hat{T}^{3/2}}{\hat{T} + K_2} \quad (3.36)$$

Le nombre de Nusselt est donnée par :

$$Nu_d = (2.0 + 0.6 Re d^{1/2} Pr_d^{1/3}) \frac{\ln(1 + B_d)}{B_d} \quad (3.37)$$

Le nombre de Prandtl de gouttelette est donne par :

$$P_{rd} = \frac{\mu_{gas}(\hat{T})C_{p_{gas}}(\hat{T})}{K_{gas}(\hat{T})} \quad (3.38)$$

$$K_{gas}(T) = \frac{K_1 \hat{T}^{3/2}}{\hat{T} + K_2} \quad (3.39)$$

$$K_1 = 252$$

$$K_2 = 200$$

$$\mu_{gas}(T) = \frac{A_1 \hat{T}^{3/2}}{\hat{T} + A_2} \quad (3.40)$$

$$A_1 = 1.457 \cdot 10^{-5}$$

$$A_2 = 110$$

La chaleur latente de vaporisation L est exprimée par :

$$L(T_d) = h_l(T_d) - h_l(T_d, \rho_v(T_d)) \quad (3.41)$$

f. model d'accélération de la gouttelette

Le terme d'accélération de la gouttelette est due à la charge aérodynamique et à la force de gravité. La force totale F est, en supposant que la gouttelette reste sphérique est donnée comme [58]:

$$F = \frac{3}{8} \frac{\rho}{\rho_d} \frac{|\vec{u} - \vec{u}'' - \vec{v}|}{r} (\vec{u} - \vec{u}'' - \vec{v}) C_D + \vec{g} \quad (3.42)$$

\vec{u}'' : Vitesse turbulente de gaz

Le coefficient C_D de résistance :

$$\left. \begin{array}{l} \text{Pour } Re_L < 1000 \quad C_D = \frac{24}{Re_L} \left(1 + \frac{1}{6} Re_L^{2/3}\right) \\ \text{Pour } Re_L > 1000 \quad C_D = 0.424 \end{array} \right\} \quad (3.43)$$

$$Re_L = \frac{2\rho |\vec{u} - \vec{u}'' - \vec{v}| r}{\mu_{gas}(\hat{T})}$$

g. interaction spray-gaz

La phase (discrète) du spray engendre un terme source à ajouté aux équations de la phase gazeuse. Ces termes sont définie comme [58]:

$$\begin{aligned} \rho \bar{Y}_i^s &= - \int f \rho_d 4\pi r^2 R \cdot d\vec{v} \cdot dr \cdot dT_d \cdot dy \cdot d\dot{y} \\ \bar{F}^s &= - \int f \rho_d (4/3\pi r^3 \bar{F} + 4^2 R \vec{v}) \cdot d\vec{v} \cdot dr \cdot dT_d \cdot dy \cdot d\dot{y} \\ \bar{Q}^s &= - \int f \rho_d \left[4\pi r^2 R \left[E_1(T_d) + \frac{1}{2} (\vec{v} - \vec{u}) \frac{4}{3} \pi r^3 \left[c_{p,L} \dot{T}_d + \bar{F} (\vec{v} - \vec{u} - \vec{u}'') \right] \right] \right] \cdot d\vec{v} \cdot dr \cdot dT_d \cdot dy \cdot d\dot{y} \\ \bar{W}^s &= - \int f \rho_d \frac{4}{3} \pi r^3 \bar{F} \vec{u}'' \cdot d\vec{v} \cdot dr \cdot dT_d \cdot dy \cdot d\dot{y} \end{aligned} \quad (3.44)$$

3.3.1.3 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 permanent. Si les espèces peuvent interagir par réaction chimique, le problème se complique énormément : il y a création (ou disparition) volumique. On écrit la réaction sous la forme (Σ désigne la somme sur i) [59]:



L'équation précédente décrit les réactions chimiques ayant lieu au coeur de l'écoulement.

Où X_{α} se reporte au espèce α , pendant que ν_{α}' et ν_{α}'' sont coefficients stoechiométrique pour l'espèce α de deux sens de la réaction directe et inverse, le taux de réaction d'espèce α peut calculer par :

$$\dot{\omega}_{\alpha} = (\nu_{\alpha}'' - \nu_{\alpha}') \dot{q}_r \quad (3.46)$$

Où,

$$\dot{q}_r = k_f \prod_{\alpha=1}^{N_s} [X_{\alpha}]^{\nu_{\alpha}'} - k_b \prod_{\alpha=1}^{N_s} [X_{\alpha}]^{\nu_{\alpha}''} \quad (3.47)$$

Ici, $[X_{\alpha}]$ se reporte à la densité molaire d'espèce α . k_f et k_b sont des coefficients des taux de réactions direct et inverse respectivement. Ils sont représenté sous la l'expression de la forme généralisé d'Arrhenius [59]:

$$k_f = AT^b \exp(-E/RT) \quad (3.48)$$

Le mécanisme de réaction estime les coefficients des taux d'Arrhenius pour les réactions direct. Puisque les réactions élémentaires sont réversibles, les coefficients des taux de réactions inverses peuvent être calculé par la relation

$$K_c = \frac{k_f}{k_b} \quad (3.49)$$

Pour le système réagissant d'un mélange gaz, les conditions d'équilibre exigent la fonction de Gibbs pour le mélange à l'état standard être minimale. La constante d'équilibre pour la réaction est alors définie comme :

$$K_c = \exp\left(-\frac{\Delta_R \bar{G}^0}{RT}\right) \quad (3.50)$$

L'énergie molaire libre de Gibbs de la réaction chimique est définie par :

$$\Delta_R \bar{G}^0 = \Delta_R \bar{H}^0 - T \cdot \Delta_R \bar{S}^0 \quad (3.51)$$

Les réactions chimiques de type d'équilibre sont décrites par des relations implicites du type [59]:

$$\prod_{\alpha} \left(\frac{\rho_{\alpha}}{W_{\alpha}}\right)^{\nu_{\alpha}' - \nu_{\alpha}''} = \exp\left(A_r \ln T_A + \frac{B_r}{T_A} + C_r + D_r T_A + E_r T_A^2\right) \quad (3.52)$$

Où, $T_A = T/1000$ °k

KIVA-3v autorise la considération de deux techniques, les réactions cinétique contrôlée et réactions d'équilibre entre le combustible et 11 espèces gazeuses inclus dans la base de données thermodynamique des données. Le combustible peut être sélectionné d'après une bibliothèque contenir les propriétés des liquides et phase gazeuse des 31 composants des combustibles Les plus connus.

Les réactions d'équilibre sont solutionnées au moyen d'une technique numérique résolvant itérativement pour l'évolution et le progrès de la réaction jusqu'à la condition d'équilibre est obtenu. Par contraste avec procédures standard, cette technique prend en considération la parution de la chaleur des réactions d'équilibre et cela considéré par conséquent plus exact.

KIVA-3v n'inclut pas les modèles de la combustion réels. Il fournit une option pour simuler ignition de l'étincelle; cependant, les modèles pour la description d'autoignition aussi bien que de la combustion de prémélange et la combustion du mélange contrôlé doit être implémenté par l'utilisateur.

3.3.2 Améliorations antérieures

Le modèle employé dans ce travail est basé sur les améliorations antérieures de KIVA-3 en ce qui concerne la modélisation de la turbulence et gouttelette individuel et spray breakup [56].

3.3.2.1 Le model de la turbulence

Dans certains cas simples on peut aujourd'hui faire de la simulation directe, c'est-à-dire mettre en œuvre directement les équations de bilans avec des conditions aux limites et initiales connues. Mais, dans la plupart des applications, on est conduit à faire une modélisation des effets des petites structures de turbulence.

Les modèles basiques développés sont pour l'essentiel les suivants:

- tension de Reynolds (fermeture au second ordre).
- viscosité turbulente (fermeture algébrique ou transport $k - \epsilon$).
- spectraux (ou fermeture en deux points - corrélation de vitesses entre 2 points).

Le model standard de turbulence $k-\epsilon$ est utilisé dans KIVA-3, et il est utilisé largement dans industrie. Les premières formes du modèle de la turbulence $k-\epsilon$ étai développé par *Chou* (1945), *Davidov* (1961) et *Harlow et Nakayama* (1968), et le papier central était de *Jones and Launder* (1972).

Seuls les modèles utilisés dans le code KIVA sont rappelés ici [58].

a. Le Modèle de Turbulence $k-\epsilon$

Le modèle $k-\epsilon$ est utilisé pour dériver l'équation exacte pour ϵ et de trouver une approximation de la fermeture convenable pour l'équation exacte qui gouverne son comportement. L'approche consiste à représenter les propriétés de la turbulence à l'aide des échelles de vitesse et de longueur caractéristiques des fluctuations. L'échelle de vitesse est obtenue par l'intermédiaire de l'énergie cinétique turbulente (k). L'échelle de longueur, quant à elle est plus délicate à définir et l'on a recours à une nouvelle équation de transport portant sur le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente. Ce taux de dissipation est relié, par l'intermédiaire de l'hypothèse de l'unicité de l'échelle des temps, à l'échelle de longueur. En définitif deux équations de transport additionnelles sont résolues pour l'énergie cinétique k et le taux de dissipation ϵ [56].

Le modèle $k \epsilon$ est encore maintenant le plus utilisé des modèles de turbulence, en particulier dans "le monde industriel", de par sa simplicité de mise en œuvre et son faible coût numérique. Cependant, certains défauts conceptuels liés à l'utilisation d'une viscosité turbulente rendent ce modèle peu approprié à l'étude d'écoulements complexes. Selon *Speziale* [59], il souffre principalement de deux lacunes :

- son inaptitude à prendre en compte les courbures des lignes de courant et les étirements rotationnels

– son incapacité à traduire les effets de mémoire spatio-temporelle puisque la relation de turbulence exprime une dépendance purement locale, c'est-à-dire entre grandeurs prises au même point et au même instant [58].

b. Le Modèle de Turbulence RNG K-ε

Ce modèle appelé *RNG k-ε* (Yakhot et Orszag 1986), utilise une théorie différente des techniques statistiques classiques. La taille des échelles turbulentes est prise en compte pour déterminer la part de l'énergie qui sera transportée et celle qui sera dissipée. Les petites échelles de turbulence qui dissipent toute leur énergie sont modélisées alors que les grandes échelles de turbulence sont étudiées précisément. Cette modélisation aboutit à des équations très proches de celles du modèle *k-ε* standard. La principale différence vient des constantes qui ne sont plus déterminées expérimentalement mais calculées théoriquement [58].

c. Le Modèle SGS

Le modèle *SGS* est le modèle initial de KIVA. Il s'inspire du fait que la turbulence à petite échelle a un caractère beaucoup plus universel que les mouvements à grande échelle. Dans ces conditions, l'idée est de calculer les mouvements à grande échelle et de recourir à la modélisation pour évaluer l'effet des petites échelles sur les grandes. Lorsque le modèle de turbulence *SGS* (subgrid scale) est utilisé, la valeur de ϵ doit satisfaire l'équation suivante [58] :

$$\epsilon \geq \left[\frac{c\mu}{pr_\epsilon(c_{\epsilon 2} - c_{\epsilon 1})} \right]^{\frac{1}{3}} \frac{k^{\frac{3}{2}}}{L_{SGS}} \tag{3.53}$$

L_{SGS} est une longueur *SGS* donnée, et dont la valeur typique est prise égale à $4\delta x$, où δx est une dimension représentative calculée de la cellule.

3.3.2.2 Transfert thermique

Le mécanisme du transfert de chaleur dans des moteurs diesel suit un mode triple, à savoir : la conduction dans le film proche de la paroi, la convection dans la phase gazeuse et le rayonnement dans des régions à hautes températures et aux zones riches en suie. La compréhension de ces modes est très importante vu qu'ils influent sur le rendement et les émissions. Dans ce qui suit, on n'expose que le transfert de chaleur à travers la paroi, le mode principal de transfert thermique dans les moteurs [58].

3.3.2.3 Loi de paroi

Une manière traditionnelle pour traiter le transfert de chaleur à travers la paroi est basée sur l'analogie de Reynolds. Une mise à jour a été implantée dans KIVA-3V, conforme étroitement à l'expression d'origine proposée par Launder et Spalding, est donnée dans la section suivante [54]:

$$Q_w = \frac{\rho v_l c_p u^*}{pr_l y} (T - T_w) \tag{3.54}$$

Où ;

$$u^* = \begin{cases} \frac{y^* Pr_l \times RPR}{1/k \ln y^* + B + 11.05 (Pr_l \times RPR - 1)} & y^* > 11.05 \\ 1.0 & y^* < 11.05 \end{cases} \quad (3.55)$$

et

$$y^* = \frac{c_\mu^{1/4} K^{1/2} y}{\nu_1} \quad (3.56)$$

Dans ces équations, ν_1 est la viscosité cinématique laminaire de l'air, Pr_l est le nombre de Prandtl laminaire, K est le constante de Von Karman, RPR est le réciproque du nombre de Prandtl turbulent, T_w est la température de paroi, T étant la température de gaz, et k est l'énergie cinétique turbulente.

3.3.3 le Modèle d'Allumage

La cinétique de l'allumage est un processus à basse température de réactions en chaîne. Nous avons choisi un modèle global, le modèle Shell, puisque ce modèle représente bien les étapes de base du phénomène d'allumage. Le modèle d'allumage Shell a été développé par Halstead, Kirsch & Quinn [60]. C'est un modèle thermocinétique basé sur un mécanisme réduit pour l'oxydation d'un hydrocarbure. Il a été testé qualitativement en confrontation à des résultats expérimentaux.

Le modèle Shell de base comprend huit réactions cinétiques [60] :

(1) Une réaction d'initialisation de type Arrhenius :



(2) Une première réaction de propagation formant les produits :



(3) Une deuxième réaction de propagation formant B :



(4) Une troisième réaction de propagation formant Q :



(5) Une quatrième réaction de propagation formant B :



(6) Une réaction d'embranchement :



(7) Une réaction de désactivation :



(8) Une réaction de désactivation :



RH est l'hydrocarbure introduit, R^* radical composé à partir de l'hydrocarbure, B agent de

branchement, Q espèce intermédiaire, et P est un produit d'oxydation constitué de CO , CO_2 et de HO_2 . Les termes de vitesse de réaction f_i sont exprimés en fonction des concentrations en fuel et en oxygène de la manière suivante [60]:

$$f_i = A_{f_i} \exp(-E_{f_i} / RT) [O_2]^{x_i} [RH]^{y_i} \quad (3.65)$$

Il est à noter que l'indice de cétane (CN) influe sur la valeur de l'énergie d'activation de l'inflammation. Dans la littérature on trouve plusieurs suggestions estimant l'influence de ce dernier. Heywood [33] par exemple suggère la relation suivante :

$$E_A = \frac{618840}{CN + 25} \quad (3.66)$$

Les paramètres cinétiques k_i de ces équations sont sous la forme d'Arrhenius :

$$k_i = A_i \exp(-E_i / RT) \quad \text{pour } i = 1,2,3,4,q,b \quad (3.67)$$

$$k_p = \frac{1}{1/k_{p1}[O_2] + 1/k_{p2} + 1/k_{p3}[RH]} \quad (3.68)$$

Où, k_{p1}, k_{p2}, k_{p3} sont les coefficients de vitesse pour les réactions de propagation.

Les concentrations des différentes espèces peuvent être calculées à partir des relations:

$$\begin{aligned} \frac{d[R^*]}{dt} &= 2k_q[RH][O_2] + 2k_b[B] - f_3 k_p [R^*]^2 \\ \frac{d[B]}{dt} &= f_1 k_p [R^*] + f_2 k_p [R^*][Q^*] - k_b [B] \end{aligned} \quad (3.69)$$

$$\begin{aligned} \frac{d[Q]}{dt} &= f_4 k_p [R^*] - f_2 k_p [R^*][Q] \\ \frac{d[O_2]}{dt} &= -pk_p [R^*] \end{aligned} \quad (3.70)$$

m est une quantité qui dépend du nombre d'atomes hydrogène. Dans une molécule de carburant $C_n H_{2m}$, $p = (n(2-\gamma) + m) / 2m$, et $\gamma \sim 0,67$.

3.3.4 Le modèle de combustion "Modèle de la Combustion Turbulent contrôlé"

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, puisque celle-ci joue un rôle important pour les models basés sur la solution de l'équation de transport des fractions massiques des espèces, donc il ne peut prendre 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'Arrhenius pour les combustions non prémélangées,

prémélangée et partiellement prémélangée. Les mécanismes des réactions chimiques seront prédéfinis.

Dans kiva-3v le modèle de la combustion turbulente est basé sur le modèle de Eddy-dissipation développé par Magnussen et Hjertager [61]. Il produit une dépendance de la vitesse de flamme turbulente sur la racine carrée de k (l'énergie cinétique turbulente), et aucune dépendance avec ε . Le modèle a deux paramètres, CAPA et CAPB. CAPA est en rapport avec le taux de la réaction turbulente. Il varie avec les conditions du fonctionnement (par exemple, température et densité à l'allumage), et a les mêmes dépendances comme la vitesse de flamme laminaire. La gamme de CAPA est proche d'unité pour le combustible du moteurs diesel lourd à 100 pour l'hydrogène. À cause de sa variabilité sur les combustibles et les conditions de combustion, il est inclus comme un paramètre d'entrée dans le fichier ITAPE5. Notez que parce que les modifications de CAPA affectent la vitesse de flamme et donc la température de la flamme, CAPA affecte aussi des taux d'émissions. CAPB est fixé à 0.5 dans le code [54].

LE MODELE DE COMBUSTION EDDY DISSIPATION

Dans le moteur diesel, les deux 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 inflammable 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 contrôle la combustion. Durant la phase du mélange contrôlé, la combustion est influencée par la diffusion de l'air dans le 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 combustion contrôlé (R_{comb}) du pré mélange ou mélange riche ou pauvre est basé sur le modèle de combustion EDDY DISSIPATION. Cette équation représenté comme [62] :

$$R_{comb} = A_1 \cdot \frac{\varepsilon}{k} \cdot \min \left[m_f, \frac{m_{o_2}}{(O_2 / F)_{st}}, \frac{A_2 \cdot m_{prd}}{1 + (O_2 / F)_{st}} \right] \quad (3.71)$$

R_{comb} est en kg/s

Ou, A_1 , A_2 sont des constantes empirique, m_f , m_{o_2} , 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 [62].

Ce model est basé sur les travaux de Magnussen et Hjertager en 1976, 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.

$$D_a \approx \frac{\text{échelle de temps de mélange}}{\text{échelle de temps cinétique}} \quad (3.72)$$

Le taux de réaction est supposé être déterminé par le taux de mélange réactif-combustible à une échelle moléculaire, c'est-à-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.

Il diffère peu du modèle Eddy-break-up (EBU), Spalding [63]. Il relie en fait la dissipation des tourbillons à la concentration moyenne des quantités intermittentes au lieu des fluctuations de concentration. Cela permet d'éliminer le facteur d'erreur significatif dû aux

calculs de ces fluctuations. Toutefois il ne s'applique qu'à des quantités qui apparaissent par intermittence, Magnussen et Hjertager [61].

3.3.5 Le Modèle de Formation de NO_x

Le mécanisme de "NO thermique" désigne la réaction entre le N_2 de l'air et les molécules O et OH que l'on trouve en forte concentration dans les produits de combustion. La dissociation de la molécule N_2 demandant beaucoup d'énergie, ce mécanisme ne se produit que si la température des produits de combustion est élevée. Glarborg et al [64] ont à ce propos montré que ce mécanisme ne devenait significatif qu'au delà de 1600 K.

Sous la dénomination d'oxydes d'azote (NO_x) sont regroupés le monoxyde d'azote (NO) et le dioxyde d'azote (NO_2). Les NO_x dits thermiques qui sont dus à l'oxydation à haute température de l'azote par l'oxygène, tous deux présents dans l'air. La proportion de NO_2 représente généralement 10 à 20 pour cent de la totalité des émissions d'oxydes d'azote. Le NO produit pendant la combustion résulte de l'oxydation de l'azote Atmosphérique suivant le mécanisme de production mis en évidence par Zeldovich [33].

Le modèle implanter dans le code KIVA-3V pour décrire la formation de NO est le modèle de Zeldovich élargie [65]. Il est accepté généralement que les principales réactions qui gouvernent la formation de NO est:



Les processus des réactions élémentaires données par les équations (73) et (74) sont connus sous le mécanisme de Zeldovich. Quand le processus de réaction élémentaire représenté par l'équation (75) est ajouté, le totale des réactions est connue sous le nom de mécanisme de Zeldovich élargie.

Ces réactions nécessitent donc la présence des radicaux O et OH que l'on trouve en forte concentration dans les produits de combustion. La première réaction conditionne la vitesse globale du mécanisme du fait de son énergie d'activation très élevée (318kJ/mol). La dissociation de la molécule N_2 suivant ce mécanisme demande beaucoup d'énergie. Sa vitesse de réaction ne devient significative qu'à haute température. C'est pourquoi il est dit que le mécanisme de Zeldovich est thermique. De plus, cette première étape impose un temps de réaction élevé. Le mécanisme est prédominant dans les mélanges pauvres ou proches de la stoechiométrie du fait de l'excédent d'air, qui apporte le radical O nécessaire à la réaction (73).

Le taux de formation de NO d'après les réactions 74 - 76 sont données par l'équation suivante [65]:

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = k_1^+ [\text{O}][\text{N}_2] + k_2^+ [\text{N}][\text{O}_2] + k_3^+ [\text{N}][\text{OH}] - k_1^- [\text{NO}][\text{N}] - k_2^- [\text{NO}][\text{O}] - k_3^- [\text{NO}][\text{H}] \quad (3.76)$$

Où, pour les deux sens des réactions 73 - 75, les valeurs des constantes k_i^+ et k_i^- , respectivement pour chaque réaction sont définies par un modèle d'Arrhenius comme suivant :

$$k_i^+ = A_{fr,i} \exp(-E_{f,i} / RT) \quad (3.77)$$

$$k_i^- = A_{br,i} \exp(-E_{b,i} / RT) \quad (3.78)$$

Où, les constantes pré-exponentielles pour les deux sens de la réaction i , $A_{fr,i}$ et $A_{br,i}$ respectivement et aussi l'énergie d'activation pour les réactions en deux sens $E_{f,i}$ et $E_{b,i}$ sont suggérés dans le manuel du code KIVA-3V. R est la constante universelle des gaz (J / mol.k) et T c'est la température.

La concentration de OH exigé pour la solution de l'équation (76), a calculé d'après les réactions d'équilibre suivantes [65] :



Ce mécanisme élargi de Zeldovich peut prédire seulement la formation de NO. Dans les moteurs diesel, NO₂ peut être de 10 à 30 % de la quantité totale émis d'oxydes d'azote (Heywood, 1988).

Le NO formé dans la zone de flamme peut convertir rapidement à NO₂ par la réaction avec HO₂ (Heywood, 1988) :



NO₂ peut aussi convertir en NO par réaction avec l'oxygène :



La réaction précitée ne se produit pas quand le NO₂ formé dans la flamme est ne peut pas apparus grâce à son mélange avec fluide frais (Heywood, 1988). La formation de NO_x (inclut les deux espèces NO et NO₂) est formulé comme [65] :

$$\left(\frac{dNO_x}{dt} \right)_{predict} = \alpha \times \beta \times \left(\frac{dNO}{dt} \right)_{Zeldovich} \quad (3.82)$$

où α , est un facteur de calibrage introduit pour calibré les NO_x calculé (estimé) avec les valeurs mesurées, et β est un facteur introduit pour la conversion de NO au NO_x. Pour les moteur à combustible diesel, $\alpha = 1.0$ et $\beta = 1.533$ (le rapport de poids moléculaire de NO₂ à NO).

Oxydation de NO en NO2

Le dioxyde d'azote NO₂ joue, au même titre que NO, un rôle important dans les processus de combustion, même s'il est produit en quantités moins significatives. Dans les installations de combustion, le NO₂ n'est en effet pas produit directement, mais résulte de l'oxydation lente de NO dans l'atmosphère. Se fait à basse température au moment du passage des gaz d'échappements dans l'atmosphère. La période critique de formation du NO s'étale entre le début de la combustion et peu après l'occurrence de la pression maximale de cycle. Le NO₂

est formé dans un second temps ; il provient de la conversion du NO précédemment formé par la réaction suivante :



Ainsi, la formation de NO_x thermique est rapide dans les zones de flamme où la température est élevée et où la concentration en hydrocarbures est faible. Le mécanisme de formation montre l'importance à la fois de la température et de la concentration en oxygène atomique. Le mécanisme radicalaire en chaîne de Zeldovich est le mécanisme le plus important dans les conditions classiques de fonctionnement des moteurs. Cependant, d'autres mécanismes mettant en jeu les intermédiaires N_2O et des radicaux hydrocarbures tels que CH peuvent être importants (Perry et al, 1997). La formation des NO_x décroît si on diminue la température de combustion du moteur en travaillant en excès d'air ou en recirculant les gaz d'échappements dans le moteur. Cette solution est souvent utilisée bien que cette approche, en réalité, ne soit pas aussi efficace que souhaité [37].

Le rapport NO/NO_2 dans l'atmosphère polluée est selon certains auteurs de 10/1, comme calculée à partir de données cinétiques par Schnelle et Brown (2002). Cependant, il existe un équilibre entre NO et NO_2 dans l'air. La courbe d'équilibre $NO_2 \cdot NO$ en présence de 5% d'oxygène et de 10% d'eau est montrée Figure 2.12 (chapitre précédant).

On constate qu'à hautes températures ($> 600^\circ C$) les NO_x sont presque exclusivement sous la forme de NO . A environ $400^\circ C$ [37] le mélange devient équimolaire. Si la température diminue, NO_2 devient très largement majoritaire.

3.3.6 Modèle de formation des suies

Les particules de suie émises par la combustion des hydrocarbures ont des origines diverses. Elles sont émises au cours d'incendies de tous types mais également, de manière plus contrôlée, par des moteurs et des brûleurs comme dans les secteurs d'automobile et de l'aéronautique et dans d'autres secteurs industriels.

Les particules de suie sont en majorité composées de carbone (environ 90%). On peut y trouver de l'hydrogène (environ 10%), de l'oxygène et de l'azote dans des proportions plus faibles (Haynes, 1981, Wagner 1978). Les suies sont issues de la combustion incomplète des hydrocarbures et de la condensation d'espèces gazeuses.

La structure interne des suies est proche de celle du graphite excepté aux limites extérieures où les couches d'atomes de carbone suivent la courbure de la surface. A l'intérieur, on trouve des structures ordonnées même s'il existe de nombreux défauts. Par ailleurs, les distances entre les plans réticulaires sont généralement supérieures à celles du graphite (Haynes, 1981). Leur densité est donc plus faible que celle du graphite (2.25 g/cm^3) et comprise entre 1.8 et 2 g/cm^3 (Garo, 1984).

Dans la modélisation des émissions des suies, les processus de la formation et de l'oxydation sont les deux à modéliser. Ces processus ont une différence légère dans le temps et l'emplacement dans la chambre de combustion. Généralement, peut dire que la formation prend place naturellement plus tôt et dans le côté riche de la région du vapeur de combustible, pendant que l'oxydation prend place plus tard dans le côté maigre de la région de flamme. La formation et l'oxydation de suie sont des processus de cinétique chimique contrôlé (Kennedy, 1997) et sont des phénomènes très compliqués pour les étudiés. De nos jours, peut être trouvé beaucoup des références de ce champ de recherche, peut être, Haynes and Wagner (1981) est la meilleure source pour les phénomènes mentionnés en dessus.

3.3.6.1 Formation des suies

Les sources d'émission des suies peuvent être naturelles (incendies, éruption volcanique....) ou anthropique (transport, déchets de la combustion...). Les moteurs diesel et les moteurs d'avion sont les principaux responsables du rejet de suie dans l'atmosphère. La présence de filtre à particules sur les échappements des voitures diesel a permis de diminuer les rejets de particules mais leur efficacité est très faible pour les plus petites particules granulométrie inframicroscopique (micosuies). C'est les plus dangereux car elles pénètrent facilement dans les alvéoles pulmonaires.

Dans l'atmosphère, les substances ne changent pas seulement d'état physique. Elles réagissent aussi chimiquement. De nouvelles molécules sont produites. Il peut ainsi arriver que la température ambiante soit inférieure à la température de fusion de ces nouvelles substances, pourtant produites sous forme gazeuse ! Que se passe-t-il alors avec ces gaz ?

De telles molécules ne tombent pas tout de suite au sol. Elles flottent dans l'air. Elles peuvent rencontrer d'autres grosses molécules et former des paires ou des groupes de molécules. Le processus continue jusqu'à former des agrégats. C'est le premier pas de la "nucléation" (formation de noyaux) et de la formation de particules. On pourrait presque dire qu'il s'agit simplement de condensation et de (re-)sublimation. Mais la réalité est plus complexe, car il ne s'agit pas d'une substance pure, mais d'un mélange de différentes espèces chimiques.

Des agrégats de molécules qui flottent dans l'air sont nommés particules ou aérosols. Plus les particules sont petites, plus elles flottent longtemps dans l'air, avant de se déposer sur le sol. D'innombrables particules liquides et solides flottent en permanence dans l'air qui nous entoure.

La formation de la suie est un processus complexe comprend plusieurs étapes chimique et physique. Plusieurs théories ont été proposées pour expliquer ce processus mais l'opinion commune est que ces particules de suie sont formées à travers séquentiellement (1) commencement homogène de gros précurseurs moléculaires, (2) croissance de la surface par choix des gros agents de la phase gazeuse, (3) coalescent-coagulation pour former plus grandes particules, et, finalement, (4) agglomération des particules fondamentales pour former une chaîne [66].

Ces stages, comme présentés schématiquement sur la fig 3.9, (Bockhorn, 1994) [66], constitue le processus de formation de suie.

Malgré plusieurs recherches sur la formation des suies, le mécanisme de la formation est pas complètement compris (Haynes et Wagner, 1981.; Kennedy, 1997.; Kronenburg et al., 2000).

Pour plus de détails, on peut dire que La formation de la suie distingue plusieurs phases correspondant à des processus physico-chimiques de différentes natures : pyrolyse, germination, croissance, coagulation (coalescence), agrégation. Ces processus ont lieu sur différentes échelles de temps, s'étendant de quelques micro-secondes (processus initiaux de germination) à quelques millisecondes [142].

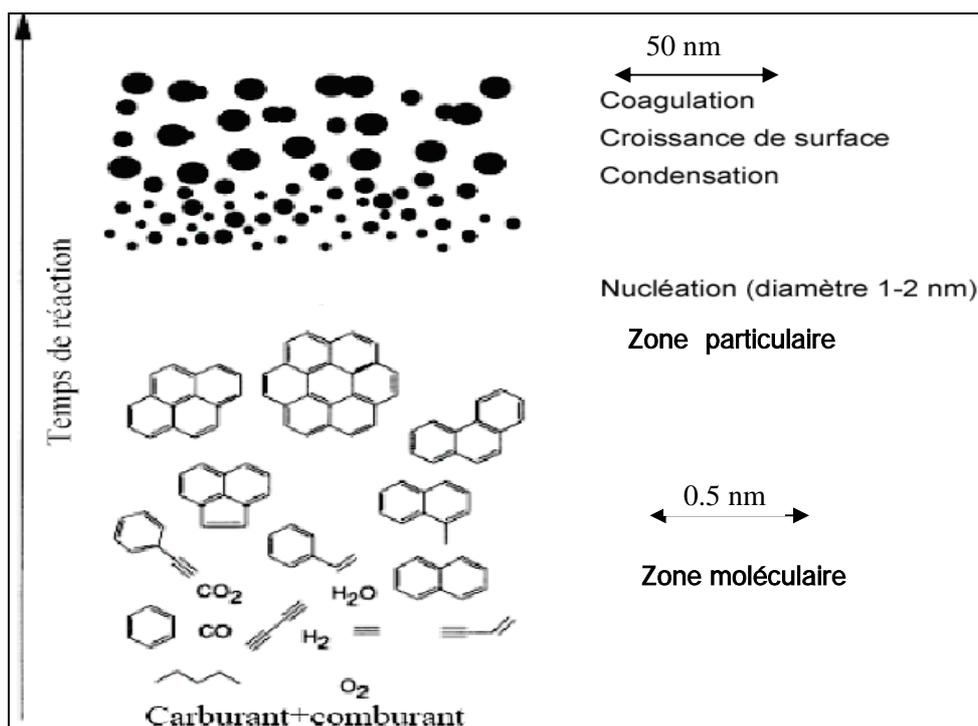


Figure 3.9 : Etapes de la formation des suies (Bockhorn, 1994)

Différentes étapes impliquées dans la formation des suies. On distingue le passage de structures moléculaires à des particules en passant par des processus de polymérisation [143].

La pyrolyse, que l'on peut également appeler croissance moléculaire, est le processus dans lequel les molécules en phase gazeuse forment des molécules de précurseur de suie par des mécanismes radicalaires.

La germination est le processus dans lequel les molécules précurseurs de suie se développent en de petits noyaux de suie. Le processus de germination est relativement délicat à définir dans le cas de la formation des suies. Ce processus vient en effet après une étape de croissance moléculaire jusqu'à un stade où l'on peut considérer que des condensats de macromolécules sont à l'état solide.

La croissance de Surface est le processus dans lequel les molécules de précurseur croissent de quelques nm (1-2 nm) à quelques dizaines de nm (10-30 nm). Le rapport de H/C de la suie diminue pendant ce processus [142]

Simultanément, un autre processus a lieu : La **coagulation** qui assure la croissance des particules par collision. Les petites particules de suie se heurtent et fusionnent, formant ainsi des particules plus grandes, toujours plus ou moins sphériques. Bien que ce processus contribue à la croissance de la particule, on suppose encore que la croissance en surface est le processus de croissance principal pendant cette étape de la formation de suie [142].

L'agrégation (Agglomération), est un terme générique englobant tous les mécanismes qui conduisent à une réduction du nombre de particules présentes dans une flamme. Deux processus différents peuvent être décrits. La coagulation consiste en fusion de deux particules de suie pour en former une nouvelle de taille supérieure. Ce mécanisme est basé sur un

réarrangement important de la structure des suies, et il aura lieu lorsque les suies sont jeunes (taille inférieure à 10 nm). Le second processus est l'agglomération par coalescence. Dans ce cas la suie formée conserve la mémoire de la forme des deux sphères initiales. Ce mécanisme devient plus important lorsque les suies ont subi un traitement thermique dans la flamme, elles ont alors une structure moins mobile.

L'agglomération qui commence à 0,02-0,07 ms après le processus de nucléation [143] explique la formation de la structure d'agglomérat bien connue. Les sphères de suie, maintenant de l'ordre de 20 nm, se heurtent à un taux proportionnel au carré du nombre de sphères, et forment des structures en chaîne avec des dimensions finales de l'ordre de quelques centaines de nanomètres [142].

3.3.6.2 Oxydation des suies

Quand les particules de suie sont transportées dans les zones où l'oxygène est présent, elles peuvent être oxydées. Ce processus peut avoir lieu en même temps que les processus de formation et on assiste alors à une compétition entre production et oxydation des particules. Les principales espèces intervenant dans le processus d'oxydation sont l'oxygène mais également le radical OH. Ces molécules peuvent agir avec les suies au niveau de leur surface en arrachant des atomes de carbone. Elles peuvent aussi casser les liaisons entre sphérules primaires ou chaînes [67]. La première action a pour conséquence de diminuer la masse des suies sans changer le nombre de particules, la deuxième augmente celui-ci tout en diminuant leur masse.

De plus amples détails sur ces processus peuvent être trouvés dans la littérature (Bockorn, 1994, Haudiquert-Talbot, 1997, Kennedy, 1997). On y trouvera notamment des travaux sur leur modélisation. La compréhension d'oxydation de suie est aussi encore incomplète (Haudiquert et al., 1997). L'oxydation de suie se produit originalement comme résultat d'attaque par l'oxygène moléculaire et le radical hydroxyle (Kennedy, 1997). Dans la région de flamme où la concentration moléculaire d'oxygène est faible, le réactif principal d'oxydation est un radical hydroxyle pendant que dans les alentours de la flamme l'oxydant principal est l'oxygène (Neoh et al., 1981; Richter et al., 2000). L'oxydation de la suie par l'oxygène peut être assumée pour se produire partiellement au carbone monoxyde comme suit [68]:



Le modèle plus largement utilisé d'oxydation par l'oxygène est le modèle semi-empirique de Nagle & Strickland-Constable (NSC).

Divers facteurs influencent directement le processus de formation des suies tels que la Température, la pression, la nature du combustible, les conditions de combustion (richesse, dilution, ...). Cependant, il n'existe pas encore, à l'heure actuelle, un modèle capable de prédire fidèlement ce phénomène dans une large gamme de conditions expérimentales et encore moins d'expliquer la structure des particules en fonction des conditions de formation.

3.3.6.3. Le modèle de suie implanté dans kiva-3v

Pour la modélisation de suie, plusieurs modèles ont été proposés pour estimer et mieux comprendre le processus de formation de suie. Surovikin (1976) fait des améliorations sur le modèle de Tesner (1971) en ajoutant une étape intermédiaire qui décrit la croissance du noyau radicalaire et leur conversion quand le noyau principal atteint un diamètre critique en précurseur par une surface physique. Le modèle de formation de suie Surovikin en

combinaison avec le modèle d'oxydation de suie de Nagle and Strickland-Constable, à été implanté dans le code de calcul numérique kiva-3v [66] pour décrire le processus de formation et d'oxydation des suies pour la simulation des moteurs (Amsden, 1997).

Le modèle de suie est originalement basé sur V. F. Surovikin [69], tant que l'oxydation des particules de suie suit la procédure de Haynes et Wagner [70], avec les constantes du modèle de Nagle et Strickland – Constable [71].

Le modèle de Surovikin, suppose que la formation et la croissance de noyau radicalaire et la formation et la croissance du précurseur de suie sont des différents stages pour le même processus, partiellement superposé sur un autre, mais qu'ils se produisent à travers mécanismes différents. Le processus complet, pour le moment quand l'hydrocarbure atteint la température de réaction, à la séparation de particules de suie, consiste trois étapes: 1) la formation du noyau radicalaire, 2) la croissance du noyau radicalaire et leur conversion en atteignant un diamètre critique en précurseur par une surface physique, et 3) la croissance du noyau et leur transformation à une particule de carbone. Les énergies d'activation des différents stages de processus sont basées sur des données expérimentales [54].

L'équation du taux de formation du noyau radicalaire a des contributions de la décomposition moléculaire et le branchement du processus de formation de noyau. Cependant, Il y a deux termes opposants dans l'équation qui explique la destruction de noyau radicalaire par leur collision mutuelle, et par collision avec la surface du précurseur croître.

Le taux de croissance de noyau radicalaire est basé sur la supposition que à chaque collision active avec une molécule d'hydrocarbure, le noyau radicalaire est augmenté par le poids de la partie du carbone de la molécule heurté. Ce ci exige la spécification du nombre d'atomes de carbone dans la molécule d'hydrocarbure [54], une expression du rayon effective de molécule d'hydrocarbure et une expression du nombre totale des collisions entre noyau radicalaire et les molécules d'hydrocarbure par unité de temps.

Le taux de la consommation d'hydrocarbure consiste en la perte des molécules d'hydrocarbure comme le résultat des collisions actives avec la surface du noyau radicalaire. L'hydrocarbure est convertir au noyau radicalaire et précurseur.

L'émission éventuelle des suies de dispositif de combustion est habituellement beaucoup moins que la quantité produite à l'intérieure. Cette différence survient à cause de la combustion des particules de suie dans les régions contiennes l'oxygène loin de la zone de formation de suie, et c'est un processus important. Le processus d'oxydation des suies est basé sur la formule de Nagle and Strickland-Constable, qui utilise des paramètres empirique, et cette formule basée sur le concept qu'il y à deus emplacement sur la surface disponible pour l'attaque de O₂. Les emplacement plus réactifs A, et les emplacement moins réactifs B, le taux de réaction à une dépendance de première ordre sur la concentration d'oxygène [71].



Le taux d'oxydation de suie de NSC est donné par [72]:

$$\frac{dm_{so}}{dt} = \frac{M_c}{\rho_s d_s} m_s \omega
 \tag{3.86}$$

M_c: Le poids moléculaire de carbone

ρ_s: La densité de suie

d_s : Le diamètre de suie
 ω : La vitesse de réaction est définie

Le modèle complète aussi utilisé pour la création et la croissance de précurseur de suie, à travers l'utilisation d'espèces fictive de formation de suie, et destruction de particule à travers les collisions de particule-particule. Finalement, les énergies internes spécifiques de la cellule sont réduites à travers la perte de chaleur radiative.

L'activation du modèle de suie dans le code kiva-3v nécessite une variation selon le fichier des données du code (input file-itape5), le modèle exige 3 nouveau rangs de cellule, c à dire d'autres paramètres : le diamètre d'agrandissement du noyau radicalaire du fuel (DRN), le diamètre d'agrandissement du précurseur de suie (DUNC), et la densité de précurseur de suie (CON0). De plus, ils y a 3 nouveau espèces supplémentaire au espèces constituant le mélange. Le noyau radicalaire, précurseur, espèces fictives pour la formation de suie.

3.3.7 Démarches numériques du KIVA 3V

La discrétisation des équations qui gouvernent la combustion dans le code KIVA retient une combinaison de la méthode ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) pour la discrétisation spatiale et une méthode implicite de discrétisation variable au temps (variable theta methods) [58].

3.3.7.1 Discrétisation spatiale par la méthode ALE

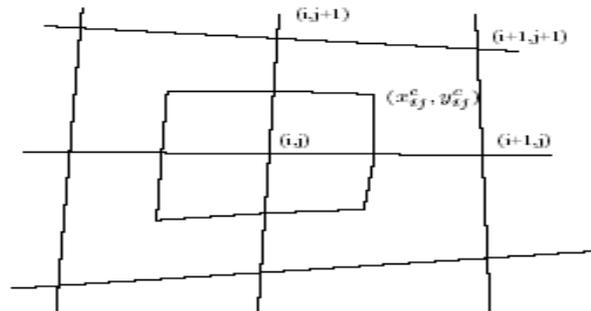


Figure 3.10 : Maille ALE à deux dimensions

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 (Fig 3.10) [58] avec 4 coins, et la cellule de centre et calculer comme :

$$x_{ij}^c = \frac{1}{4} \sum_{\alpha} x_{\alpha} \tag{3.87}$$

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

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 trois 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.

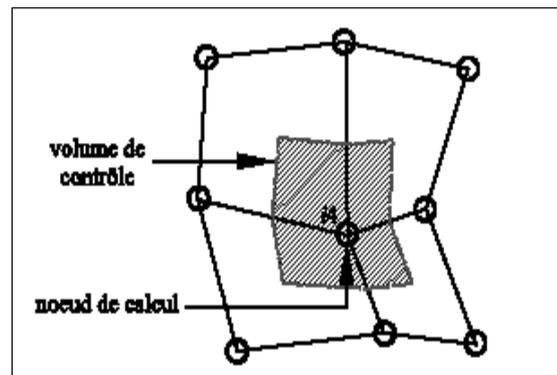
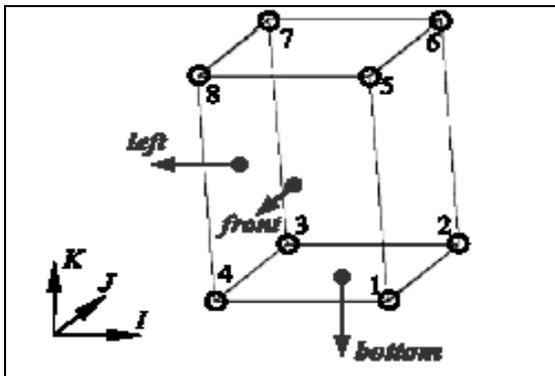
Repérage local des nœuds et faces

Afin de repérer les huit nœuds (ou sommets) de chaque maille, on associe à chacun un numéro, conformément à la fig 3.11 (a). Pour les calculs de flux, il est également utile de repérer chacune des six faces de la maille : la face l (*left*) est la face délimitée par les nœuds 4378, la face r (*right*) par les nœuds 1265, la face b (*bottom*) par les nœuds 4123, la face t (*top*) par les nœuds 8567, la face f (*front*) par les nœuds 4158 et enfin la face d (*derrière*) par les nœuds 3267. Étant donné que la face r , par exemple, est aussi la face l de la maille voisine de droite, et que le même raisonnement peut être appliqué aux faces t et d , on n'utilise finalement que les trois faces caractéristiques l, b et f pour calculer les flux [73].

On définit également des cellules auxiliaires qui sont centrées aux sommets. Ces cellules auxiliaires sont utilisées principalement dans la différenciation de l'équation de la quantité de mouvement. Le centre d'une cellule est calculé comme suit :

$$x_{ijk}^c = \frac{1}{8} \sum_{\alpha} x_{\alpha}, y_{ijk}^c = \frac{1}{8} \sum_{\alpha} y_{\alpha}, z_{ijk}^c = \frac{1}{8} \sum_{\alpha} z_{\alpha} \tag{3.88}$$

Où α s'étend sur les huit sommets de la cellule.



(a) Numérotation locale des nœuds d'une maille et repérage des faces utilisées pour le calcul des flux

(b) volume de contrôle de quantité de mouvement pour le nœud i_4 , dans une configuration i_4

Figure 3.11 : Discrétisation spatiale dans KIVA

Dans la méthode ALE, les vitesses sont localisées aux sommets des cellules, ce qui est commode car aucune interpolation n'est exigée en déterminant le mouvement de sommet dans la phase lagrangienne du calcul. Les quantités thermodynamiques telles que la température, concentrations d'espèce, etc. sont localisées aux centres de cellules.

sur un volume de contrôle donné, noté G , Ainsi, pour calculer la divergence d'une grandeur Φ en un point, on utilise le théorème de Gauss-Ostrogradski , l'intégrale de volume peut être convertie en une intégrale de surface.

$$\int_G \frac{\partial \phi}{\partial x} dw = \int_{\partial G} \phi \cdot n dS \tag{3.89}$$

Avec n la normale unitaire à la surface délimitant le volume G et dirigée vers l'extérieur.

3.3.7.2 Discrétisation temporelle

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

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \approx \frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\Delta t^n} \quad (3.90)$$

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/remailage [58]. 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 computationnelle. 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.

3.3.7.3 Méthode de la solution numérique

Comme dans la version originale de la méthode (ALE cf.[74]), un cycle de calcul kiva est effectué en deux étape : une phase lagrangienne et une phase eulérienne. Pendant la phase lagrangienne, les nœuds du maillage se déplacent à la même vitesse que le fluide. Il n’y a donc aucune convection à travers des frontières des cellules du maillage. Pendant la phase eulérienne, les noeuds du maillage sont ramenés aux nouvelles positions prescrites par l'utilisateur (les anciennes positions si le domaine de calcul n’a pas changé ou de nouvelles positions si le mélange a suivi le déplacement de certaines parois), dans cette la phase le flux convectif est calculé.

a. Généralités sur la formulation arbitrairement eulérienne lagrangienne ALE

a.1 Introduction

En simulation numérique de la mise en forme des matériaux, il y a généralement deux approches qui sont utilisées pour décrire l'évolution du maillage : une approche lagrangienne généralement utilisée pour les solides et une formulation eulérienne plutôt utilisée dans le cas des écoulements des fluides. Dans le cas des méthodes lagrangiennes, la zone maillée correspond exactement à celle occupée par la matière. Le maillage évolue et se déplace en suivant les déformations de la matière. On suit donc exactement la matière dans son mouvement. La vitesse matérielle est égale à la vitesse du maillage et l'évolution de la surface libre est parfaitement représentée par le maillage à chaque pas de temps. Dans le cas d'une formulation eulérienne, le maillage est fixe. Tout le domaine fluide est maillée au début de la simulation et on utilise en général une fonction caractéristique pour indiquer pour chaque maille si elle contient ou non le fluide.

La méthode Arbitrairement Lagrangienne Eulérienne (ALE) permet de combiner les avantages d'une formulation eulérienne (maillage fixe) et d'une formulation lagrangienne (maillage entraîné par la matière). En ALE, le maillage peut avoir une vitesse nulle, égale à celle de la matière, ou encore arbitraire (calculée indépendamment).

Développée tout d'abord en différences finies, la formulation ALE a été intégrée à la fin des années 70 à la méthode des éléments finis pour des problèmes d'interaction fluide structure [Donea77]. La structure et le fluide à l'interface sont traités de manière lagrangienne tandis que l'écoulement du fluide est traité de façon eulérienne.

Dans les années 80, la formulation ALE a été adaptée à la modélisation des procédés de mise en forme [Huetink82]. Elle est particulièrement intéressante pour les procédés où l'on rencontre de fortes déformations de matière (forgeage [Gadala02], laminage circulaire [Davey02, Traore01], usinage [Gadala02], soudage par frottement et malaxage [Guerdoux07], etc.) ou pour des procédés quasi-stationnaires (tréfilage [Huetink82], laminage [Huetink93, Gadala99, Wisselink04, Boman06], etc.). Une revue des procédés de mise en forme ayant recours à l'ALE est présentée dans [Chenot95].

a.2 Formulations eulériennes, lagrangiennes et mixtes

- **Formulation eulérienne**

Une description eulérienne étudie le passage d'une certaine quantité de matière à travers une région donnée de l'espace. Le système de référence associé est fixe et est appelé Système de Référence Spatial (SRS). Chaque point de cet espace, appelé point géométrique, est identifié par un ensemble invariable de coordonnées dénommées coordonnées spatiales ou eulériennes. Dans cette description, l'observateur se place en un point fixe et étudie comment varient les caractéristiques de la particule passant par ce point à l'instant considéré. Cette formulation est généralement celle qui est adoptée en mécanique des fluides.

Dans le cadre de la méthode des éléments finis, une formulation eulérienne impose un maillage fixe dans l'espace. Ce maillage définit un volume de contrôle invariable au cours du temps et une particule matérielle donnée peut migrer d'un élément fini vers un autre. Certaines particules matérielles peuvent même quitter le domaine défini initialement et, dans ce cas, toute information ultérieure relative à ces particules est perdue.

L'utilisation de formulations eulériennes fait apparaître des difficultés lors de l'étude de problèmes à frontières variables. Les frontières du corps étudié ne coïncident généralement ni partout ni à chaque instant avec le bord d'un élément. Il en résulte de grandes difficultés pour prendre en compte les conditions aux limites matérielles ainsi qu'une définition peu précise des frontières matérielles lorsque celles-ci évoluent au cours du temps.

En revanche, les formulations eulériennes autorisent d'importantes distorsions de la matière. Ceci explique pourquoi elles sont largement utilisées en mécanique des fluides ou dans le cas de la mise en forme des matériaux pour l'étude des processus stationnaires [75].

- **Formulation lagrangienne**

Une description lagrangienne étudie le mouvement du corps considéré comme une certaine quantité de matière se déplaçant dans l'espace à partir d'une référence connue. Le système de référence, appelé Système de Référence Matériel (SRM), est donc attaché à la matière. Chaque particule matérielle du corps est identifiée par un ensemble de coordonnées indépendantes appelées coordonnées matérielles ou lagrangiennes. Dans ce cas, l'observateur peut être considéré comme attaché à une particule matérielle donnée et il étudie l'évolution temporelle des propriétés de cette particule au cours de son mouvement. Cette formulation est classiquement adoptée en mécanique des solides.

Dans le cadre de la méthode des éléments finis, une formulation lagrangienne impose à chaque nœud de rester en coïncidence avec la même particule matérielle tout au long du processus de déformation. Cette propriété est intéressante d'un point de vue numérique puisque, lors de l'intégration des lois de comportement, les termes convectifs n'apparaissent pas dans les équations [75]. D'autre part, un élément donné contient toujours le même ensemble de particules matérielles et est donc entraîné (convecté) par la déformation. En particulier, un nœud situé à la frontière du corps reste sur cette frontière au cours de la simulation et, dans ce cas, le suivi d'une frontière mobile ne présente pas de difficultés.

En revanche, en présence de grandes déformations, le maillage peut être fortement distordu et entraîner une imprécision des résultats. Des opérations de réactualisation de maillage (remaillage) sont alors indispensables, opérations coûteuses en temps homme et machine.

- **Formulation ALE**

Les inconvénients des formulations lagrangienne et eulérienne peuvent être largement minimisés grâce à l'adoption de formulations mixtes eulériennes/lagrangiennes. D'une manière générale, dans la littérature, on dénomme formulation mixte eulérienne/lagrangienne ou formulation eulérienne/lagrangienne arbitraire, toute formulation contenant simultanément une part eulérienne et une part lagrangienne. Pour conserver une notation classique, l'abréviation anglo-saxonne est conservée dans la suite du texte : cette formulation est ainsi appelée formulation ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian).

1. Présentation de la formulation ALE

La formulation ALE permet de combiner les avantages de la représentation lagrangienne (bonne définition des frontières variables, facilité d'imposer des conditions aux limites matérielles) et ceux de la formulation eulérienne (possibilité de prise en compte de grandes distorsions). Le principe de cette formulation mixte est le développement de maillages se déplaçant à taux indépendant (bien que non nul) de celui de la matière. En conséquence, la matière se déplace par rapport au maillage, comme dans une formulation eulérienne pure, mais la forme extérieure des éléments est contrôlée par les conditions aux limites du problème, comme dans une formulation lagrangienne.

Le système de référence n'est ni fixe dans l'espace, ni attaché au corps. Ce système de référence est appelé Système de Référence de calcul ou de Grille (SRG). Si le système de référence de grille est fixe, on obtient une formulation eulérienne. Par contre si on l'attache à la matière, la formulation ALE rejoint une formulation lagrangienne. Le fait qu'au cours de la déformation, la position du SRG ne soit ni donnée a priori, ni calculée comme résultat d'une déformation directement liée à celle de la matière, procure une très grande liberté dans la formulation du problème, liberté dont il faut essayer de tirer le maximum de profit.

La position des nœuds du SRG peut, par exemple, être modifiée continûment et de manière imposée pendant le processus de simulation ou encore être traitée par le modèle comme des variables inconnues. Dans ce cas, le modèle doit être étendu pour permettre la prise en compte du processus de détermination de la position des nœuds du SRG simultanément avec le processus de déformation. Le but de ce processus de détermination du SRG est alors double. D'une part, il doit permettre une prise en compte plus aisée de tous les types de conditions aux limites et, d'autre part, il doit maintenir des caractéristiques géométriques acceptables pour tous les éléments finis impliqués.

La figure 3.12 [75] illustre les difficultés associées aux formulations eulérienne et lagrangienne ainsi que l'intérêt des formulations de type ALE.

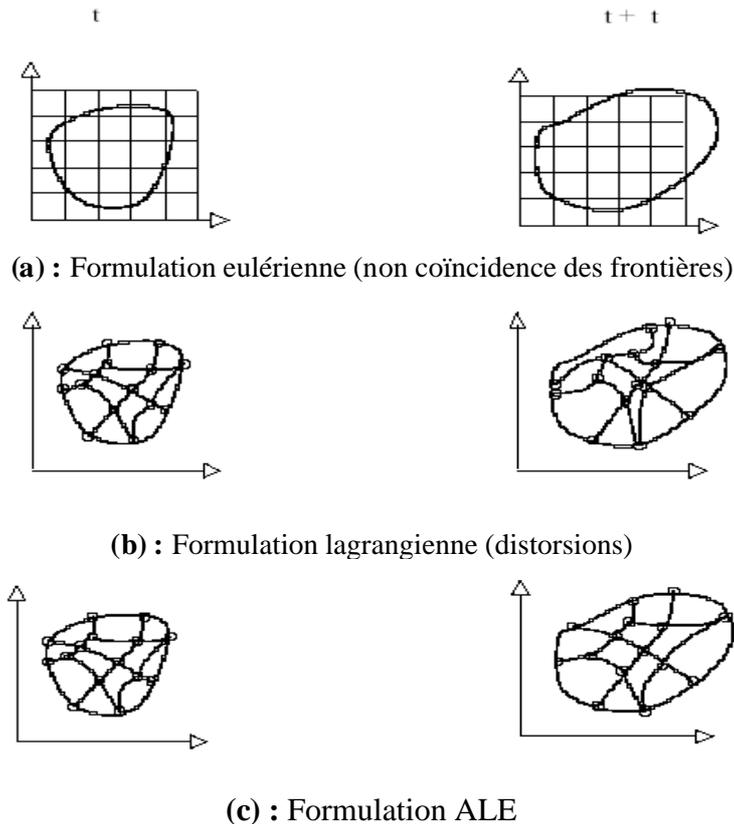


Figure 3.12 : Evolutions parallèles du corps étudié et du maillage associé

2. Quelques applications de la formulation ALE dans la littérature

La formulation ALE est particulièrement bien adaptée à l'étude des écoulements Multidimensionnels à frontières mobiles ou plus généralement à l'étude des problèmes couplés [75].

Hirt et al. [HIR72] utilisent une technique ALE associée à des discrétisations par différences finies pour l'étude de l'effet de chocs dans des tuyaux, d'écoulements autour d'obstacles, d'écoulements instables ou d'écoulements dans l'atmosphère soumise à une explosion.

Hughes et al. [HUG81] utilisent une discrétisation éléments finis pour le calcul d'écoulements. Pour un écoulement avec sur face libre, les degrés de liberté normaux à la surface libre sont lagrangiens et ceux tangents sont eulériens. Ailleurs, ils sont purement eulériens. Ce choix permet de gérer le problème de frontières mobiles.

Dans le domaine nucléaire, Donea et al. [DON82] et Kennedy et Belytschko [KEN81] adaptent la formulation ALE aux problèmes couplés. La structure est traitée de manière lagrangienne tandis que le fluide est traité de façon eulérienne dans l'écoulement et de façon lagrangienne à l'interface avec la structure.

Nomura [NOM94] et Nomura et Hughes [NOM92] simulent des écoulements dans lesquels un solide, considéré comme indéformable, est en mouvement. D'autres, dans le même esprit, considèrent des structures mobiles avec des modèles fluides plus ou moins complexes (modèle turbulent par exemple). Boschitsch et Quackenbush [BOS93] utilisent la méthode des volumes finis pour le fluide alors que Blom et Leyland [BLO97] utilisent des maillages éléments finis.

Undreiner et Frei [UND97] présentent les résultats d'une étude couplée fluide/structure portant sur la simulation du comportement dynamique de la zone fluide entre un flasque de roue et un corps de pompe.

La formulation ALE est également adaptée à la prédiction du comportement de matériaux lors de leurs mises en forme ("écoulement de la matière"). La possibilité de gérer les distorsions est ici pleinement utilisée. Cescutti et al. [CES88], Hu et Liu [HU92, HU93] mettent en place des modèles éléments finis pour simuler le processus de forgeage ou de laminage avec ou sans lubrification [75]. Ponthot s'est également intéressé à la mise en forme et plus généralement à l'étude de la mécanique des milieux continus solides en grandes transformations par la méthode des éléments finis ([PON95], [PON97]).

b. La procédure de solution utilisée dans kiva 3v

Elle peut être utilisée également pour prendre en compte la rotation d'une turbomachine. Cette méthode est déjà utilisée dans des codes de calcul destinés aux écoulements dans les moteurs à pistons comme KIVA ou CHAD, pour ne citer que des codes de recherche.

Le choix de la méthode ALE se présente comme le seul pleinement compatible avec la plate-forme informatique choisie, les contraintes de conservativité et de traitement des équations de Navier-Stokes compressibles et les échéances de ces travaux. Toutefois, cette méthode seule ne peut pas aisément traiter les cas généraux les plus compliqués, notamment pour le mouvement de soupapes qui doit être traité en respectant des critères de qualité de maillage. Mais sa combinaison avec des possibilités de maillages non coincidants et glissants améliore grandement sa souplesse d'utilisation. C'est ce type de solution qui a été retenue par des éditeurs de logiciels spécialisés pour la simulation du fonctionnement des moteurs à pistons.

La procédure de solution pour les sprays et pour les équations de conservation de la phase gazeuse effectuée en 3 stages : A, B et C. Les stages A et B utilise un calcul lagrangienne, pour le stage C, la computation se fait d'après champs de flux eulérienne [76].

b.1 Le spray

Le modèle de la trajectoire des gouttelettes de spray se base sur la formulation lagrangienne qui traque les trajectoires d'un grand nombre de particules computationnelles pour simuler la phase de dispersion. Chaque particule computationnelle représente un certain nombre de gouttelettes réel avec les mêmes propriétés.

Huit équations différentielles ordinaires pour la vitesse, énergie interne et masse de la particule computationnelle, avec trois termes pour son emplacement, est résolues numériquement. Les gouttelettes de spray sont supposés être sphérique et les oscillations de la gouttelette on lieu autour de son forme d'équilibre sphérique. À cause de la grande ration de densité du combustible liquide au gaz ambiant, le comportement dynamique des gouttelettes est principalement gouverné par résistance aérodynamique. L'influence de vitesse relative entre gaz ambiant et les gouttelettes est prise en considération par la correction de Ranz-Marshall de la convection de nombres Nusselt et Sherwood.

Le modèle de l'évaporation est basé sur la solution de Stefan-Problem sphériquement symétrique, quasi stationnaire [76]. À la surface de la gouttelette, la phase d'équilibre entre le liquide et la vapeur est présumée. Les différences de température locales à l'intérieur de la gouttelette sont négligées (c'est, par conséquent, un "modèle de la température constant"). La collision et le fractionnement de la gouttelette sont aussi inclus.

b.2 La phase gazeuse

Stage A

Dans kiva, Le stage A prend en compte de façon totalement explicite une partie des termes sources. Les termes sources concernant la collision et oscillation / fractionnement des gouttelettes de spray sont calculés dans le stage A. Calculer les contributions aux équations de masse et de l'énergie due aux chimie et spray sont aussi une majeure tâche computationnelle ici. Le terme source de la chimie est résolu implicitement, estimant du problème de rigidité due à la chimie complexe (Amsden et al, 1989 ; Golovitchev et al., 1999) [76].

Stage B

Dans kiva, Le stage B prend en compte de façon plus ou moins implicite les termes sources restant de stage A. Cette étape traite les termes sources dans les équations de quantité de mouvement due au spray, les termes de diffusion dans les équations de quantité de mouvement et énergie, aussi bien que ces sources dans les équations de la turbulence. Pour que le calcul soit plus efficace pour des flux au faible nombre de Mach, la méthode Pressure Gradient Scaling (PGS) est appliquée pour les termes de pression dans les équations de quantité de mouvement (Amsden et al, 1989).

La procédure de la solution est basée principalement sur la méthode SIMPLE. Résout les équations individuelles avec la méthode conjugate residual par un mode implicite. Les itérations numériques de base de la Méthode Simple impliquent deux étapes :

1. le champ de la pression prédit est gelé et les autres quantités de l'écoulement sont résolues par l'utilisation de la méthode implicite de différence finie pour les termes de la diffusion.
2. Les valeurs des termes de diffusion obtenue dans la première étape (1) sont gelées et le champ de la pression est corrigé par la solution numérique d'équations implicites pour le terme de pression.

A la fin de l'étape (2) [76], les champs de la pression prédits et corrigés sont comparés. Si la différence entre les champs de pression dépasse la tolérance de convergence, le champ de la pression corrigé devient le nouveau champ de la pression prédit, et l'itération répétée.

Stage C

Le stage C est connu par la phase de rezonning. Le transport convectif est calculé dans un mode explicite en sous-cycles. Le schéma numérique utilisé pour la discrétisation des termes convectifs est soit quasi-second-order upwind (QSOU), soit partial donor cell (PDC). Pour être plus exacte, Le schéma QSOU est le plus utilisé dans les calculs. Pour les détails, voyez le manuel (Amsden et al, 1989).

3.3.8 Les Équations Gouvernantes

Le but de cette section est de présenter les équations de conservation à 3 dimensions, pour la masse, la quantité de mouvement, et de l'énergie pour un flux réactif en présence des gouttelettes de liquide. Comme la modélisation de spray est essentielle pour les simulations diesel, différents modèles pour les gouttelettes sont aussi discutés.

3.3.8.1 Les équations de la phase gazeuse

Dans l'absence des gouttelettes de liquide, les équations de Navier-Stokes pour l'écoulement de gaz peuvent être utilisés. La présence de la phase liquide influe sur la phase gazeuse par un échangeant de masse, vitesse et énergie entre eux. Par conséquent, les termes source prendre en considération pour ces échanges inclus dans les équations de conservation pour la phase gazeuse [77].

a. Equation de conservation de la masse totale

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u}) = \dot{\rho}^s \quad (3.91)$$

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

b. Equation de conservation de la masse des espèces

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \text{div}(\rho_k \vec{u} + \vec{J}_k) = M_k \dot{\omega}_k + \dot{\rho}_k^s, \quad (k = 1, \dots, N_s) \quad (3.92)$$

Où ; $\rho_k, M_k, \dot{\omega}_k$ et $\dot{\rho}_k^s$ 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. Le courant de flux pour espèce k inclut deux composants [77].

1. $\rho_k \vec{u}$: le terme de flux convectif pour une vitesse moyenne du courant de mélange.
2. $\vec{J}_k = \rho_k \vec{V}_k$: le flux de diffusion relatif au centre de la masse du mélange.

La vitesse de diffusion \vec{V}_k est définie comme la différence entre la vitesse moyenne de composant k et la vitesse au centre de la masse de mélange.

c. Équation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{u}) + \text{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \text{div}(\vec{P}) = \rho \vec{g} + \vec{f}^s \quad (3.93)$$

Où \vec{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.

d. Equation de conservation de l'énergie

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \text{div}(\rho \vec{u} E + \vec{J}_q) + \vec{P} : \text{grad}(\vec{u}) = \dot{q}^s + \dot{q}^r \quad (3.94)$$

Ou, E est l'énergie interne spécifique, \vec{J}_q un terme source due au chaleur de conduction, et $\vec{P} : \text{grad}(\vec{u})$ [77] 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.

L'équation 4, peut aussi écrire avec autre forme par l'utilisation d'un terme de l'enthalpie spécifique, $H = E + P / \rho$ comme :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) - \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \bar{u} H + \bar{J}_q) + \bar{P} : \text{grad}(\bar{u}) - \text{div}(\rho \bar{u}) = \dot{q}^s + \dot{q}^r \quad (3.95)$$

Pour un système multi composants, H est le poids massique à enthalpie moyenne, donné par :

$$H = \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^{N_s} \rho_k \left[\int_{T_r}^T c_{p,k} dT + (\Delta h_f^0)_k \right] = h + \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^{N_s} \rho_k (\Delta h_f^0)_k \quad (3.96)$$

Ou, $(\Delta h_f^0)_k$ est la chaleur de formation de l'espèce k à 0 absolue. h définie un poids massique d'enthalpie moyenne, le terme exclusive de la chaleur de formation est définie par :

$$h = \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^{N_s} \rho_k \left[\int_{T_r}^T c_{p,k} dT \right] \quad (3.97)$$

Dans l'analogie de la définition de h, une énergie interne spécifique, e, exclusive de la chaleur chimique de formation, peut être définie. Donc, l'équation d'énergie, en terme d'énergie spécifique comme utiliser dans le code kiva (Amsden et al, 1989), peut être écrire comme suivants [77] :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \text{div}(\rho \bar{u} e + \bar{J}_q) + \bar{P} : \text{grad}(\bar{u}) = \dot{q}^c + \dot{q}^s + \dot{q}^r \quad (3.98)$$

Ou, le terme source, \dot{q}^c attribué au réactions chimique, il est définie par :

$$\dot{q}^c = \sum_{k=1}^{N_s} \left(\frac{\partial \rho_k}{\partial t} \right) (\Delta h_f^0)_k = - \sum_{k=1}^{N_s} M_k \dot{\omega}_k (\Delta h_f^0)_k \quad (3.99)$$

Le flux de diffusion \bar{J}_k dans Equation 3.92, le tenseur de pression \bar{P} dans Equation 3.93, et le flux de chaleur \bar{J}_q dans Equation 3.95 ou Equation 3.98 sont définies par les loi empirique ; loi de Fick, loi de Newton, loi de Fourier, respectivement.

e. Equations des models de turbulence:

- (a) version Standard du modèle de la turbulence du k-ε, modifiée pour inclure l'effets de L'expansion volumétrique (dilatation de vitesse) et l'Interactions spray/turbulence [51]

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \nabla \cdot (\rho \bar{u} k) = - \frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot \bar{u} + \bar{\sigma} : \nabla \bar{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{Pr_k} \right) \nabla k \right] - \rho \varepsilon + \dot{W}^s \quad (3.100)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \nabla \cdot (\rho \bar{u} \varepsilon) = - \left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3} \right) \rho \varepsilon \nabla \cdot \bar{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{Pr_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] +$$

$$\frac{\varepsilon}{k} \left[C_{\varepsilon 1} \bar{\sigma} : \nabla \bar{u} - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_s \dot{W}^s \right] \quad (3.101)$$

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, $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, $C_{\varepsilon 3}$, Pr_k , Pr_ε sont les constantes usuelles du modèle de la turbulence k - ε , μ est un coefficient de viscosité.

- (b) RNG k - ε modèle, (Combustion Science and Technology, 106, pp.267-295, 1995) [78].

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \nabla \cdot (\rho \bar{u} k) = -\frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot \bar{u} + \bar{\sigma} : \nabla \bar{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{Pr_k} \right) \nabla k \right] - \rho \varepsilon + \dot{W}^s \quad (3.102)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \nabla \cdot (\rho \bar{u} \varepsilon) = & -\left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3} + \frac{2}{3} C_\mu C_\eta \frac{k}{\varepsilon} \nabla \cdot \bar{u} \right) \rho \varepsilon \nabla \cdot \bar{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{Pr_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \\ & \frac{\varepsilon}{k} \left[(C_{\varepsilon 1} - C_\eta) \bar{\sigma} : \nabla \bar{u} - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_s \dot{W}^s \right] \end{aligned} \quad (3.103)$$

Les valeurs standards des constantes utilisées dans les calculs des moteurs sont données sur le tableau 3.2 suivant [58]:

Constant	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	C_s	Pr_k	Pr_ε	η_0	β	c_u
Standard k - ε	1.44	1.92	-1.0	1.5	1.0	1.3	-	-	0.09
RNG k - ε	1.42	1.68	-	1.5	0.719	0.719	4.38	0.012	0.0845

Tableau 3.2 : Valeurs des constantes utilisées dans les modèles de turbulence k - ε et RNG k - ε

Avec :

$$c_\eta = \frac{\eta(1 - \eta/\eta_0)}{1 + \beta\eta^3} \quad (3.104)$$

$$\eta = \frac{S\tilde{k}}{\varepsilon} \quad (3.105)$$

$$S = (2S_{ij}S_{ij})^{1/2} \quad (3.106)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.107)$$

η est le rapport entre le taux de la turbulence et la tension moyenne. S est la magnitude de tension moyenne S_{ij} . Pour distorsion rapide dans un écoulement avec un faible nombre de Mach, les équations suivantes donnent les constants restants [58]:

$$c_{\varepsilon 3} = \frac{-1 + 2c_{\varepsilon 1} - 3m(n-1) + (-1)^\delta \sqrt{6c_\mu c_\eta \eta}}{3}$$

$$c_\eta \eta = \frac{-1}{\beta_{\eta 0}} \quad (3.108)$$

$$m = 0.5 [58]$$

$$\delta = 1; \quad si \quad \nabla \cdot \bar{u} < 0$$

$$\delta = 0; \quad si \quad \nabla \cdot \bar{u} > 0$$

Le signe de c_{∞} changer avec le signe de la vitesse de dilatation. n est l'index pour les processus polytropic, généralement pris 1.4 pour les études des moteur [58].

3.3.8.2 Les équations de la phase liquide

L'association des termes source entre les phases gazeuse et liquide dans les équations 3.93 et 3.98 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. Sont discuter précédemment, voire section (3.1.2) [77].

Chapitre 4

Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

L'objectif de cette étude est de calculer les concentrations des espèces polluantes formées lors de la combustion d'un fuel pour un moteur à combustion diesel.

1. LES MODELES UTILISES POUR LA SIMULATION NUMERIQUE UTILISANT LE CODE KIVA-3v

1.1 Modèles physiques utilisés dans la simulation

Tous les modèles sont détaillés dans le chapitre 3.

1.1.1 Le Spray

Un modèle discret des gouttelettes (DDM) est appliqué pour décrire la dynamique de la phase liquide. Pour ce but, l'équation d'évolution du spray est discrétisée et appliquée à un nombre prescrit des gouttelettes représentatives caractérisées par des propriétés identiques. Les valeurs initiales des propriétés de la gouttelette sont définies à travers l'injection des conditions aux limites.

Le fractionnement d'un jet liquide cylindrique ou annulaire pénétrant dans un milieu gazeux est modélisé par le model Taylor Analogy Breakup (TAB) basé sur l'analogie de Taylor.

Dans le modèle standard de collision de la gouttelette deux parties peuvent entrer en collision quand ils occupent la même cellule computationnelle et la collision est basée sur une fonction de la probabilité.

La gouttelette liquide reçoit son énergie thermique du gaz. Cette énergie est utilisée pour augmenter la température du liquide et vaincre la chaleur latente d'évaporation pour faire évaporer le combustible. À moins que le gaz soit saturé par de la vapeur combustible, l'évaporation toujours a lieu et réduit le rayon de la gouttelette. Si la chaleur transférée délivrée par le gaz est insuffisante, la température de la gouttelette diminue.

Le terme d'accélération de la gouttelette, due à la charge aérodynamique et à la force de la gravité. La modélisation de l'accélération de la gouttelette exige l'existence d'une force F totale pour la supposition que la gouttelette reste sphérique.

Le fuel est injecté selon une distribution square.

1.1.2 La chimie

Les réactions chimiques sont classées en deux classes : celles qui se produisent de manière dynamique et celles qui sont supposées en équilibre permanent.

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

Le sous programme *chem* [54], nous permet de calculer le changement de la densité des espèces, et l'énergie interne dus aux réactions chimiques cinétiques. Les coefficients des taux de réactions direct et inverse, sont représentés sous l'expression de la forme généralisée d'Arrhenius.

Les réactions chimiques de type d'équilibre sont décrites par des relations implicites du type [59] :

$$\prod_{\alpha} \left(\frac{\rho_{\alpha}}{W_{\alpha}} \right)^{\nu_{\alpha} v_{\alpha}''} = \exp \left(A_r \ln T_A + \frac{B_r}{T_A} + C_r + D_r T_A + E_r T_A^2 \right) \quad (4.1)$$

Où, $T_A = T/1000$ °k

Les sous programmes *chemeq* et *chmqgm*, nous permet de calculer le changement de la densité des espèces, et de l'énergie interne dues aux réactions chimiques d'équilibre. Le sous programme *chemeq* résout les différents types de réactions d'équilibre, mais Le sous programme *chmqgm* résout un système de 6 réactions chimiques implanté dans le code utilisant un algorithme de meintjes-morgan [54].

1.2 La turbulence

Pour dériver l'équation exacte pour ε et de trouver une approximation de la fermeture convenable pour l'équation exacte qui gouverne son comportement, le modèle de turbulence k - ε est utilisé [56]. L'approche consiste à représenter les propriétés de la turbulence à l'aide des échelles de vitesse et de longueur caractéristiques des fluctuations. Deux équations de transport additionnelles sont résolues pour l'énergie cinétique k et le taux de dissipation ε .

1.3 Loi de paroi

Une manière traditionnelle pour traiter le transfert de chaleur à travers la paroi est basée sur l'analogie de Reynolds. Une mise à jour a été implantée dans KIVA-3V, conforme étroitement à l'expression d'origine proposée par Launder et Spalding [54].

1.4 L'allumage

La cinétique de l'allumage est un processus à basse température de réactions en chaîne. Nous avons choisi un modèle global, le modèle Shell, puisque ce modèle représente bien les étapes de base du phénomène d'allumage. Le modèle d'allumage Shell [60] a été développé par Halstead. C'est un modèle thermocinétique basé sur un mécanisme réduit pour l'oxydation d'un hydrocarbure. Il a été testé qualitativement en confrontation à des résultats expérimentaux.

1.5 La combustion

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, puisque celle-ci joue un rôle. Pour notre simulation numérique par kiva-3v, le modèle utilisé est le modèle de la combustion turbulente basé sur le modèle de « eddy-dissipation » développé par Magnussen et Hjertager [61].

1.6 La formation des NOx

Pour estimer les NOx formés de la combustion diesel, on a intérêt au NOx thermique. On a utilisé et implanté dans le kiva-3v le modèle Zeldovich élargi [65]. Ces réactions nécessitent donc la présence des radicaux O et OH que l'on trouve en forte concentration dans les produits de combustion.

1.7 La formation des suies

Pour la modélisation de suie, plusieurs modèles on proposé pour estimer et mieux comprendre Le processus de formation suie. On à utilisé le modèle de Surovikin, Surovikin (1976) fait des améliorations sur le modèle de Tesner (1971) en ajoutant une étape intermédiaire qui décrit la croissance du noyaux radicalaires et leur conversion quand le noyau principal atteint un diamètre critique au précurseur par une surface physique. On à utilisé le modèle de formation de suie Surovikin en combinaison avec le modèle d'oxydation de suie Nagle and Strickland-Constable, pour décrire le processus de formation et d'oxydation des suies [54].

Le modèle de suie est originalement basé sur V. F. Surovikin [69], tant que l'oxydation des particules de suie suit la procédure de Haynes et Wagner [70], avec les constantes du modèle de Nagle et Strickland – Constable [71].

2. SPECIFICATION DU MOTEUR DIESEL UTILISE POUR LA SIMULATION

2.1 la forme du piston et le maillage généré

Un générateur maille automatique a été fourni dans le sous-programme *SETUP* [54] qui crée une grille cylindrique à deux ou à trois dimensions. Le code peut générer la maille pour différentes formes de piston pour les chambres de combustion des moteurs à combustion interne. Le générateur de maille exige seulement un fichier de données sous forme d'un tableau d'information. La figure 4.1, présente le maillage suivant (x,z) avec la présence des 2 valves. La forme étudiée est la forme mexicaine présentée par la Fig.4.2 [79]

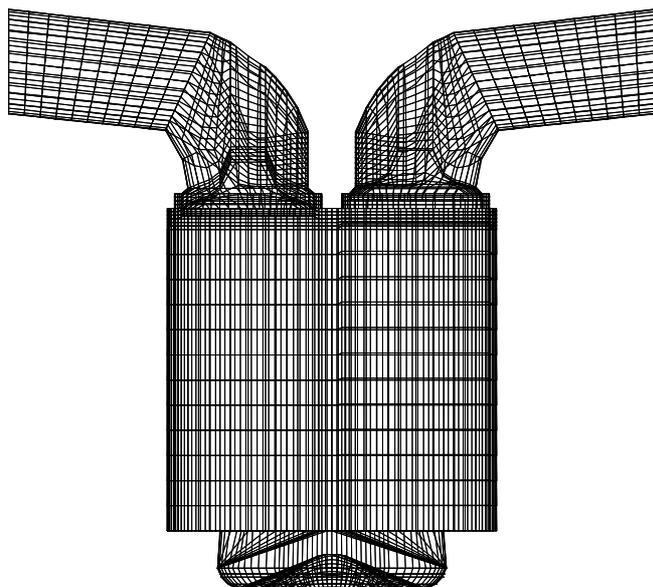


Figure 4.1 : Maillage avec valve

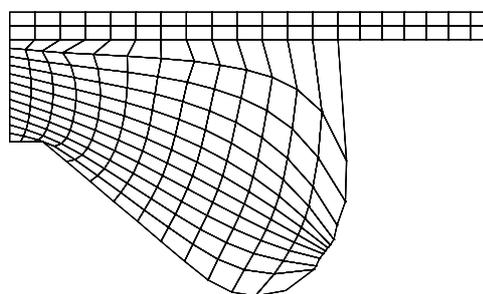


Figure 4.2 : La géométrie du piston au PMH

2.2 Paramètres du moteur

Le moteur utilisé dans la simulation est un moteur diesel à deux temps, les propriétés du moteur, les conditions de simulation, et tous les paramètres concernant le model choisi est représentée selon le tableau 4.1 [79].

Tableau 1. les détails du moteur diesel utilisé	
<i>Spécification géométrique</i>	
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
<i>Les données d'injection</i>	
La température du fuel	350 °k
Le Temps d'injection	25° ATDC / 10° ATDC
La durée d'injection	7° CA
Le type du jet	Conne solide
L'angle d'injection	25°
<i>Les conditions d'opération</i>	
La vitesse se rotation	2600 rpm
Le temps d'injection	14° ATDC
La pression d'admission	1.5 bar
<i>Les paramètres de simulation</i>	
La température d'admission d'air	550 k
La pression d'admission d'air	1.5 bar / 2 bar
Le modèle de la turbulence	k-ε model
La masse totale du fuel injecté	0.01 g/cycle
Le fuel	N-heptane

Tableau 4.1 : Spécifications du moteur diesel

3. LES REACTIONS CHIMIQUES

Une réaction globale d'oxydation du carburant injecté (C₇H₁₆) d'après [80]:



4. LES REACTIONS DE FORMATION DES NO_x

La formation des NO_x thermiques dans le cylindre est modélisée par le mécanisme de Zeldovich élargi et les réactions représentées par des équations des réactions dynamiques sont montrées sur le tableau 4.2. Les constantes des taux sont prises d'après Heywood [33]. Elles sont déterminées empiriquement et peuvent varier complètement entre des différentes sources dans la littérature. Ces constantes des taux sont utilisées pour calculer les taux de réactions.

Reaction	Constantes des taux (cm ³ /mole/s)
$O_2 + 2N_2 \rightarrow 2NO + 2N$	$1.5587 * 10^{14} \exp[-67627/T]$
$2N + 2NO \rightarrow 2N_2 + O_2$	$7.5000 * 10^{12}$
$N + 2O_2 \rightarrow 2NO + 2O$	$2.6484 * 10^{10} \exp[-59418/T]$
$2O + 2NO \rightarrow 2O_2 + N$	$1.6 * 10^9 \exp[-19678/T]$
$N_2 + 2OH \rightarrow 2NO + 2H$	$2.1230 * 10^{14} \exp[-57020/T]$
$NO + O \rightarrow NO_2$	$4.7 * 10^{24} T^{-2.87} \exp[-781.8/T]$

Tableau 4.2 : les réactions dynamiques utilisées dans le modèle pour la formation de NOx

5. LES REACTIONS DE FORMATION DE CO

Pour modéliser le processus des autres réactions chimiques pendant la combustion, Les réactions de dissociation entre H_2O , CO_2 , N_2 et O_2 représentées par les réactions d'équilibre suivantes ont été utilisées [33]. Tableau 4.3

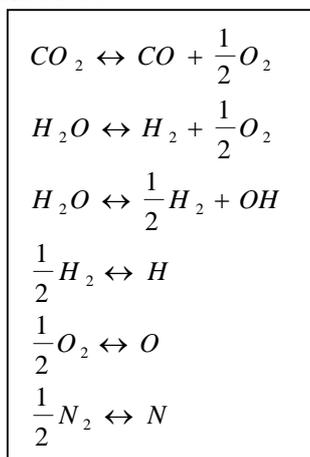


Tableau 4.3 : les réactions d'équilibre utilisées dans le modèle

6. LES RÉACTIONS DE FORMATION ET D'OXIDATION DE SUIE

Le modèle proposé pour la formation des suies est décrit par Surovikin et Nagle & Strickland-Constable pour la formation et l'oxydation de suie respectivement.

Le modèle de Surovikin, suppose que la formation de suie est effectuée selon 3 étapes :

La première est la formation du noyau radicalaire. La seconde est la croissance du noyau radicalaire et sa conversion avec une surface physique, jusqu'à atteindre un diamètre critique. La troisième est la croissance du noyau et sa transformation en particules de carbone [66].

Les deux premières étapes ont une nature chimique, et sont dues aux : (1) formation et croissance du noyau radicalaire comme résultat de décomposition thermique des molécules initiales d'hydrocarbone (HC) avec la division d'hydrogène et (2) l'apparition de la formation des noyaux à travers la réaction du noyau radicalaire avec les molécules de HC. La 3^{ème} étape du processus consiste à l'interaction de la molécule d'hydrocarbone et le noyau radicalaire avec une surface extrêmement active de croissance du noyau de particules de carbone, *Kumar et al (2002)*. Cette étape commence presque quand le premier noyau radicalaire atteint un diamètre critique. Ce modèle est capable de prédire la concentration totale de suie dans le cylindre et la distribution des dimensions de particule.

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

Equation du modèle de Surovikin

- $0 < t < t_{crit}$:

Avant que le premier noyau atteigne un diamètre critique et se convertisse en noyau particule [81] :

$$\frac{dn}{dt} = V_0 + F_n - G_0 n^2 + K \quad \text{le taux de formation du noyaus radicalaires} \quad (4.3)$$

$$\frac{d(D_{r-n})}{dt} = \sqrt{\frac{6}{\pi \rho_{r-n}}} \frac{1}{3} G^{\frac{2}{3}} \frac{dG}{dt} \quad \text{le taux de croissancedes précurseurs} \quad (4.4)$$

$$\frac{dN}{dt} = Z_{r-n} S_{r-n} + Z_{nuc} S_{nuc} \quad \text{le taux de consommation d'hydrocarbone} \quad (4.5)$$

Où, N est la concentration des molécules d'hydrocarbone, n est la concentration du noyau radicalaire et D_{r-n} est le diamètre du radical.

- $t > t_{crit}$:

Après que le premier noyau atteigne un diamètre critique et se convertisse en précurseur [81].

$$\frac{dn}{dt} = V_0 + F_n - G_0 n^2 + K \quad \text{le taux de formation du noyau radicalair e} \quad (4.6)$$

$$\frac{d(D_{r-n})}{dt} = \sqrt{\frac{6}{\pi \rho_{r-n}}} \frac{1}{3} G^{\frac{2}{3}} \frac{dG}{dt} \quad \text{le taux de croissance du noyau radicalair e} \quad (4.7)$$

$$\frac{dN}{dt} = Z_{r-n} S_{r-n} + Z_{nuc} S_{nuc} \quad \text{le taux de concentrat ion d'hydrocarbo ne} \quad (4.8)$$

$$\frac{dV_{nuc}}{dt} = \frac{\pi}{2} \left(\frac{D_{r-n,cr} + D_{nuc}}{2} \right)^2 \frac{d \left(\frac{D_{r-n,cr} + D_{nuc}}{2} \right)}{dt} \quad \text{le taux de croissance du précurseur} \quad (4.9)$$

$$\frac{dn'}{dt} = V_0 + F_n' - G_0 (n')^2 - K \quad \text{le taux de formation du précurseur} \quad (4.10)$$

$$\frac{dm}{dt} = \frac{dn'}{dt} \frac{V}{V_{ind}} \quad \text{la dépendence de } m(t) \text{ et } n(t) \quad (4.11)$$

Où, m : la concentration du précurseur, n' : la dépendance entre $m(t)$ et $n(t)$, D_{nuc} : le diamètre.

Pour les réactions précédentes on peut mentionner les différentes variables comme suit [81]:

V_0 : le taux de formation continue de nouveau noyau radicalaire.

F : branchement du noyau radicalaire aux noyaux formant du processus de pyrolyse

K : destruction du noyau radicalaire par leurs collisions par la surface de croissance

précurseur

$V_0 = 10^{13} N_{exp} (-E_1/RT)$ ou, N est la concentration des molécules de HC en temps t et 10^{13} est un facteur pré exponentielle pour le taux des réactions monomoléculaire [83].

L'énergie d'activation de formation du noyau E_1 est égale à l'énergie de séparation de C-H ou d'attachement C-C.

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

Basons sur les données expérimentales, le terme F est égal à $2.0 \cdot 10^4$ [81]. Le coefficient G_0 représente un facteur de collision d'un noyau radicalaire avec un autre.

$$G_0 = \pi D_{r-n}^2 \sqrt{\frac{8RT}{\pi M_1^*}} \quad (4.12)$$

Où, D_{r-n} est le diamètre du noyau radicalaire croissant en temps t , R est la constante des gaz, T est la température, et M_1^* est le poids moléculaire de noyau radicalaire en collision [82].

$$M_1^* = \frac{M_{A1} M_{B1}}{M_{A1} + M_{B1}} \quad (4.13)$$

$$M_{A1} = M_{B1} = \frac{1}{2} \left(12 \frac{V}{v} + M_{HC} \right) \quad (4.14)$$

Où, V est le volume du noyau radicalaire ($\pi/6 D_{r-n}^3$), v est le volume d'atome de carbone ($v = 12 / \rho_{r-n} N_A$), M_{HC} est le poids moléculaire d'hydrocarbure initiale, N_A est le nombre d'Avogadro, ρ_{r-n} est la densité du noyau radicalaire.

K est le taux d'interaction du noyau radicalaire avec la surface de croissance de précurseur ;

($K = Z_s S_{nuc}$), où Z_s est le nombre des collisions de noyau radicalaire avec la surface du précurseur en unité de volume par unité de temps :

$$Z_s = n \sqrt{\frac{RT}{2\pi M_{A1}}} e^{-\frac{E_4}{RT}} \quad (4.15)$$

S_{nuc} est la région de la surface du précurseur en unité de volume de la réaction du gaz au temps t , $S_{nuc} = \pi [(D_{r-n,cr} + D_{nuc})^2] m$, où $(D_{r-n,cr} + D_{nuc})/2$ est le diamètre moyen d'un groupe de précurseurs qui ont une dimension de $D_{r-n,cr}$ à D_{nuc} au temps t . E_4 est l'énergie d'activation du réaction de noyau radicalaire avec la surface du précurseur croissant.

G est le poids du noyau radicalaire et $D_{r-n} = (6/\pi \rho_{r-n})^{1/3}$ est le diamètre du noyau radicalaire.

Le poids du noyau radicalaire au temps t sous conditions qu'à chaque collision active avec une molécule de HC, le noyau radicalaire augmenté par le poids de la partie du carbone de la

molécule en collision, peut être représenté par $G = \int_0^t m_c n_c Z^a dt$, où m_c est la masse d'atome

de carbone, n_c d'atome de carbone dans la molécule de HC, et Z^a est le nombre de collisions actives du noyau radicalaire avec les molécules d'hydrocarbure par unité de temps

($Z^a = Z e^{-E_2/RT}$), où Z est le nombre total de collisions du noyau radicalaire avec les

molécules d'hydrocarbure par unité du temps, $Z = \pi (r_A + D_{r-n}/2)^2 (8RT/\pi M_2^*)^{1/2} N$, où, r_A

est le rayon effectif de la molécule de HC et M_2^* est le poids moléculaire réduit de noyau radicalaire en collision ($M_2^* = M_{A1} M_{HC} / M_{A1} + M_{HC}$). E_2 est l'énergie d'activation du

croissance de noyau radicalaire. Le taux d'augmentation de poids du noyau radicalaire est $dG/dt = m_c n_c Z^a$.

En forme générale, le taux de consommation de HC (N) consiste au perte de molécules de HC comme résultats de collisions actives par la surface du noyau radicalaire et le précurseur, où,

$Z_{r-n}^m = Z_s^m e^{-E_2/RT}$ est le nombre de collisions active de molécules de HC avec la surface du

noyau radicalaire, en unité de volume par unité de temps, S_{r-n} est la région de la surface du

noyau radicalaire en unité de volume par unité de temps et $Z_{nuc}^m = Z_s^m e^{-E_3/RT}$ est le nombre de

collisions actives de molécules de HC avec la surface du précurseur. Z_s^m est le nombre de

collisions des molécules en unité de volume avec unité de surface par unité de temps. E_3 est

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

l'énergie d'activation du précurseur croissant. Pour la théorie de cinétique

moléculaire $Z_s^m = (RT / 2\pi M_{HC})^{1/2} N$. La surface des graines radicalaires $S_{r-n} = \pi(r_A + D_{r-n}/2)^2 n$.

L'augmentation en taux de grain peut être donnée par $Dv_{nuc}/dt = (-dN/dt) V_c/m$; où, V_c est le volume de la partie de carbone de molécule de HC ($V_c = m_c n_c / \rho_{nuc}$), $V_{nuc} = (\pi/6)[D_{r-n,cr} + D_{nuc}]/2$.

Par différenciation, on obtient :

$$\frac{dV_{nuc}}{dt} = \frac{\pi}{2} \left(\frac{D_{r-n,cr} + D_{nuc}}{2} \right)^2 \frac{d \left(\frac{D_{r-n,cr} + D_{nuc}}{2} \right)}{dt} \quad (4.16)$$

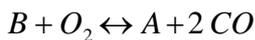
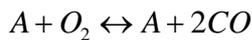
Posons le temps nécessaire pour atteindre le diamètre critique par le premier noyau radicalaire égal à t_{crit} . En ce moment l'autre noyau radicalaire formé dans la période d'induction, aussi croît pour obtenir un diamètre critique et se convertir en précurseur de suie. Dans l'intervalle de temps de $t=0$ à $t=t_{crit}$, le système est décrit par 3 équations différentielles (4.3-4.5) avec 3 inconnues N , n , et D_{r-n} . Pour le temps t_{crit} , un quatrième inconnue apparaît dans le système, c'est le terme m (concentration du précurseur). Dans ce cas des conditions supplémentaires sont nécessaires pour la solution du système d'équations.

Dans la période de la zone d'induction, une augmentation de la concentration des noyaux radicalaire (RN) n et leur croissance prend place.

Les valeurs de D_{nuc} , N , n , m , et n' sont déterminées par la solution du système d'équations différentielles eqs. 4.3 – 4.11.

Equations pour le modèle de Nagle et Strickland

Le processus d'oxydation des suies est basé sur la formule de Nagle and Strickland-Constable, qui utilise des paramètres empiriques, et cette formule basée sur le concept qu'il y a deux emplacements sur la surface disponibles pour l'attaque de O_2 : Les emplacements plus réactifs A et les emplacements moins réactifs B [71].



Le taux d'oxydation de suie de NSC est donné par:

$$\frac{dm_{so}}{dt} = \frac{M_c}{\rho_s d_s} m_s \omega \quad (4.12)$$

M_c : Le poids moléculaire de carbone ; (12 g/mole),

ρ_s : La densité de suie ; (2.0 g/cm³)

d_s : Le diamètre de suie ; (2.248*10⁻⁸m).

ω : La vitesse de réaction est définie

$$w = \left(\frac{K_A P_{ox}}{1 + K_Z P_{ox}} \right) x + K_B P_{ox} (1 - x) \quad (4.13)$$

Où, P_{ox} est la pression partielle d'oxygène. Et les constantes des taux empiriques utilisés pour le modèle d'oxydation de NSC sont illustrés sur le tableau 4.4 [84].

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

Les constantes	Les unités
$K_A = 20 \exp(-15100/T)$	$\text{g-C/cm}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{atm}$
$K_B = 4.46 \cdot 10^{-3} \exp(-7640/T)$	$\text{g-C/cm}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{atm}$
$K_T = 1.51 \cdot 10^5 \exp(-48800/T)$	$\text{g-C/cm}^2 \cdot \text{s}$
$K_Z = 20 \exp(-15100/T)$	atm^{-1}

Tableau 4.4 : les constantes pour NGS

Les trois étapes précédentes pour la formation de suie et aussi l'oxydation sont schématisées sur la fig 4.3 [81].

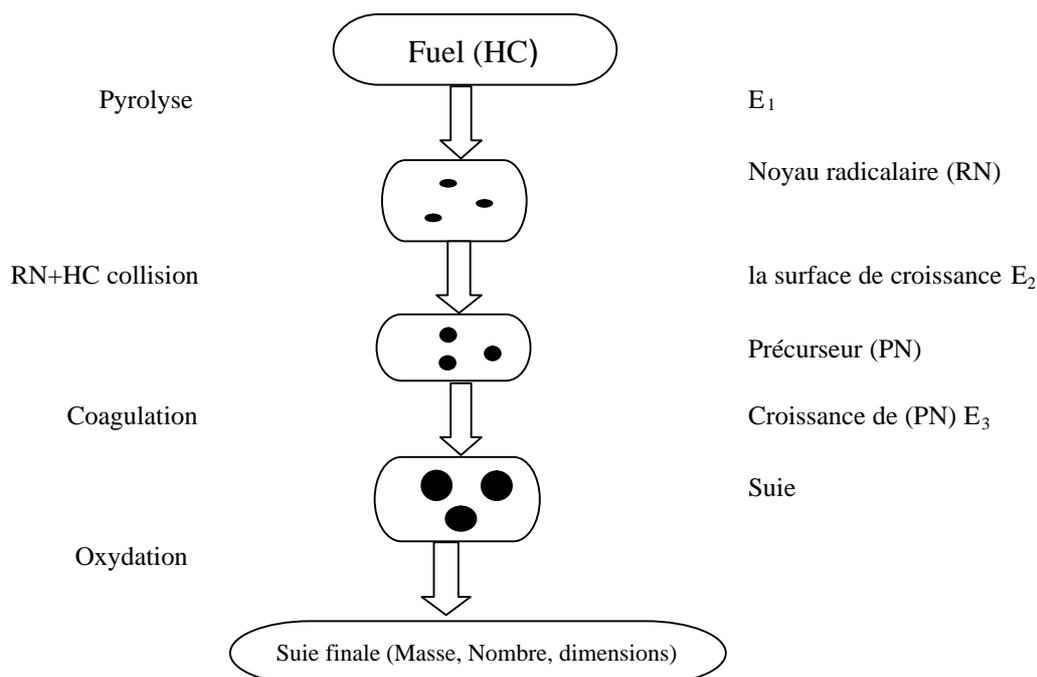


Figure 4.3 : modèle de suie

7. LES RÉSULTATS OBTENUS

7.1 RÉSULTATS DE PRESSION, TEMPÉRATURE, TKE, EPSILON, CHALEUR DÉGAGÉE

7.1.1 courbes

Le graphique 4.4 montre 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 obtenues par simulation sont élevées près de la fin de zone d'injection. La valeur maximale (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 4.4, 4.5)

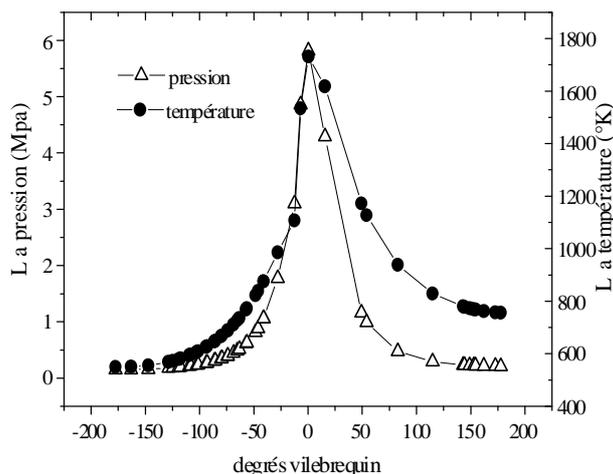


Figure 4.4 : évolution de la pression et de la Température en fonction des degrés vilebrequin

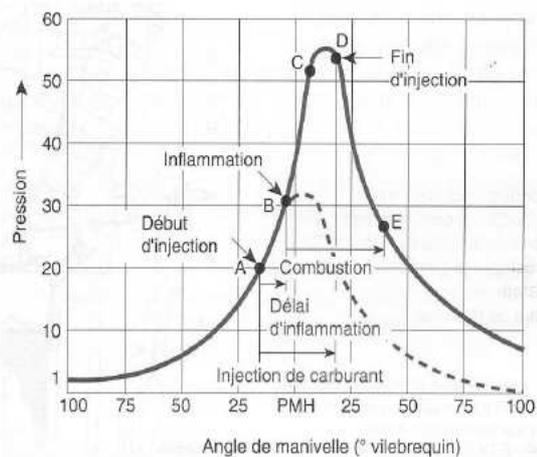


Figure 4.5 : Chronologie de la combustion d'après [85]

La fig 4.4, présente aussi la l'évolution de la température à l'intérieur du cylindre moteur. Cette courbe de température concorde bien avec la littérature en ce qui concerne la température maximale de combustion. Pour ce qui est de l'allure générale de la courbe, on peut expliquer un peu l'allure de la façon suivante. Le premier soubresaut correspond approximativement à la fin de l'injection donc il y a beaucoup de carburants qui absorbent la chaleur ambiante pour s'évaporer. Après ce premier soubresaut, l'augmentation rapide de la température correspond au début de l'inflammation du carburant par l'étincelle. Par la suite l'évolution du front de flamme dans des zones à concentration différentes de carburant peut entraîner les variations suivantes. Les zones riches en carburant absorbent de la chaleur pour s'évaporer (légère baisse de la température) et s'enflamment par la suite en contribuant ainsi à l'augmentation de la chaleur dégagée. La diminution de la température suit une courbe normale qui correspond bien à la détente des gaz.

La Fig.4.5 [85], présente une évolution de pression cylindre, c'est une analyse de combustion.

- A→B** Délai d'inflammation
- B→C** Combustion rapide (phase incontrôlée)
- C→D** Combustion principale (phase contrôlée)
- D→E** Post combustion ou phase par diffusion
- A** Début d'injection
- D** Fin d'injection
- Courbe sans injection

A partir du début de l'injection, quatre phases successives se déroulent :

* **Le délai d'inflammation** (Points **A→B**, fig 4.5.)

C'est la phase (très courte) préparatoire à la combustion, qui sépare le début de l'injection du début de l'inflammation du combustible. Ce délai, lié à la nature du combustible (indice de cétane) et à certains phénomènes physiques et chimiques se décompose en :

- *Délai physique* : c'est le temps pendant lequel les fines gouttelettes de combustible s'échauffent au contact de l'air jusqu'à leur "vaporisation" (variable selon la température de l'air, la vitesse, la dimension des gouttelettes et la viscosité de combustible, ...).

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

- *Délai chimique* : Pendant le temps qui précède l'inflammation, se réalise "oxydation" du combustible. La durée est comprise entre 0.001 et 0.002 seconde, une montée constante de la pression de compression a lieu pendant cette phase, proportionnelle à l'angle de rotation du vilebrequin (10 à 20°).

* *Propagation de la flamme* (points **B** → **C**, fig 4.5)

Le mélange carburant s'est formé, et le processus d'inflammation s'amorce en une multitude de points, à une vitesse extrêmement grande (présence d'un excès important d'oxygène et d'une masse de combustible pulvérisée durant le délai d'inflammation).

La vitesse de combustion (1000 à 1200 m/s) définit la montée en pression dans le cylindre et le bruit résultant de cette phase (combustion rapide ou phase incontrôlée).

* *Combustion principale* (points **C** → **D**, fig 4.5)

L'injection se poursuit, le combustible continue à brûler progressivement, la vitesse de combustion diminue, tandis que la pression et la température continuent à s'élever. C'est la phase de combustion "contrôlée" (en fonction du volume de combustible injecté par degré de rotation du vilebrequin). C'est lors de cette phase, qu'une scission des molécules du combustible (cracking) s'effectue et donne naissance à :

- des produits gazeux et légers qui brûlent,
- des produits plus lourds plus difficiles à brûler.

* *Post combustion ou combustion diffusante* (points **D** → **E**, fig 4.5)

La fin d'injection (fermeture de l'injecteur) se produit au point "D", mais le mélange carburant continue à brûler.

Les conditions sont de plus en plus défavorables :

- raréfaction de l'oxygène,
- volume croissant de la chambre de combustion (pression et température en baisse rapide, descente du piston vers le PMB),
- hydrocarbures restants difficiles à brûler.

La durée de cette dernière phase est liée aux deux précédentes (une qualité de pulvérisation médiocre ou une mauvaise combustion principale vont augmenter la post combustion). La phase de post combustion doit être la plus courte possible, toute durée supplémentaire se traduit par une augmentation de la température des gaz d'échappement et une baisse de rendement.

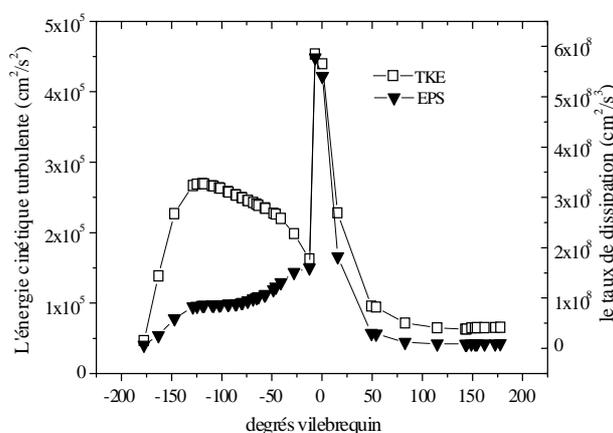


Figure 4.6 : variation de l'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation avec le mouvement du piston

La Fig4.6, 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 augmente durant la phase de compression, et atteint une

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

valeur maximale près du PMH, exactement à -5 atdc, $4.4 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{s}^2$. La courbe de variation du taux de dissipation est présentée aussi dans la figure 4.6. La valeur maximale atteinte est $5.5 \cdot 10^8 \text{ cm}^2/\text{s}^3$.

7.1.2 Contours

Les isothermes et le champ de pression sont schématisés sur les figs 4.7, 4.8. La fig 4.9, montre la distribution de l'énergie cinétique turbulente au pmh. à la fin de la phase de compression, on remarque que la turbulence prend globalement des valeurs plus élevées dues au mouvement ascendant du piston. Au centre du bol de piston, l'intensité de l'énergie cinétique turbulente (TKE) est très grande que celle aux autres extrémités. Au niveau de la face extérieure du bol, la valeur maximale du taux de dissipation est obtenue. Ce qui est montré par la figure 4.10.

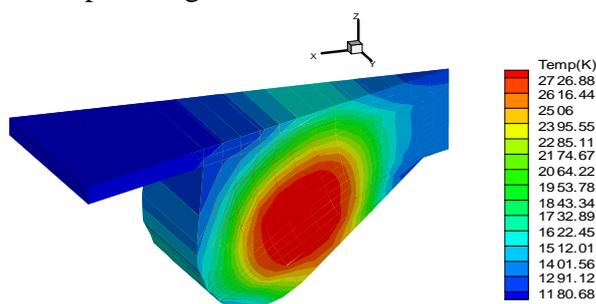


Figure 4.7 : contours de température

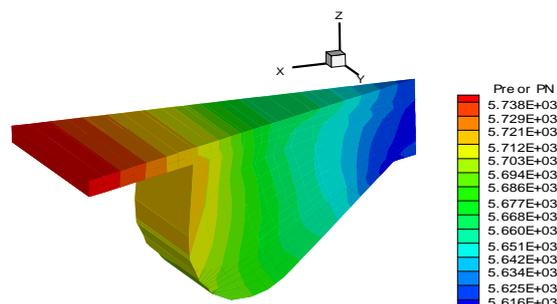


Figure 4.8 : contours de pression

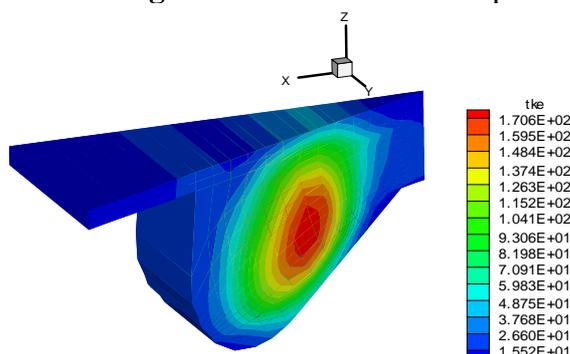


Figure 4.9 : contours de TKE

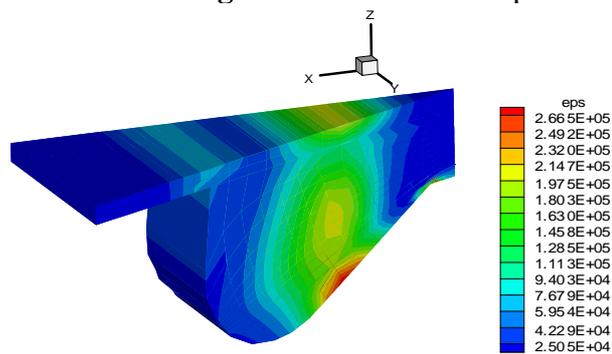


Figure 4.10 : contours de Epsilon

7.2 RÉSULTAS DES ESPÈCES CHIMIQUES

7.2.1 Courbes

Le moteur n'admet pas un mélange d'air et de carburant, mais seulement un volume d'air sensiblement égal à la contenance du cylindre. C'est seulement après la compression de cet air que l'on injecte le carburant, sous forme d'une pulvérisation grâce à un injecteur. Selon la puissance demandée au moteur, on injecte plus ou moins de carburant, (généralement du fuel), ce qui demande plus ou moins de temps selon la quantité.

En arrivant dans la masse d'air comprimée et échauffée par cette compression, les gouttelettes de carburant s'enflamment spontanément et brûlent, cette combustion est relativement lente et dure toute la durée de l'injection. Les gouttelettes de carburant arrivent dans un milieu très largement surdosé en oxygène et trouvent assez facilement celui ci, de

plus, la combustion se faisant progressivement, les choses se passent beaucoup mieux que pour le moteur à essence. Il suffit, évidemment de ne jamais injecter plus de carburant que le moteur est capable d'avaler d'air, ce qui a conduit à l'adoption de compresseur sur ce type de moteur.

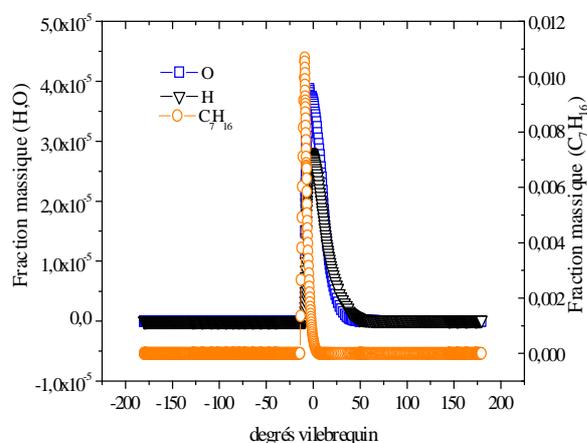


Figure 4.11 : évolution de C_7H_{16} , o, h en fonction des degrés vilebrequin

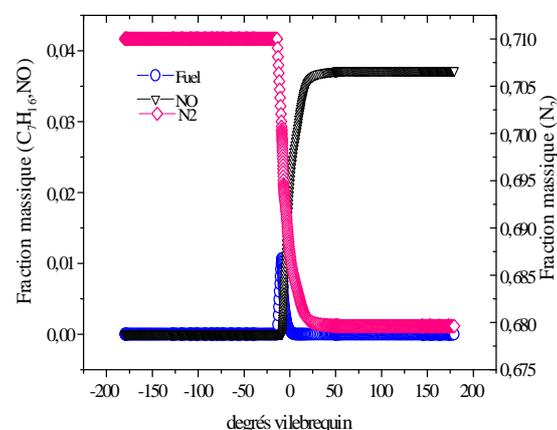


Figure 4.12 : évolution de C_7H_{16} , N_2 , NO en fonction des degrés vilebrequin

La fig 4.12, 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 ont été déterminés par les processus d'injection, vaporisation, auto inflammation et combustion.

Les espèces chimiques o, h résultent des réactions de dissociation (réaction d'équilibre). Leurs évolutions dans le mélange sont représentées par la fig 4.12. On peut remarquer que l'allure de la courbe est la même que celle de n-heptane. à crank = -9.05214 degrés, la valeur maximale de la fraction massique du C_7H_{16} est 0.01068. La valeur max de fraction massique de O est obtenue à -7,35118 degrés vilebrequin, cette valeur égale à 3,49895E-5. Pour H, on peut trouver que la fraction massique de H est maximale à -2,63067 par une valeur de 2,81069E-5. Ce qu'on tire des pics obtenus aux différentes positions du vilebrequin.

Dans un moteurs diesel, NO_x thermique est considéré la partie essentielle pour la formation de NO_x , le mécanisme de Zeldovich élargi à été implanté pour déterminer la formation de NO_x . Le terme NO_x regroupe les deux espèces chimiques NO et NO_2 .

La formation du NO lors de l'oxydation du C_7H_{16} avec l'oxygène de l'air, exactement par la transformation de N_2 de l'air, présente une évolution le long du parcours de piston.

La Fig4.12, montre la concentration moyenne de NO. L'élévation de cette concentration en NO se manifeste d'une manière rapide juste après le début de la combustion. La formation de NO augmente avec l'avance de la combustion et l'augmentation de la pression moyenne dans le cylindre. Après le pic de la pression, les températures des gaz brûlés diminuent en raison de leur détente et à cause des transferts de chaleur à travers les parois du cylindre. Cet abaissement de température amorti la chimie de NO et sa concentration demeure relativement constante [33].

La courbe de N_2 présentée par la fig 4.12, 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.

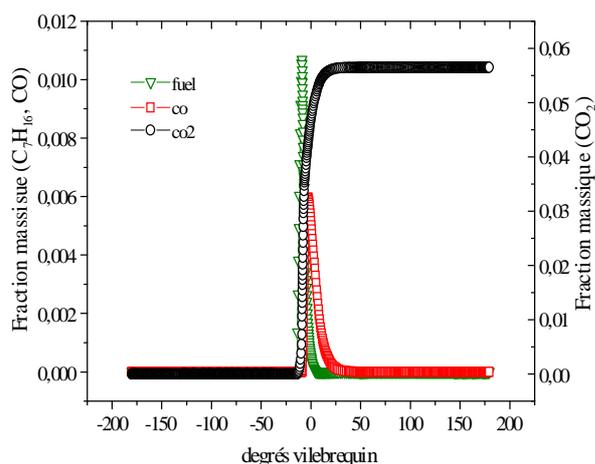


Figure 4.13 : évolution de C_7H_{16} , CO , CO_2 en Fonction des degrés vilebrequin

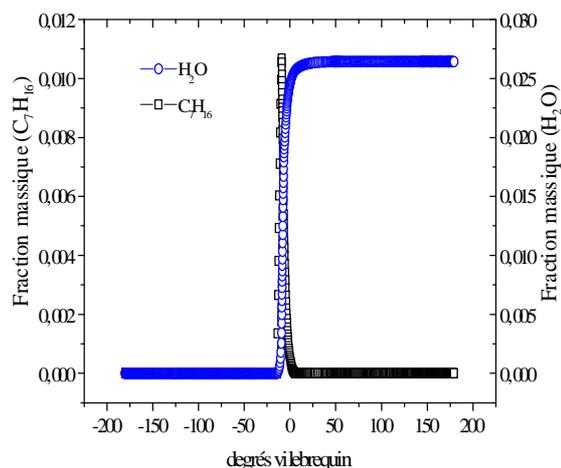


Figure 4.14 : évolution de C_7H_{16} , H_2O en fonction des degrés vilebrequin

Le dioxyde de carbone, est aussi considéré comme polluant, produit de processus de combustion, résulte de l'interaction directe entre le combustible injecté et l'air à comprimé dans le cylindre. Les premières traces de CO_2 apparaissent au niveau des degrés d'injection et sa quantité augmente successivement avec l'augmentation de la masse injectée 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 4.13 montre l'évolution de la fraction massique du dioxyde de carbone CO_2 .

Au début de l'injection (dans ce cas, 14° vilebrequin avant le PMH), une fraction de CO_2 était présente dans le cylindre dû aux gaz résiduels. Pendant le délai d'auto inflammation, cette fraction massique reste presque constante et juste avant l'allumage, le taux de réaction monte rapidement et on aura une augmentation raide de la masse de CO_2 .

En plus, et avec l'existence des réactions de dissociation, le CO_2 produit se transforme en CO , qui est aussi considéré comme une substance polluante. L'évolution de la formation de CO est schématisée sur la fig 4.13.

Pour ce qui est des émissions polluantes, les figs 4.11 et 4.13 permettent de constater que la combustion est complète car le monoxyde de carbone (CO) est pratiquement inexistant à la fin de la combustion (presque ~ 0). Le NO , quant à lui se forme seulement sous haute température entre 9 degrés avant le PMH et 35 degrés après le PMH. Cette région correspond à la zone de température maximale illustrée à la fig 4.4. Sur la fig 4.13, on peut voir que la formation de CO_2 se poursuit malgré le fait qu'il n'y ait plus de carburant. Ceci s'explique par le fait que sous l'effet des hautes températures le CO continue de s'oxyder avec l'oxygène qui n'a toujours pas réagit pour former du CO_2 .

L'évolution de la fraction massique du H_2O produit lors de la combustion du n-heptane est illustrée sur la fig 4.14. L'oxygène contenu dans l'air admis dans le cylindre, en premier temps, à une valeur constante, mais au temps d'injection, cette quantité diminue linéairement, parceque l'oxygène se combine avec le combustible injecté.

Il faut noter que la capture du délai d'auto inflammation est très délicate et nécessite l'utilisation d'une chimie détaillée, Ce délai d'allumage peut être détecté grossièrement par l'analyse des courbes de pression ou du taux de dégagement de chaleur comme suggéré par Heywood [33].

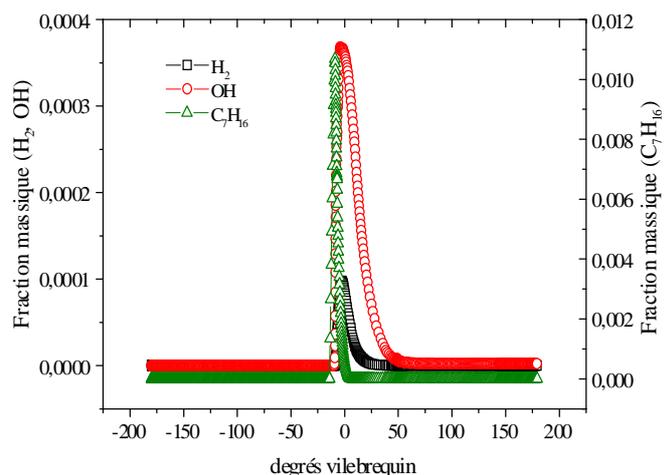


Figure 4.15 : évolution de c_7h_{16} , oh , h_2 en fonction des degrés vilebrequin

La Fig 4.15, présente l'évolution des espèces chimiques oh et h_2 .

7.2.2 Contours

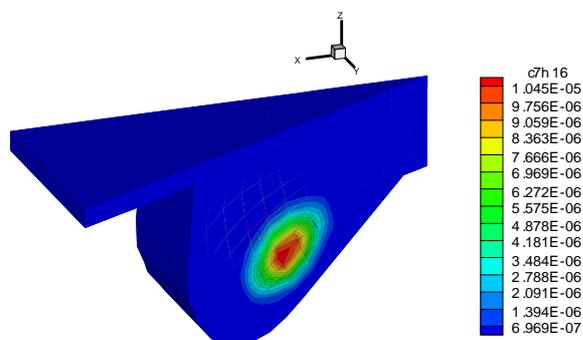


Figure 4.16 : contours de c_7h_{16}

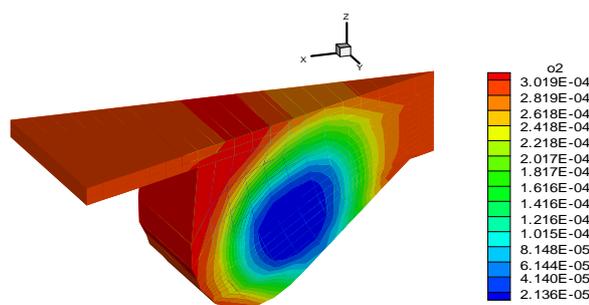


Figure 4.17 : contours de o_2

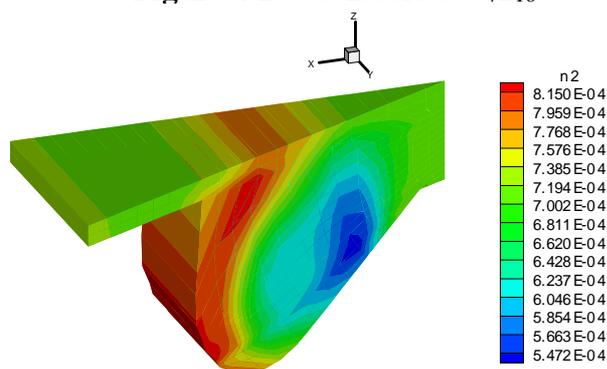


Figure 4.18 : contours de N_2

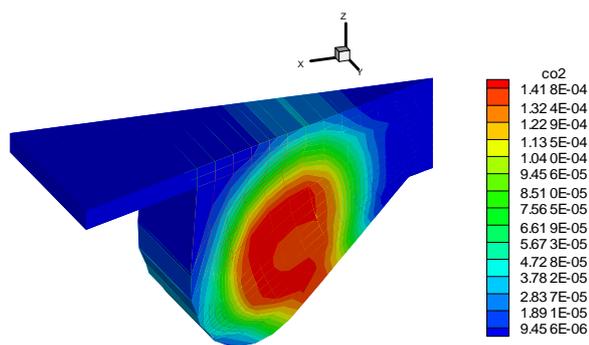


Figure 4.19 : contours de co_2

En outre, on peut voir sur la fig 4.16 que la température du cœur du jet est basse du fait que le carburant est injecté à une température plus basse que celle de l'air qui environne le jet. Les températures dans les régions riches en carburant sont plus basses que dans les régions où le carburant se penche loin de l'injecteur. Par conséquent, l'allumage se produit dans ces dernières régions.

Malgré tout dans ce type de moteur aussi, on attache un grand soin à la qualité de la pulvérisation que l'on recherche la plus fine possible.

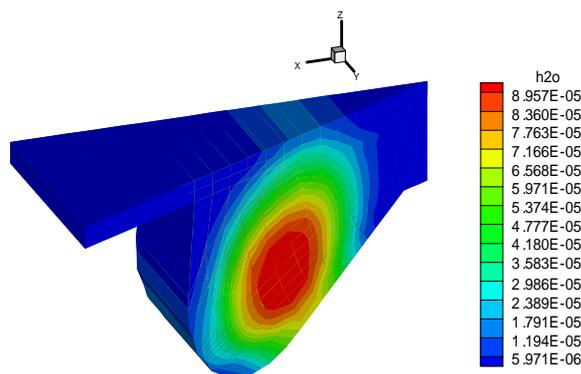


Figure 4.20 : contours de h₂O

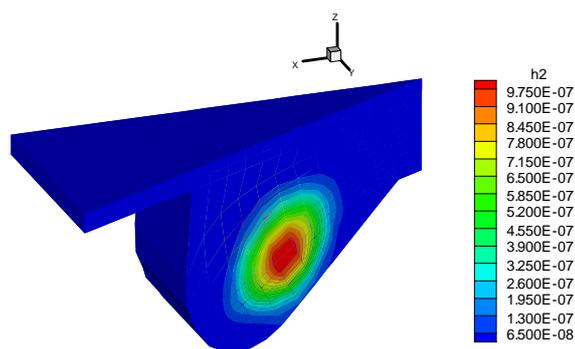


Figure 4.21 : contours de h₂

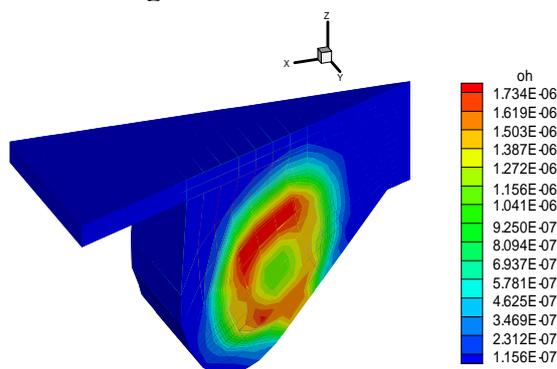


Figure 4.22 : contours de oh

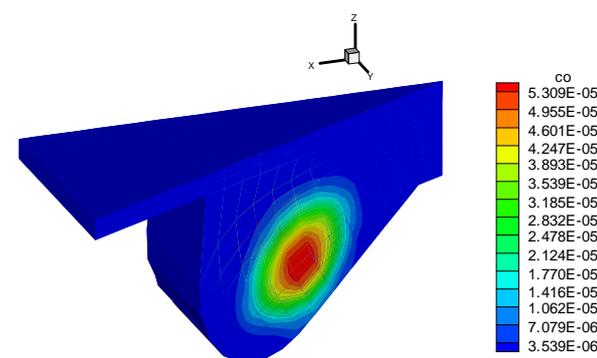


Figure 4.23 : contours de co

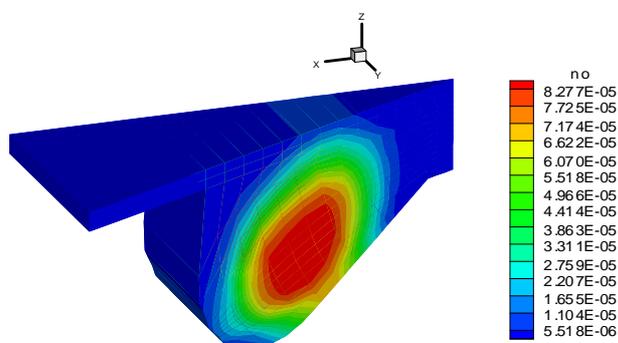


Figure 4.24 : contours de NO

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 4.16 et 4.24 sont prises au niveau du PMH. La fig 4.16 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 différentes positions de piston, on peut tirer l'avantage de la diffusion de la flamme vers l'extérieur du jet. C'est non seulement parce que plus de carburant a été injecté, mais également parce que les températures de la flamme font évaporer le carburant plus rapidement.

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

Le champ de la température est représenté sur la figure 4.7 et montre clairement la propagation de la flamme qui s'éloigne dans les régions pauvres et riches en carburant. La partie très riche plus proche de l'injecteur reste froide et les températures les plus élevées sont captées, comme prévu, dans les zones proches de la stœchiométrie.

Les régions de formations de NO peuvent être examinées par le schéma des contours de NO, la température et le fuel. Une vue du bol de piston suivant (x, z), nous permet de voir la distribution de NO (figs 4.7 et 4.16 et 4.24)

La Fig4.25, présente le taux de dégagement de la chaleur durant la combustion du C_7H_{16} . La période de combustion cinétique est également appelée de combustion de pré-mélange. En effet le dégagement de chaleur pendant cette période est dû essentiellement à la combustion rapide du volume de mélange obtenu à la fin du délai d'inflammation. Pour une valeur de délai d'inflammation important, le taux dégagement de chaleur est important, la pente de la courbe d'évolution de pression dans le cylindre est importante.

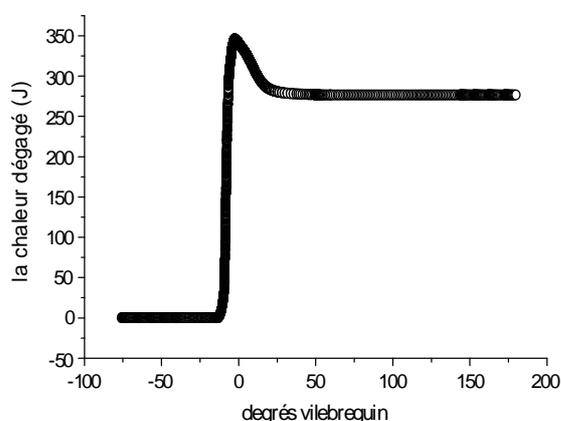


Figure 4.25 : le taux de dégagement de la chaleur

La période de la combustion diffusante est une période de combustion relativement lente : le taux de dégagement de chaleur est limité par le taux de d'évaporation du carburant donc par la diffusion. Dans le cas de délais d'inflammation faible, la phase de combustion diffusante est prédominante.

7.3 RÉSULTAS DE SUIE

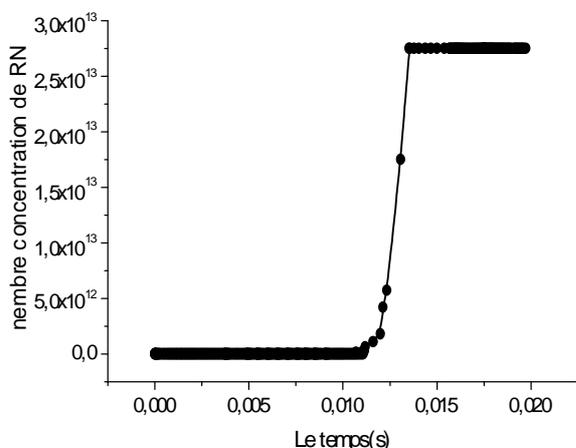


Figure 4.26 : Le nombre de concentration de noyau principale

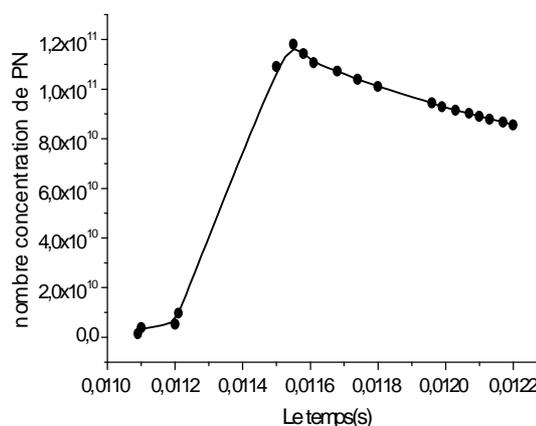


Figure 4.27 : Le nombre de concentration de noyau particule

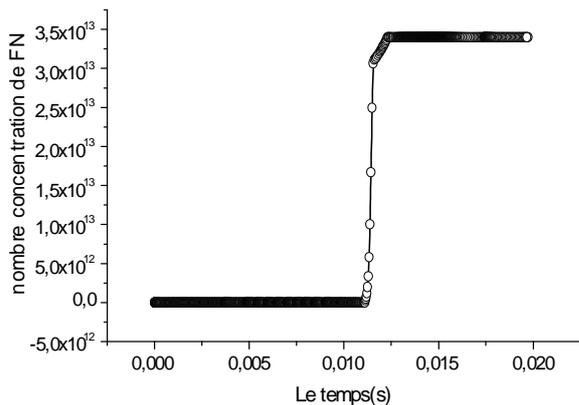


Figure 4.28 : Le nombre de concentration d'espèce fictive

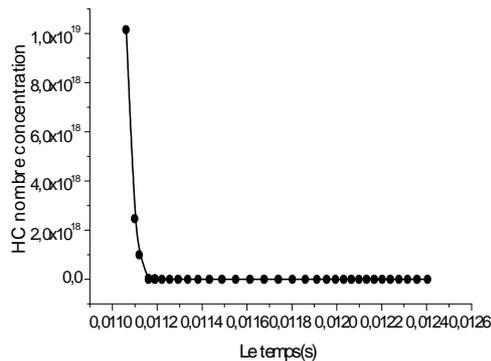


Figure 4.29 : Le nombre de concentration d'hydrocarbure

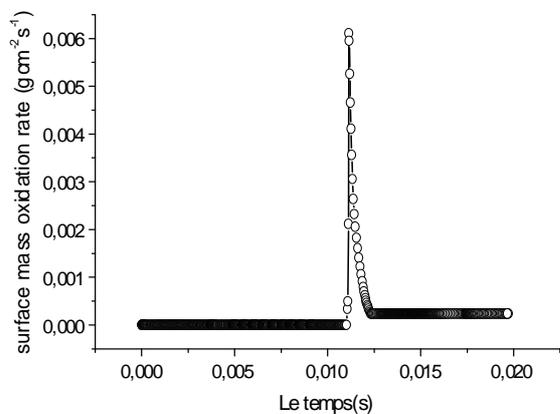


Figure 4.30 : Le taux d'oxydation de suie D'après NGS

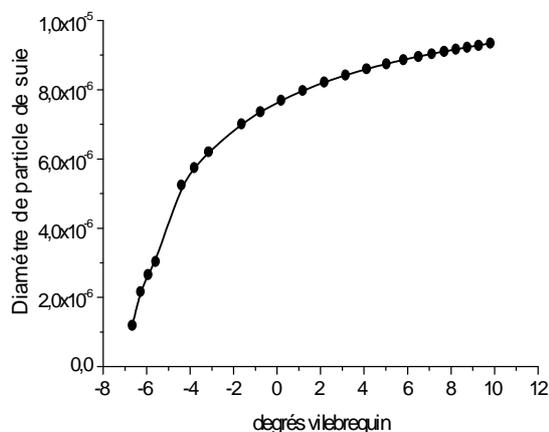


Figure 4.31 : Diamètre des particules de suie

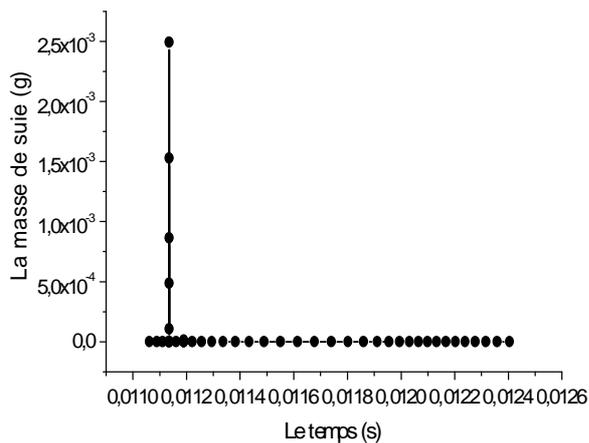


Figure 4.32 : La masse de suie (g) dans

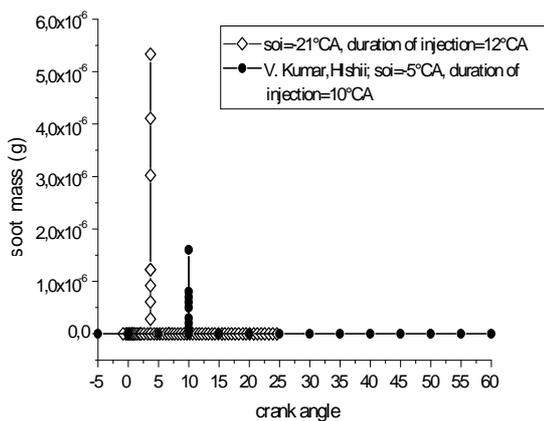


Figure 4.33 : la masse de suie

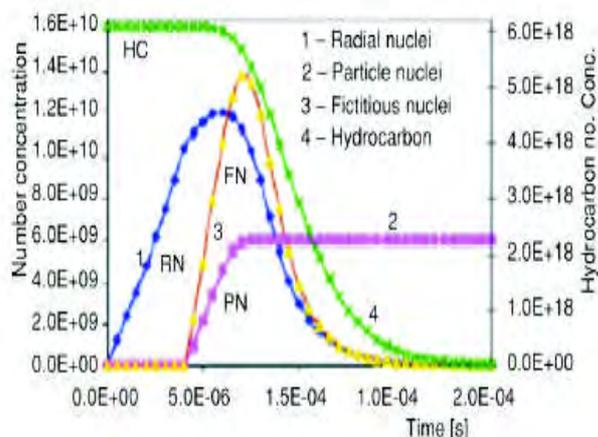


Figure 4.34 : cinétique de formation de suie selon [82]

Cette étude a pour but de traiter numériquement un cycle thermodynamique pour un moteur diesel. Les conditions utilisées dans la simulation sont : la vitesse de rotation du moteur 2600 rpm, la masse du fuel (n-heptane) injecté est 0.01g, le début d'injection est -21 atdc, et la durée d'injection est de 12 °CA.

Pendant l'injection, le jet de combustible pénètre presque linéairement jusqu'à atteindre une valeur maximale. La masse de C_7H_{16} augmente jusqu'à la valeur d'injection, le combustible commence à se mélanger avec l'air ambiant.

Le mécanisme de d'interaction air-combustible et la location spatiale du début de combustion évolue suivant le progrès d'injection du combustible, évaporation, auto inflammation, et la combustion [68].

Les quantités résolues pour prédire la formation et l'oxydation de suie sont habituellement la concentration de nombre de particules (aucune distinction de dimensions). Le modèle de formation de suie est selon 3 étapes :

- (1) formation de noyau principal
- (2) croissance de noyau principal et sa conversion au noyau particule par une surface physique.
- (3) Croissance de noyau particule et sa transformation en particules de carbone.

L'accumulation du nombre de noyau principal et leur croissance a lieu durant la période d'induction dans la 1^{er} et la 2^{ème} étapes du processus (fig 4.26). Dans la zone de période d'induction, une augmentation de la concentration du noyau principal et sa croissance prend naissance. Les dimensions du noyau principal dépendent du temps durant lequel il est resté dans la zone de période d'induction, sur la supposition complètement justifiée que tous les noyaux principaux grandissent au même taux.

Donc, au moment t_{crit} le premier noyau principal formé atteint un diamètre critique $D_{r-n,cr}$ et se transforme en noyau particule (PN), se qui est schématisé sur la fig 4.27.

Après que le 1^{er} noyau principal a atteint le diamètre critique dû à l'apparition d'une surface physique, le processus de l'apparition et de croissance de noyaux particules se développe.

A la fin de la période d'induction, le processus d'apparition et la croissance du noyau principal, destruction du noyau principal et l'apparition d'un nouveau noyau particule, tous prennent place simultanément. La compétition du processus de croissance du noyau principal

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

est due à la différence des valeurs de l'énergie d'activation de croissance. Sur la fig 4.28, on a schématisé l'évolution d'espèces fictives avec le temps. La destruction du noyau principal est accélérée à travers l'apparition rapide de la surface de croissance noyau particule. Les deux processus ne sont pas séparés dans le temps et l'agglomération peut commencer au début de nucléation de suie. Ces étapes de génération et de croissance constituent le processus de formation de suie.

Dans une forme générale, le taux de consommation de HC consiste de la perte des molécules de HC comme résultats de collisions active avec la surface de noyau principal et le noyau particule [87], la fig 4.29 représente l'évolution du nombre de concentration d'hydrocarbure.

En comparant nos résultats obtenus et illustrés sur les figures 4.26, 4.27, 4.28, 4.29 avec les résultats de Kumar et al. [82], illustrés sur la fig 4.34, on peut conclure que les courbes représentant l'évolution de RN, PN, FN, HC sont en très bon accord avec les résultats de kumar et al, mais la seule différence c'est les conditions de simulation.

En générale, le taux des réactions hétérogènes telles que l'oxydation de suie dépend de la diffusion des réactifs aux produits de surface aussi bien que la cinétique de réaction [88]. Le processus d'oxydation de suie dans le cylindre du moteur est contrôlé cinétiquement. C'est difficile de suivre l'oxydation des suies dans les flammes. Le modèle semi empirique de Nagle et al.[71], basé sur le concept que il y a deux emplacements sur la surface de carbone valable pour l'attaque de O₂. Dans cette étude, l'analyse de ce mécanisme (formule semi empirique de NGS) donne un taux de surface masse oxydation (ω en gcm⁻²s⁻¹) selon eq.3.

La fig 4.28, représente l'évolution du taux d'oxydation de suie prédit par le modèle de NGS en fonction du temps. Ce terme ω utilisé pour estimer le taux de suie oxydé dans un moteur diesel quelconque.

La fig 4.29, montre l'évolution du diamètre des particules des suies, ce diamètre augmente successivement avec l'avance de piston.

La quantité de suie nette formée dans le cylindre, est représentée sur la fig 4.32. Pour notre modèle la masse de suie est égale à $2.5 \cdot 10^{-3}$ g.

La comparaison des résultats avec celles de V. Kumar et al, pour les conditions de simulation de kumar, nous permet de conclure que :

- Pour un temps d'injection de -21 atdc et une durée de 12° CA on a obtenu une masse de suie égale à : $5.5 \cdot 10^{-6}$
- Pour un temps d'injection de -5 atdc et une durée de 10°CA , kumar à obtenu une masse de $1.5 \cdot 10^{-6}$

Donc, le retard de combustion (injection près du pmh) joue un rôle important sur la formation de suie.

8. EFFETS DE DIFFÉRENTS PARAMÈTRES SUR LES PERFORMANCE DU MOTEUR ET LES PRODUITS DE COMBUSTION

8.1 Excès d'air " excès d'oxygène"

La quantité d'air introduite dans le cylindre (quantité disponible) peut être supérieure, égale ou inférieure à celle théoriquement nécessaire pour la combustion complète du combustible. Cette variabilité de la quantité d'air disponible est caractérisée par l'excès d'air ou la richesse. L'excès d'air est le rapport entre la quantité d'air disponible et la quantité théoriquement nécessaire pour la combustion. Autrement dit, c'est l'inverse de la richesse r qui est le rapport entre les quantités de carburant et d'air de la combustion réelle et de la combustion stoechiométrique. On rencontre parfois dans la littérature l'inverse de la richesse Φ ; c'est le coefficient d'excès d'air λ :

$$\lambda = \phi^{-1} = \frac{\left(\frac{m_{air}}{m_f}\right)_{réel}}{\left(\frac{m_{air}}{m_f}\right)_{stoechiométrie}} \quad (4.14)$$

Un excès d'air est toujours nécessaire car il permet [62]:

- de mieux brasser l'air et le combustible,
- d'enflammer les gouttelettes non mélangées à l'air au moment de l'injection.

Pour notre simulation, on s'est intéressé à l'excès d'oxygène puisque c'est le composé oxydant d'air.

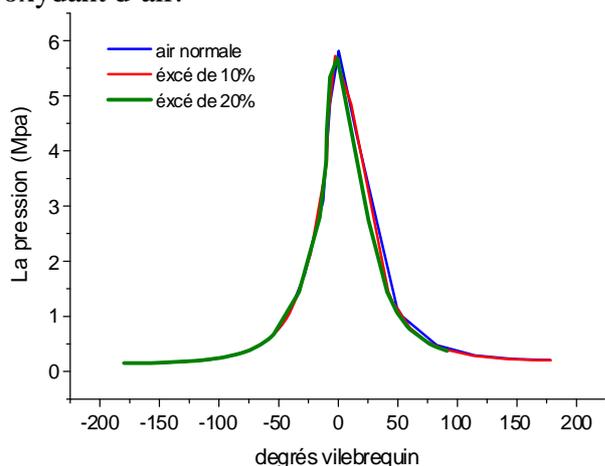


Figure 4.35 : la pression Vs degrés Vilebrequin pour différents Excès d'air

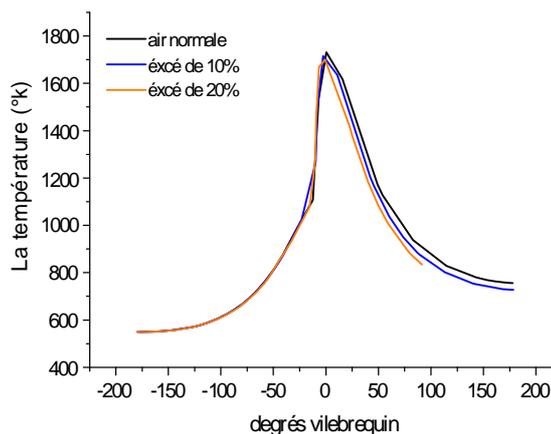


Figure 4.36 : la Température Vs degrés Vilebrequin pour différents Excès d'air

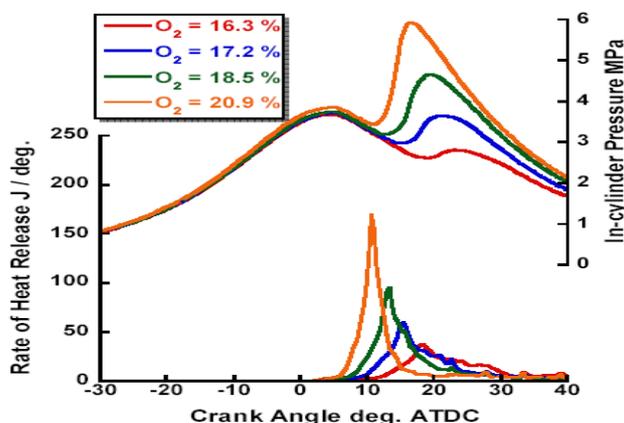


Figure 4.37: évolution des NOx et la chaleur dégagée avec différentes valeurs de pourcentage de O₂ [108]

Pour un moteur Diesel ; la compression de l'air provoque une hausse de température suffisante au déclenchement de la réaction de combustion du gazole lors de sa vaporisation dans la chambre de combustion : la gazole s'enflamme spontanément [105]. La combustion d'un carburant exige l'existence d'une quantité suffisante d'air, pour cela, la présence d'une quantité supplémentaire d'air (Précisément O₂), a un effet important sur le taux de mélange d'air –carburant. Une quantité de plus du mélange oxyde avec O₂, donc la température de combustion augmente et la pression aussi s'élève aussi avec le pourcentage de l'oxygène. Logiquement, on observe dans les figs 4.35, 4.36 que la température et la pression augmentent avec l'excès d'air. Un fort excès d'air peut en particulier diminuer la température de combustion et [106].

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

D'après la référence [108], on tire des résultats de la figure 4.37 que la pression dans le cylindre croît avec l'augmentation d'excès d'air. C'est le même résultat obtenu par notre simulation.

Un autre paramètre qui influe directement sur le taux de formation de NOx est le pourcentage de O₂ dans le mélange. La composition d'air est un facteur très important pour le système de combustion et la plupart des systèmes sont conçus pour leur capacité d'utilisation de l'air. L'existence d'un excès d'air dans le cylindre du moteur, donne l'excès de O₂ qui provoque une augmentation de la quantité produite de NOx. C'est qu'on peut remarquer dans la fig 4.38.

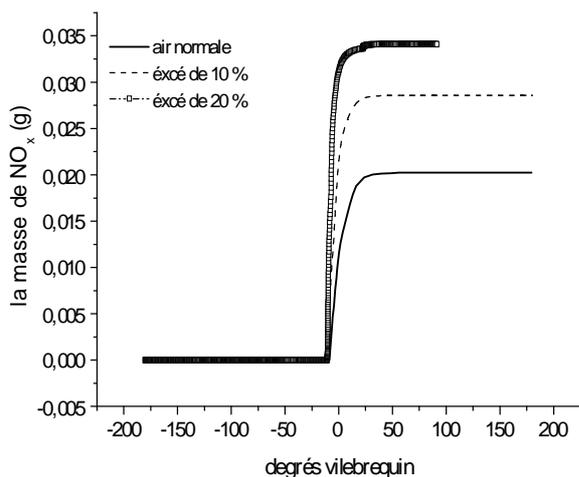


Figure 4.38 : la masse de NO_x Vs degrés Vilebrequin pour différents

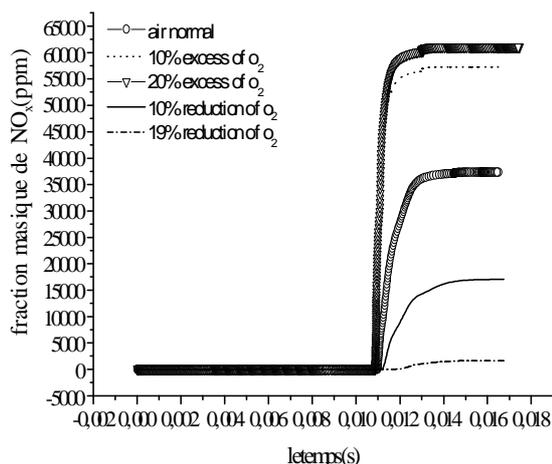


Figure 4.39 : NO_x Vs le temps pour différents pourcentage de O₂

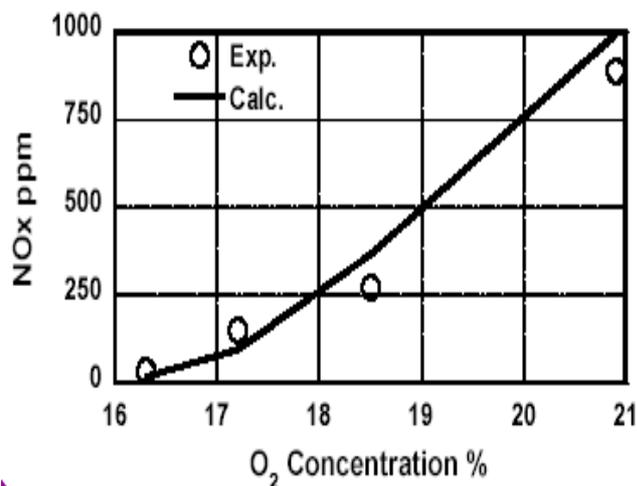


Figure 4.40 : évolution de NO_x pour différentes concentrations de O₂ % [108].

La réduction de la température de la flamme due à l'insuffisance de O₂ ou bien réduction de O₂ dans la composition de l'air admis dans le cylindre, est très importante pour les performances de notre modèle. Cette importance apparaît dans la formation de NOx avec le mécanisme thermique de Zeldovich (fig 4.39). Ce qui est vérifié dans la littérature. On peut donc conclure que la diminution de pourcentage de O₂ résulte en une quantité minimale de NOx dans les gaz éjectés.

La concentration de O₂ dans la quantité admise d'air influe directement sur la concentration des NOx, provoque essentiellement une augmentation du taux de NOx formé. C'est ce que

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

montre les figures 4.38 et 4.39. Par comparaison avec les résultats schématisés sur la fig 4.40 ; on observe une concordance entre les graphes. La concentration de NOx augmente linéairement avec l'augmentation de la concentration de O₂ (c'est-à-dire la présence d'excès d'air).

La composition de l'air responsable de l'oxydation du carburant, joue un rôle important dans l'amélioration des performances du moteur. L'énergie cinétique turbulente produite aussi est influencée directement par le pourcentage de O₂ dans le mélange. Ce qui est donné par la fig 4.41.

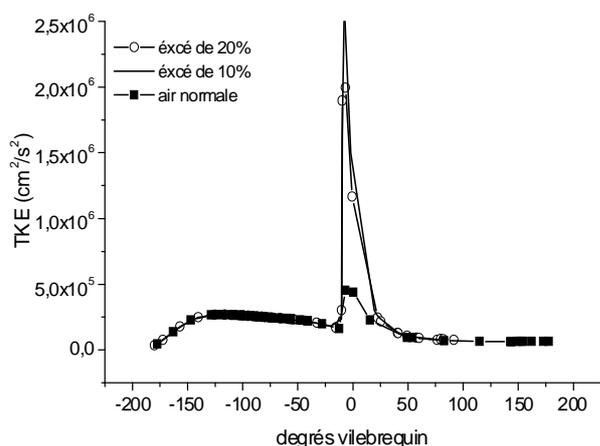


Figure 4.41 : TKE Vs degrés vilebrequin
Pour différents excès d'air

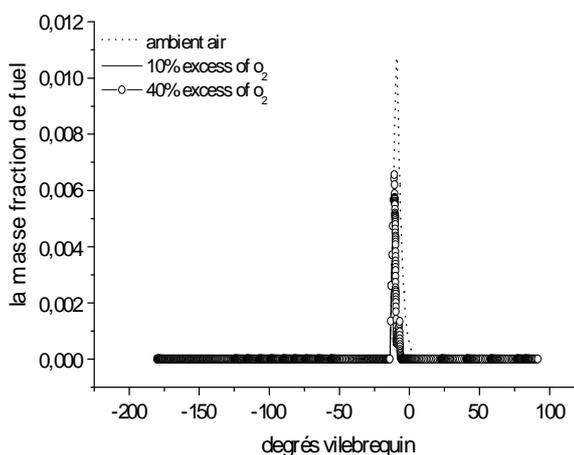


Figure 4.42 : la fraction massique de fuel
Vs degrés vilebrequin pour différents
Excès d'air

Pour interpréter les résultats précédents, on a tracé la courbe d'évolution de la fraction massique du combustible (n-heptane) en fonction des degrés vilebrequin en présence de O₂ pour des pourcentages différents. La fraction massique de C₇H₁₆ est la masse de ce dernier divisée par la masse totale de toutes les espèces dans le mélange. Donc, la présence d'un excès d'oxygène provoque une augmentation de la quantité du fuel à oxyder donc amélioration du taux de réaction. La masse totale du mélange augmente et la fraction massique du mélange diminue successivement avec l'augmentation du pourcentage de O₂. La fig 4.42 nous permet de tirer ces conclusions.

8.2 Effets de la géométrie du piston

Les formes étudiées pour la comparaison sont présentées dans les figures suivantes :

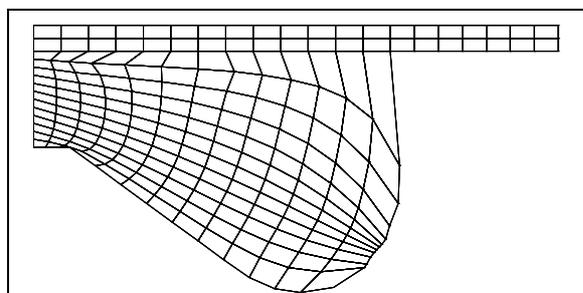


Figure 4.43: géométrie 1 au PMH

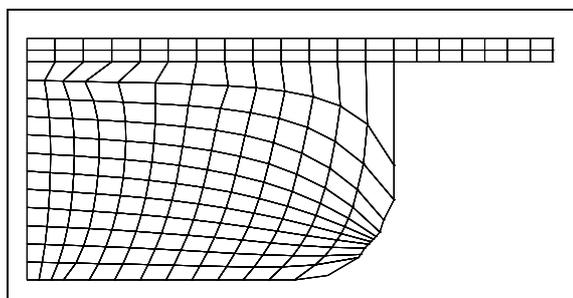


Figure 4.44: géométrie 2 au PMH

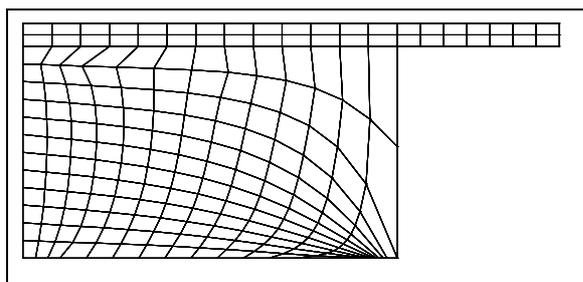


Figure 4.45: géométrie 3 au PMH

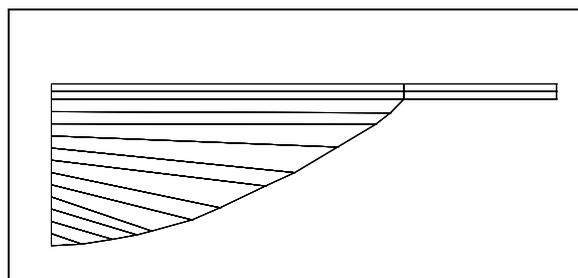


Figure 4.46 : géométrie 4 au PMH

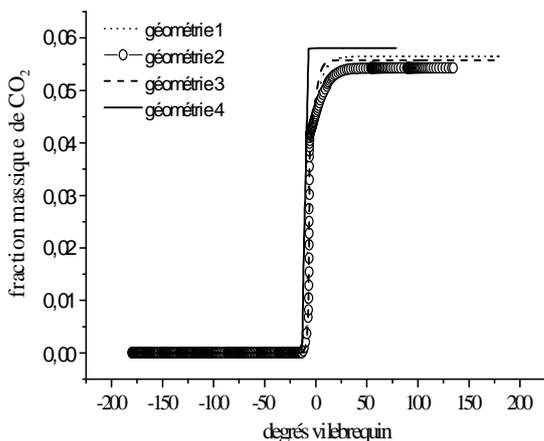


Figure 4.47: fraction massique de CO_2
Pour différents formes de piston

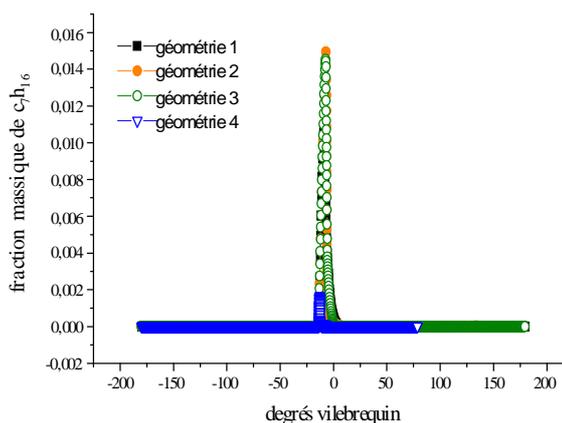


Figure 4.48: fraction massique de C_7H_{16}
Pour différents formes de piston

L'évolution de n-heptane dans le cylindre est schématisée sur la fig 4.48, le pic maximal de la fraction massique est obtenu par la 2^{ème} géométrie et le pic minimal est obtenu avec l'utilisation de la 4^{ème} géométrie.

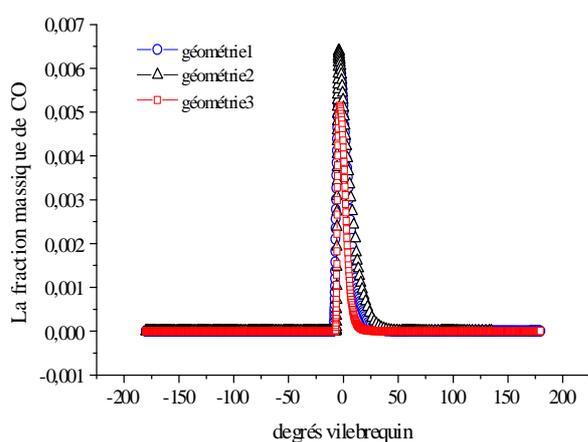


Figure 4.49: fraction massique de CO
Pour différentes formes de piston

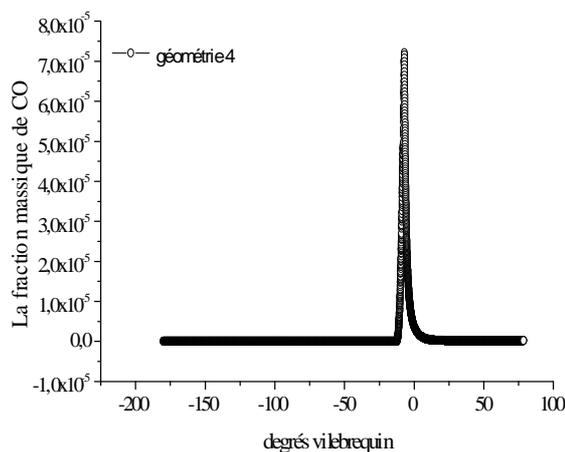


Figure 4.50: fraction massique de CO
Pour la 4^{ème} forme de piston

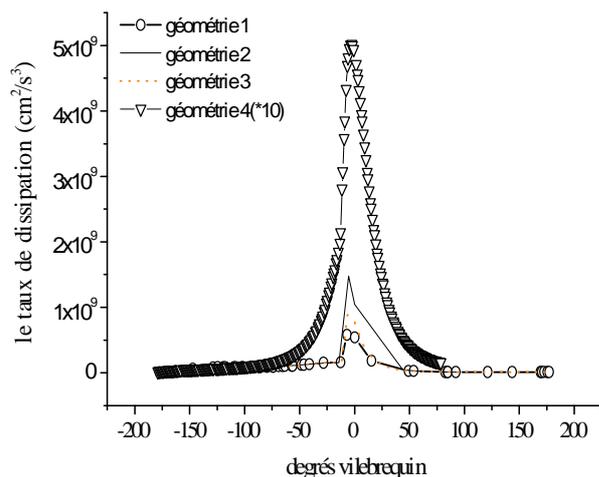


Figure 4.51: le taux de dissipation pour différentes formes de piston

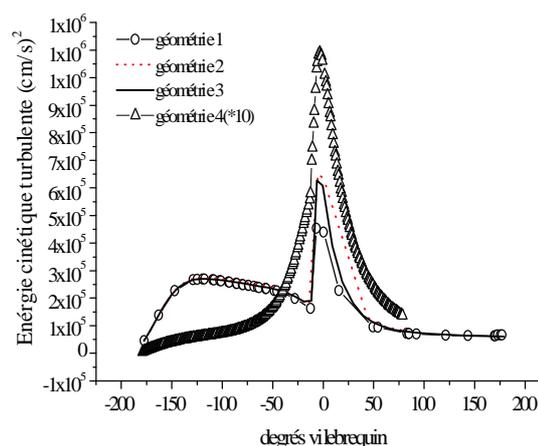


Figure 4.52: L'énergie cinétique turbulente pour différentes formes de piston

L'effet d'un autre paramètre sur la formation de CO_2 est la géométrie de la chambre de combustion, la fig 4.47, montre l'évolution de la fraction massique de CO_2 en fonction des degrés vilebrequin. La quantité minimale du CO_2 est obtenue si on utilise la 2^{ème} géométrie, et la quantité maximale est obtenue avec la 4^{ème} géométrie (sphérique). Le taux de CO formé a une évolution inverse avec CO_2 , la courbe schématisée sur la fig 4.49, montre que la 2^{ème} géométrie donne une quantité max de CO (donne une valeur min de CO_2) et la 4^{ème} géométrie donne une quantité min de CO (donne une valeur max de CO_2), ce qui peut être vu sur la fig 4.50.

Pour ce modèle du moteur diesel et pour ces conditions de simulation (le modèle $k-\epsilon$ pour la turbulence est utilisé), l'énergie cinétique turbulente (TKE), augmente durant la phase de compression et prend une valeur maximale près du Pmh. Selon la fig 4.52, la géométrie sphérique donne une valeur maximale de TKE. L'évolution du taux de dissipation (ϵ), est identique à celui de tke. La géométrie sphérique nous donne la valeur maximale de ϵ , ce qui est illustré par la fig 4.51.

8.3 Effets de la richesse

La richesse locale du mélange fuel-air est utilisée pour définir l'état du mélange, Son expression (Eq 4.15) est la suivante [89]:

$$\phi = \frac{m_f}{m_a \cdot FAS} \quad (4.15)$$

Où,

Φ : la richesse

m_f : la masse du fuel brûlé dans le mélange

m_a : la masse d'air originalement dans le mélange

FAS : le rapport stoechiométrique fuel-air

Si Φ égale 0, il n'y a pas de fuel brûlé dans le mélange. Si Φ égale à 1, le mélange se compose des produits de combustion d'un mélange stoechiométrique combustible-air. C'est possible d'avoir Φ supérieur à 1, pour lequel le mélange se compose de produits de combustion d'un mélange plus riche qu'un mélange stoechiométrique combustible-air

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

Pour les buts de modélisation des moteurs diesel, l'énergie interne de gaz dans les volumes de contrôle peut être considérée comme une fonction de température et la richesse, et que la constante des gaz peut être considérée seulement comme une fonction de la richesse.

Dans les moteurs Diesel, la qualité de la combustion dépendra de la pulvérisation du carburant et de l'homogénéité du mélange. Les moteurs devront être équipés de systèmes d'injection capables de réaliser le mélange air carburant ensemble et sous des pressions élevées. le moteur diesel fonctionne en effet par auto-allumage : l'allumage du mélange se fait spontanément en raison de la température élevée de l'air et des rapports volumétriques très élevés (de 16:1 à 22:1)

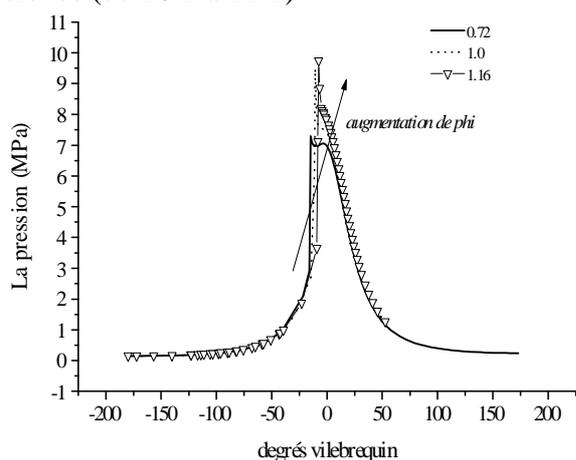


Figure 4.53 : La pression vs degrés vilebrequin pour $\phi < 0.5$

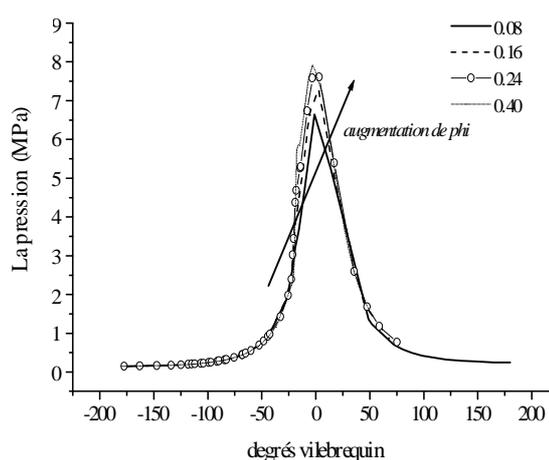


Figure 4.54 : La pression vs degrés vilebrequin pour $\phi > 0.5$

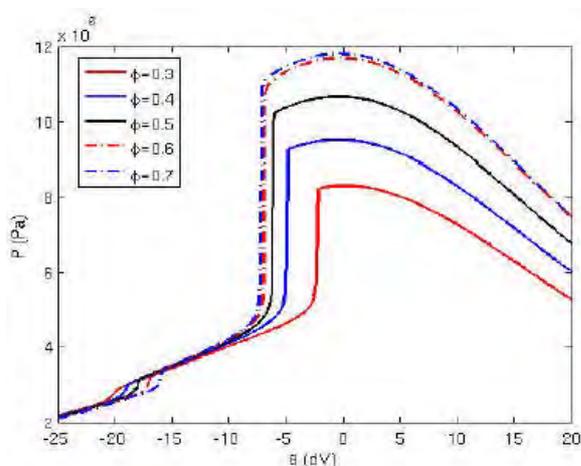


Figure 4.55: évolution de pression pour Différents phi selon [109].

Les Figs 4.53, 4.54 présentent les résultats numériques des courbes de pression pour 7 cas d'analyse ($0.08 < \Phi < 1.16$). Cette figure nous permet d'estimer la pression pour différentes richesses (phi) : La valeur maximale de la pression augmente avec l'augmentation de phi. Ce qui peut être observé aussi grâce à la courbe tirée de la littérature et présentée dans la fig 4.55.

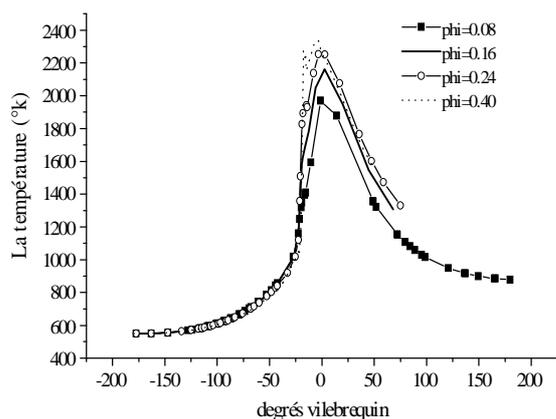


Figure 4.56 : La température vs degrés vilebrequin pour $\phi < 0.5$

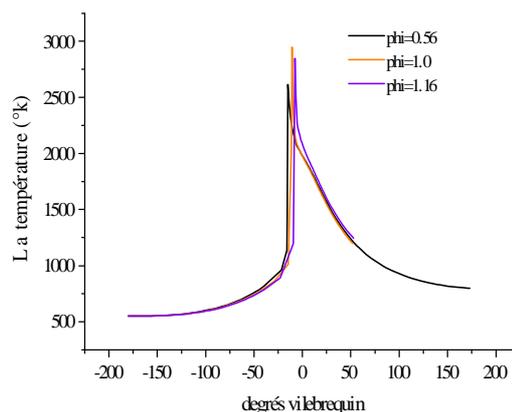


Figure 4.57 : La température vs degrés vilebrequin pour $\phi > 0.5$

Les Figs 4.56, 4.57 présentent la température maximale en fonction des degrés vilebrequin pour différentes valeurs de ϕ . La température maximale pour $\phi < 1$ dépasse 2600°K , mais pour $\phi = 1$ cette température augmente jusqu'à 3000°K , pour un mélange riche $\phi > 1$, la valeur de T_{max} diminue avec l'augmentation de ϕ .

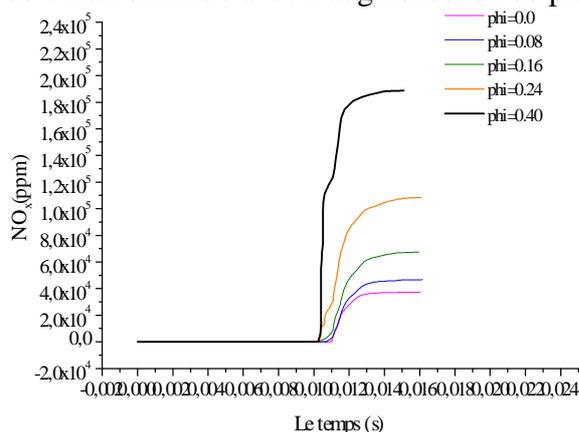


Figure 4.58 : NO_x vs degrés vilebrequin pour $\phi < 0.5$

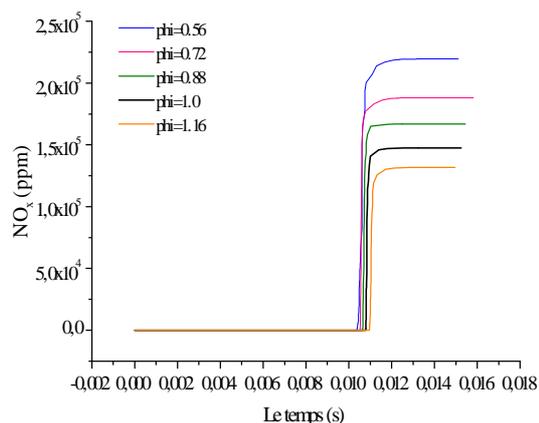


Figure 4.59 : NO_x degrés vilebrequin pour $\phi > 0.5$

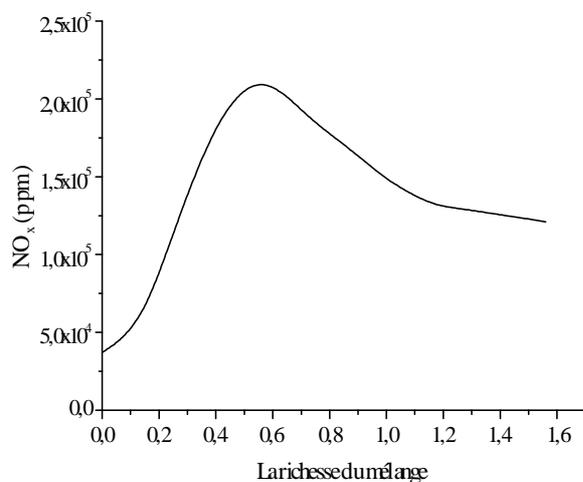


Figure 4.60 : NO_x en fonction de richesse

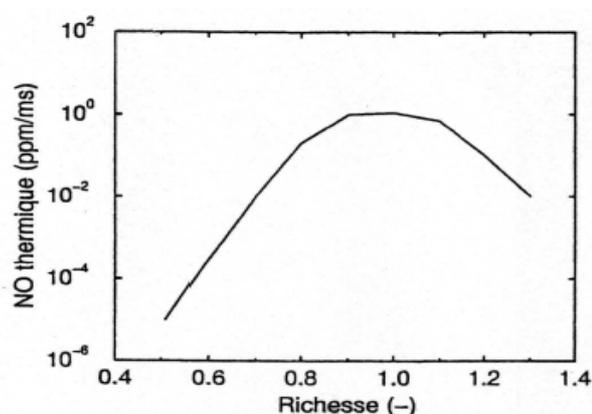


Figure 4.61 : Evolution de la production de NO -thermique pour plusieurs richesses [Correa, 1992]

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

Les Figs 4.58, 4.59 présentent la courbe de formation de NO_x (en ppm) en fonction du temps pour différents cas d'analyse et de comparaison des valeurs de Phi. On tire que la concentration des NO_x augmente linéairement avec phi, puis et après quelle atteinte une valeur maximale, diminue avec l'augmentation de phi.

NO se forme essentiellement dans la zone des gaz brûlés, en aval du front de flamme. La formation de NO dépend principalement de la température locale de la flamme (environ 2000°K) (paramètres agissant : charge du moteur, dilution, avance à l'injection ...) et de la concentration en oxygène, atomique et moléculaire. La formation de NO passe par un maximum en mélange légèrement pauvre ($\Phi = 0,9-0,95$).

Les résultats des calculs concernant les NO_x sont montrés dans la figure fig 4.60. Laquelle montre l'évolution de NO_x en fonction de la richesse, cette courbe présente un pic d'émissions de NO_x à une richesse de 0.56 obtenue par le code kiva-3v. Ceux-ci peuvent être comparés avec les résultats obtenus par la référence [90] et qui sont présentés sur la fig 4.61.

Le graphe présenté par la fig 4.61, nous permet de conclure que nos résultats sont valables et en bonne concordance avec la littérature.

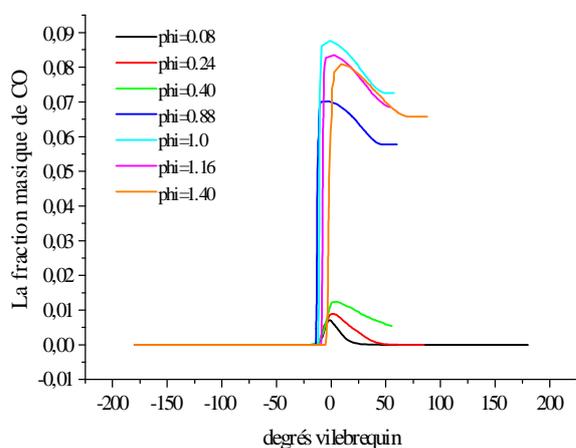


Figure 4.62 : Fraction massique de co vs degrés vilebrequin pour différents ϕ

Concernant la formation du monoxyde de carbone avec la variation de la richesse du mélange, on peut constater d'après la fig 4.62 que le taux de CO augmente avec les valeurs de phi jusqu'à une quantité maximale où $\Phi = 1$, puis diminue pour le mélange riche ($\Phi = 1.16$, $\Phi = 1.40$).

9. LES CAS VALIDES PAR LE CODE KIVA-3V

Dans cette section on a validé avec les résultats obtenus par des chercheurs et publiés soit dans les revues ou dans les actes des séminaires et des conférences. Le but de cette validation est de bien savoir l'efficacité d'utilisation du code, la comparaison avec les résultats expérimentaux est notre intérêt principal.

1^{er} CAS [91]:

“Multi-Dimensional Modeling of Ignition, Combustion and Nitric Oxide Formation in Direct Injection Natural Gas Engines”. Par: *Apoorva Agarwal and Dennis Assanis*; W. E. Lay Automotive Laboratory, the University of Michigan. June 2000

L'objectif de cette étude est d'estimer la chaleur apparue et le processus de formation des polluants dans un moteur à gaz naturel à injection directe. Le code utilisé dans cette étude est le code kiva-3v. Le moteur choisi pour la simulation est un moteur diesel typique de poids lourd de dimensions moyennes pour les autobus urbains. Les paramètres essentiels du moteur utilisé sont représentés dans le tableau 4.5.

Spécifications géométriques	
diamètre	12.45 cm
Course	15.5 cm
squish	0.37 cm
La bielle	31.0 cm
Forme de piston	Mexicaine-hat
Le taux de compression	160.01 :1
Les données d'injection	
La température du combustible	400°k
Le temps d'injection	25° ATDC
La durée d'injection	20°CA
Angle d'injection	45°
Les conditions de simulation	
La vitesse de rotations	1500 RPM
La richesse	0.6
La pression initiale	3 bar
La température initiale	645°k
EGR	10 %
swirl	1.0
Modèle de turbulence	RNG

Tableau 4.5 : Paramètres du moteur

Après la simulation numérique de cycle thermodynamique du moteur diesel à gaz naturel à injection directe utilisant le code de calcul kiva-3v, et avec la comparaison entre nos résultats et les résultats obtenus par A.Agarwal et al [91], les graphes (figs 4.63, 4.64) présentent l'évolution de pression en fonction des degrés vilebrequin sont identiques (un pic de 19.25 Mpa) pour un temps d'injection de 25 atdc et une durée de 20°CA, avec une richesse de 0.6.

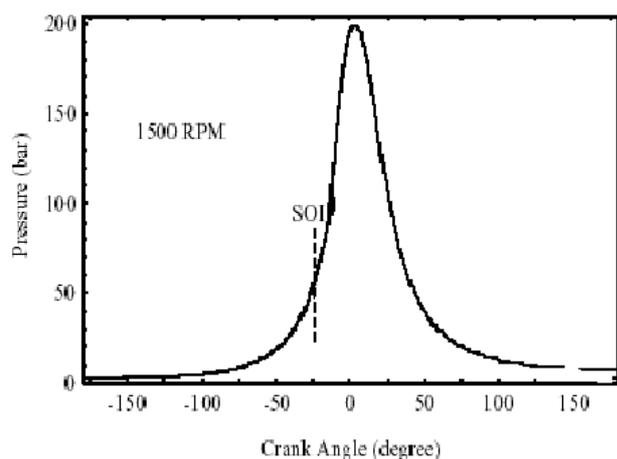


Figure 4.63: variation de pression selon A.Agarwal et al [91]

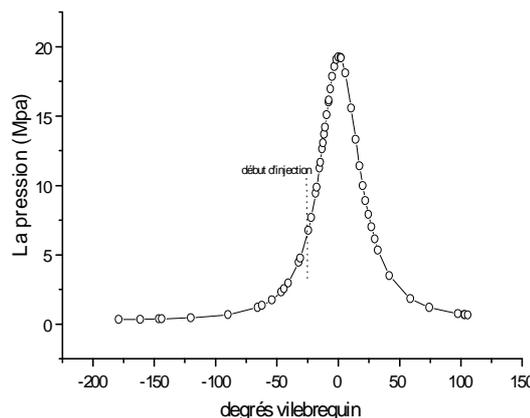


Figure 4.64: variation de pression en fonction des degrés vilebrequin

Pour les courbes des températures (figs 4.65, 4.66), on a aussi obtenu la même allure et les deux graphes présentent un pic de 1452°k

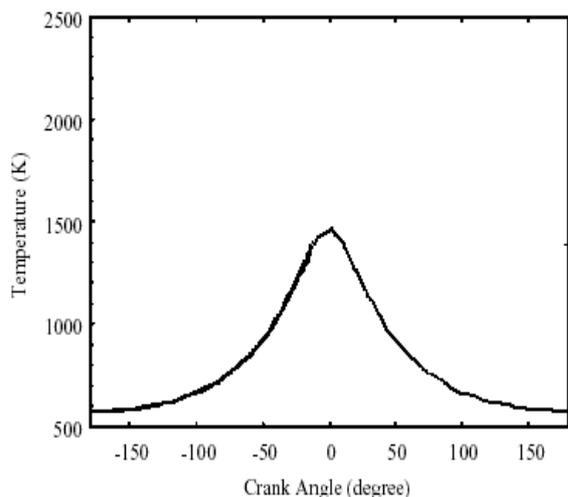


Figure 4.65: variation de température selon A.Agarwal et al [91]

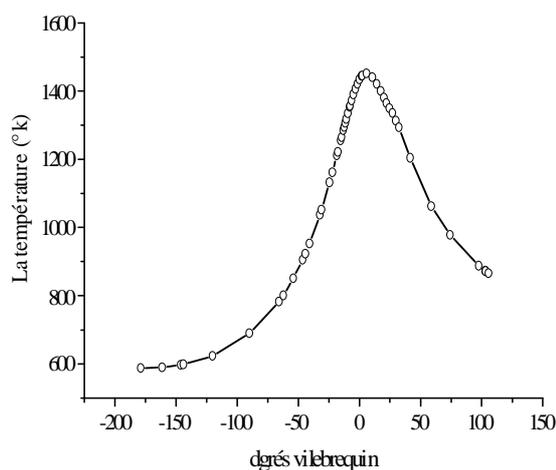


Figure 4.66: variation de température en fonction des degrés vilebrequin

2^{ème} CAS [92]:

"Computational Fluid Dynamics Modeling of Diesel Engine Combustion and Emissions". Par: *Rolf D. Reitz*; Engine Research Center, University of Wisconsin-Madison.2005

Dans ce cas, on a étudié par simulation numérique le processus de combustion et la formation des polluants (spécialement les NOx) pour un moteur Caterpillar 3401, à un seul cylindre et à injection directe.

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

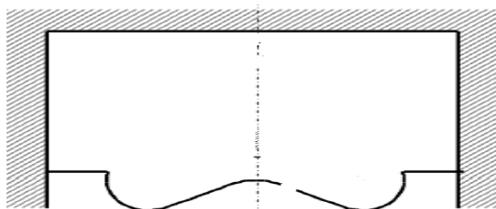


Figure 4.67 : géométrie du piston (Patel et al. 2004)

moteur	Caterpillar 3401
Diamètre x course	137.2 x 165.1 mm
Le taux de compression	16.1 :1
Forme de piston	Mexicaine-hat

Tableau 4. 6 : Caractéristiques du moteur Caterpillar 3401

combustible	D2
Système d'injection	Common-rail
Mode d'injection	profil
Température du combustible	436°k
La pression initiale	138 Mpa
Trou d'injecteur	50, <u>100</u> , 180 μ m
Concentration de O ₂	21%

Tableau 4.7 : Spécifications expérimentale du système d'injection

Les cas	T élevée Injection directe courte combustion Par diffusion	T élevée Injection directe Longue Combustion par prémélange	T bas, Injection tôt (prémélange pauvre)	T bas, Injection retardée.	T bas Double- Injection
La vitesse (RPM)	1200	1200	1200	1200	1200
La température initiale (°k)	111	47	90	70	90
La pression initiale (kpa)	233	192	214	202	214
Le début d'injection (°ATDC)	-7	-5	-22	0	-22, +15
La masse injectée (mg)	61	61	56	56	31,33
La durée d'injection (CAD)	10	10	7	7	4.4
Concentration de O ₂ (%)	21	21	12.6	12.6	12.6

Tableau 4.8 : les différents cas de simulation (Kimura.2001)

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

La géométrie de piston est donnée d'après Patel et al. 2004, schématisée sur la fig 4.67.

Les caractéristiques du moteur Caterpillar 3401, et les spécifications expérimentales du système d'injection, sont illustrées sur les Tableaux 4.6, 4.7.

Le tableau 4.8, représente les différents cas étudiés pour comparer la concentration des NOx formés.

Les résultats obtenus sont représentés graphiquement sur les figures suivantes:

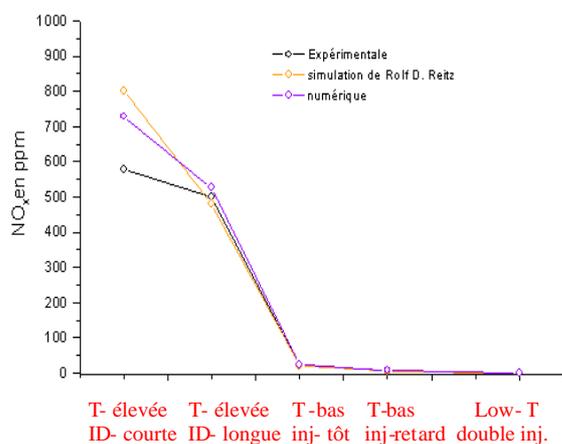


Figure 4.68 : la concentration des NOx pour Différents cas de simulation

Les calculs des NOx formées dans le cylindre du moteur diesel pour les différents cas de simulation (tab 4.8), sont présentés sur la fig 4.68. Cette figure montre aussi la comparaison entre nos résultats et les calculs de *Rolf D. Reitz* [92], On constate que l'accord entre les deux est très bon. Le graphique 4.68, montre aussi les résultats de mesures expérimentales [92], on constate aussi que l'accord mesure / calcul est bon

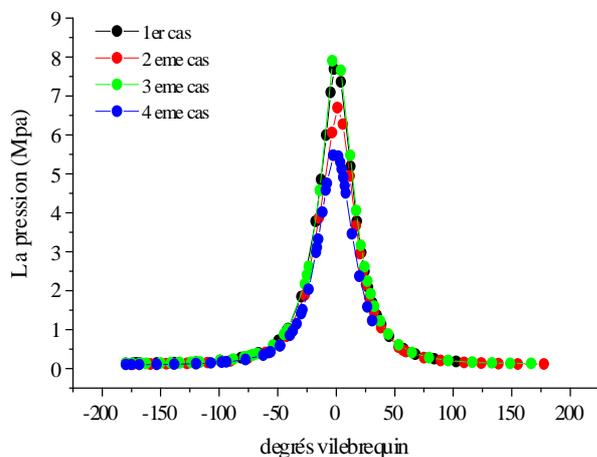


Figure 4.69: évolution de pression en Fonction des degrés vilebrequin pour Différents cas de simulation

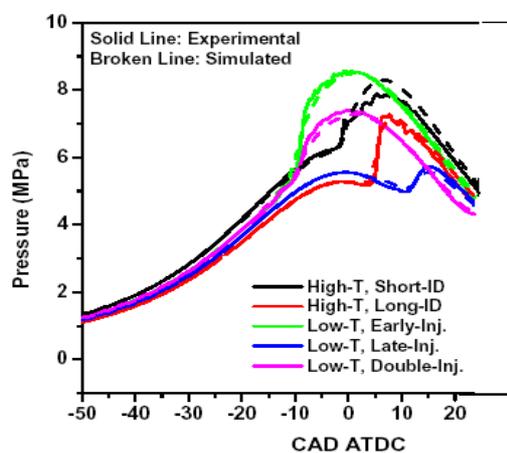


Figure 4.70: évolution de pression en Fonction des degrés vilebrequin pour Différents cas de simulation d'après [92]

Les courbes représentées sur la Fig 4.70, sont données d'après Kimura, 2001. la courbe de pression expérimentale servira comme moyen de calage du code. En fait, on se satisfait de la courbe de pression car la fluctuation des cycles dans un moteur Diesel est négligeable et nous n'aurons pas recours à la courbe de taux de production de chaleur.

La comparaison entre les deux courbes, figs 4.69, 4.70 ((expérimentale-simulation) d'après [92] et notre simulation), nous permet de constater, qu'il y a une excellente concordance entre

Chapitre 4. Résultats de simulation numérique sur un moteur diesel

l'expérimental et les résultats de la simulation. À partir du PMB, l'accord est presque parfait, indiquant l'aptitude de KIVA pour faire des simulations de la combustion dans les moteurs diesel avec une grande exactitude. Des petits écarts sont aperçus, particulièrement près du PMH et après l'injection. Ceci est peut être dû à de légers défauts dans les valeurs des constantes du taux de réaction (de forme Arrhenius) qui doivent être ajustées pour chaque configuration pour rattraper les données expérimentales. Cependant, dans les simulations montrées ici, tous les paramètres étaient maintenus constants.

3^{ème} CAS "comparaison entre les codes kiva-3v et kiva3v-lite:

Le code de calcul numérique **kiva3v_lite Suite** [94,95] est un code pour le calcul numérique des moteurs à combustion interne. Dans un effort pour diminuer le temps d'évaluation et l'analyse du modèle du moteur, une version du code kiva-3v plus simple a été développée au engine research center.

Le terme lite est utilisé pour impliquer la facilité d'utilisation, une période du temps plus rapide et moins d'exactitude comparé avec la version standard de kiva-3v [95]. Les étapes du concept d'évaluation sont traités par la version lite, où, la forme utilisée est d'un piston plat. Cette version aussi inclut un générateur du maillage "k3prep_lite", un programme principale pour la solution des équations "kiva3v_lite", et un post processeur "k3post_lite".

3.1 Validation du code kiva3v-lite [93]

"Study of Fuel Assisted Injection in a Direct Injection Diesel Engine by Kiva3V_lite".

Par Chalothorn THUMTHAE et al. Kasembundit University, Bangkok.2003.

Pour valider les résultats obtenus par une étude d'injection du combustible dans un moteur diesel à injection directe utilisant le code kiva3v_lite ; on a utilisé les caractéristiques du moteur diesel présenté par le Tableau 4.9. Les résultats obtenus sont schématisés sur les figures ci-dessous.

diamètre	132.7 mm
course	165.1 mm
taux de compression	16.1 :1
cylindré	2.44 L
La bielle	26.6 cm
Le diamètre du trou de l'injecteur	0.259 mm -6 trous
La vitesse du moteur	1600 RPM
swirl	0.978
Le temps et la durée d'injection	-9 (ATDC) / 21-27 CA
combustible	C ₁₄ H ₃₀
La masse injecté	0.1621 g
La pression initiale	1.97 bar
IVC/EVO	-147/135 (ATDC)

Tableau 4.9 : paramètres du moteur diesel [93]

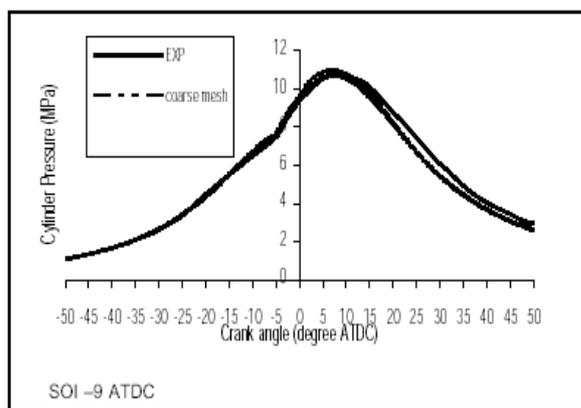


Figure 4.71 : évolution de pression d'après [93] à soi = - 9 ATDC

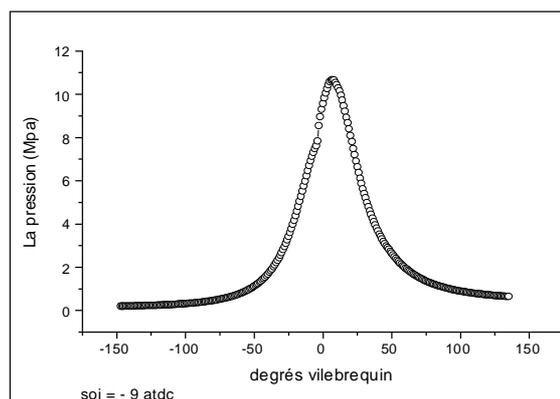


Figure 4.72 : évolution de pression vs degrés vilebrequin à soi = - 9 ATDC

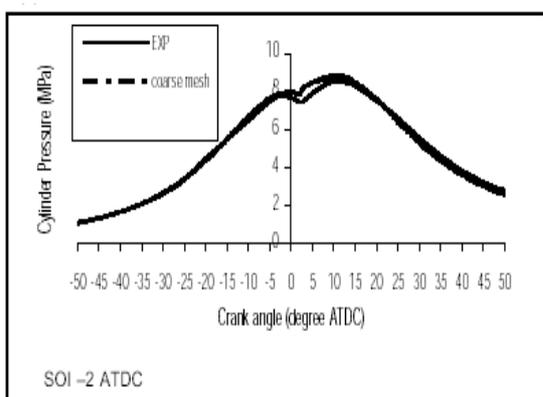


Figure 4.73 : évolution de pression D'après [93] à soi = - 2 ATDC

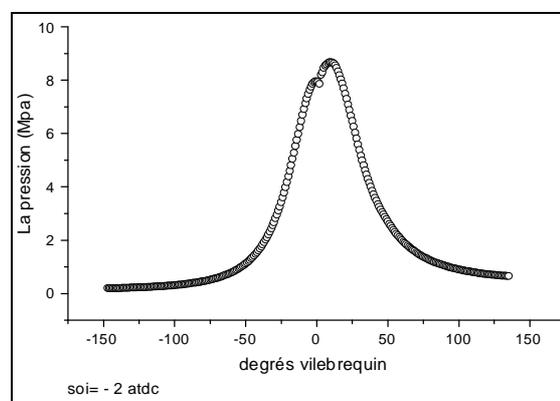


Figure 4.74 : évolution de pression vs degrés vilebrequin à soi = - 2 ATDC

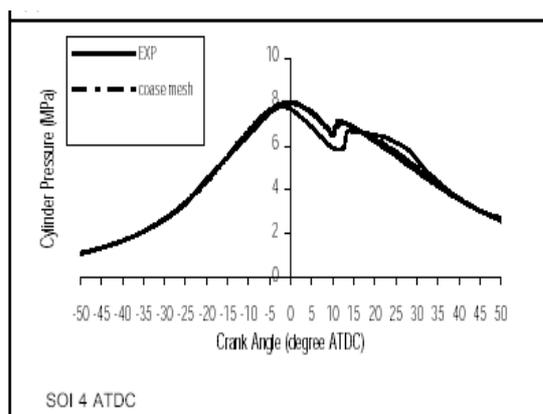


Figure 4.75 : évolution de pression D'après [93] à soi = + 4 BTDC

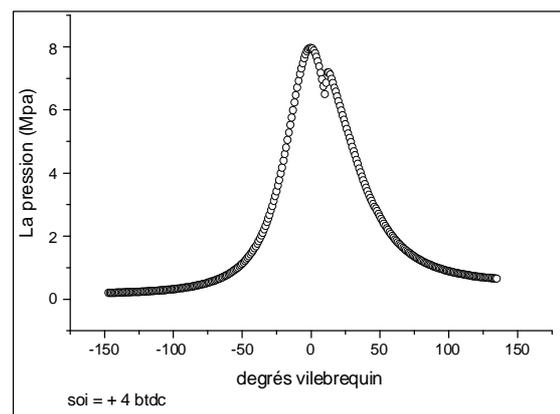


Figure 4.76 : évolution de pression vs degrés vilebrequin à soi = + 4 BTDC

Pour différents temps d'injection (-9 atdc, -2 atdc, +4 btcdc), les courbes de pressions obtenues par Chalothorn THUMTHAE et al., 2003. Sont schématisées sur les figs. 71, 73, 75 respectivement. Nos résultats sont illustrés par les figs 4.72, 4.74, 4.76. Donc, on peut conclure qu'il y'a une concordance entre nos graphes et les courbes de Chalothorn THUMTHAE et al., 2003.

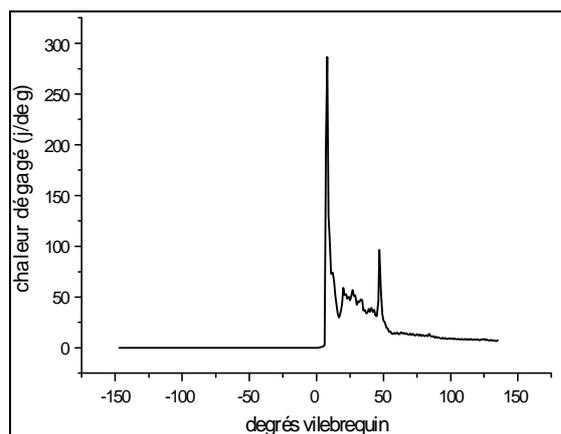


Figure 4.77 : évolution de la chaleur dégagée vs degrés vilebrequin

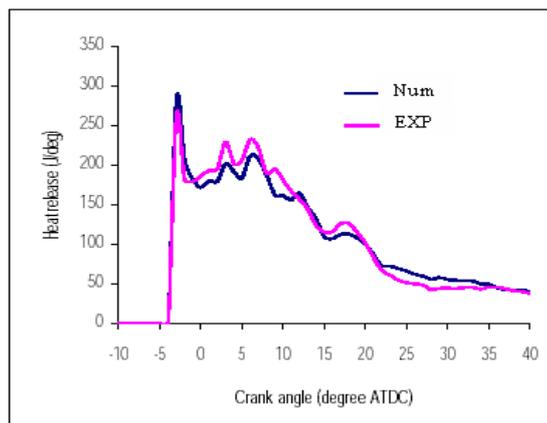


Figure 4.78 : évolution de la chaleur dégagée d'après [93]

Pour confirmer la comparaison, on a tracé la courbe d'évolution de chaleur dégagée (fig 4.77), et on l'a comparé avec les courbes de simulation de Chalothorn THUMTHAE et al., 2003 (fig 4.78) et les courbes expérimentales [93]. Une fois encore, On a obtenu une concordance entre ces résultats.

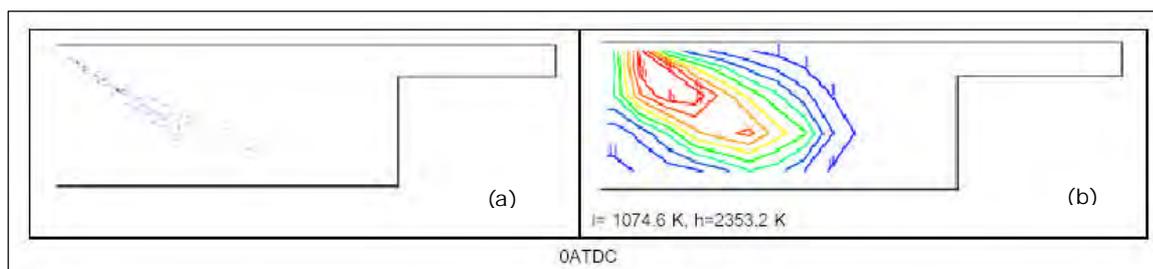


Figure 4.79 : distribution du spray (a) et des champs de température dans la chambre de combustion à 0 ATDC (au pmh) d'après [93]

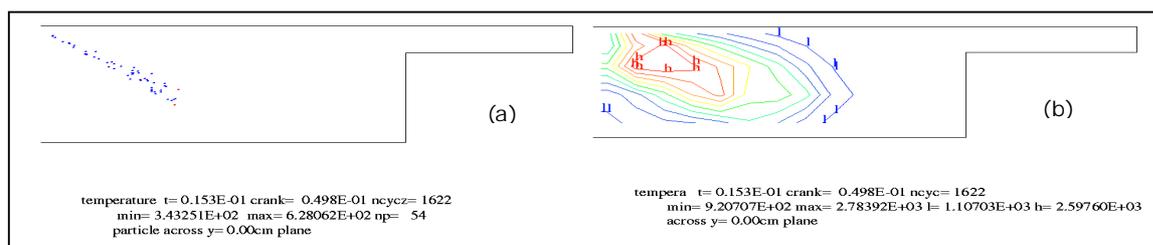


Figure 4.80 : distribution du spray (a) et des champs de température dans la chambre de combustion à 0,49 BTDC

La distribution du spray et du champ des températures de Chalothorn THUMTHAE et al., 2003 à 0 ATDC, et notre simulation à 0,49 BTDC sont schématisés sur les figs 4.79, 4.80 respectivement. Les résultats sont presque confondus.

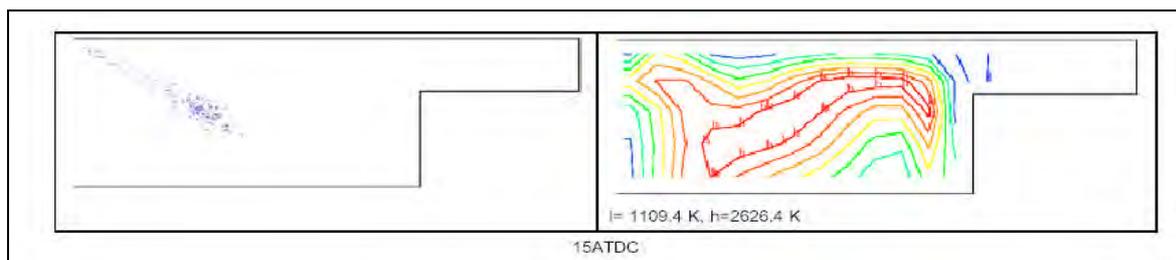


Figure 4.81 : distribution du spray (a) et du champ de température dans la chambre de combustion à -15 ATDC d'après [93]

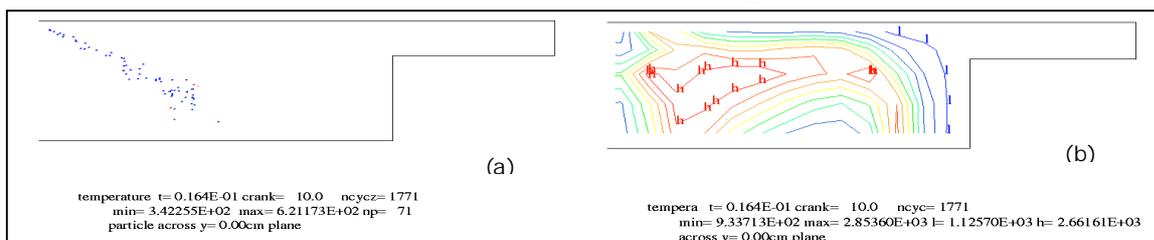


Figure 4.82 : distribution du spray (a) et du champ de température dans la chambre de combustion à 10.0 BTDC

La distribution du spray et du champ des températures de Chalothorn THUMTHAE et al., 2003 à +15 BTDC, et notre simulation à +10 BTDC sont schématisés sur les figs 4.81, 4.82 respectivement. Les résultats sont presque confondus.

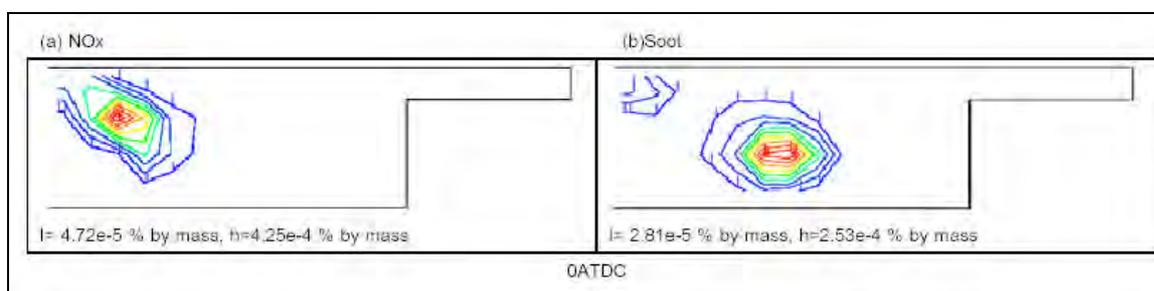


Figure 4.83 : contours des NOx et de suie dans la chambre de combustion à 0 ATDC (au pmh) d'après [93]

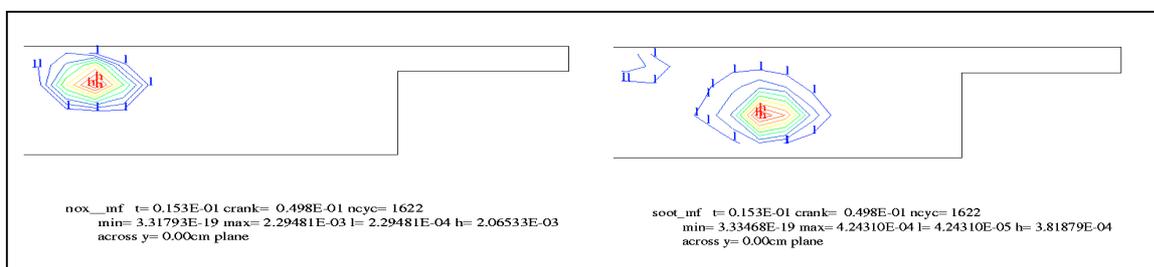


Figure 4.84 : contours des NOx et de suie dans la chambre de combustion à +0,49 BTDC

Les figs 4.83, 4.84 représentent les contours des NOx et de suie dans la chambre de combustion d'après [93] et notre simulation respectivement. On peut observer qu'il y a une concordance entre les résultats.

3.2 comparaison avec kiva-3v

Pour la comparaison entre les deux codes kiva-3v et kiva_lite, on a étudié la formation de NOx dans un moteur diesel [79]. Les paramètres de simulation numérique sont les mêmes que ceux utilisés dans notre simulation (sec. 2). Mais la seule différence est :

- Pour le code kiva_3v la température des réactions cinétiques est 700°k, et pour les réactions d'équilibre est 1300°k.
- Pour le code kiva3v_lite la température des réactions cinétiques est 300°k, et pour les réactions d'équilibre est 5000°k.

Les résultats obtenus sont comme suit :

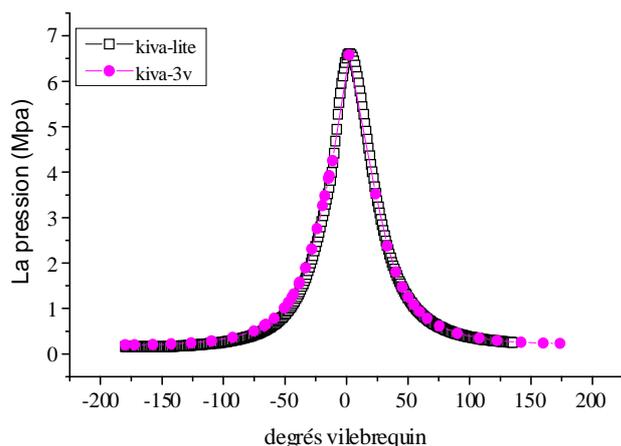


Figure 4.85 : la pression en fonction des degrés vilebrequin pour les deux codes

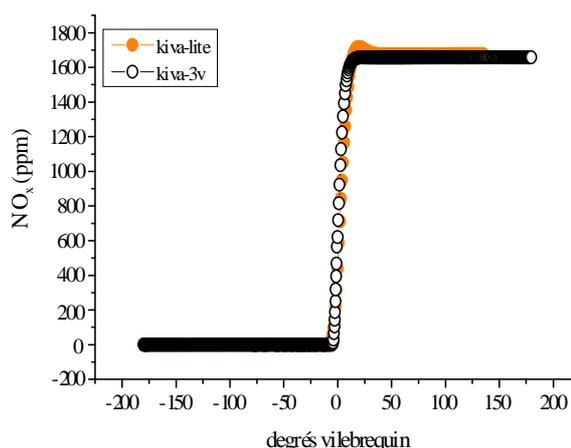


Figure 4.86 : NOx en fonction des degrés vilebrequin pour les deux codes

Les figs 4.85, 4.86 nous permettent de constater, qu'il y a une excellente concordance entre les résultats de la simulation entre les deux codes soit pour la courbe de pression ou bien pour la formation des NOx.

Chapitre 5

Autres modèles de suie et technologie de réduction des NOx

5.1 MODÈLES DE FORMATION ET D'OXYDATION DES SUIES DIESEL

Malgré ses bonnes performances environnementales du fait en particulier de son faible consommation, le diesel demeure critiqué pour ses rejets de particules et de fumées noires. Depuis les années 1980, les émissions de particules automobiles ont été divisées par 4. Avec le Filtre A Particules (FAP), les émissions de particules sont réduites à la limite du mesurable. Les particules sont constituées de micro sphérules de carbone, d'un diamètre voisin de 0,05 micron, sur lesquelles se sont adsorbés et condensés des hydrocarbures provenant du carburant et du lubrifiant ; de l'eau et des sulfates sont également présents en surface.

Dans un moteur diesel, la combustion du gazole se fait par auto-inflammation dans un milieu hétérogène d'air et de carburant. La qualité de la combustion dépend de la façon dont s'effectue le mélange air + carburant. Dans son principe, le moteur diesel utilise toujours la même quantité d'air ; la puissance est ajustée par la quantité de carburant injectée. Dans certaines conditions de fonctionnement du moteur (notamment lors d'une accélération), des zones de la chambre de combustion peuvent se trouver localement trop riches en carburant. La combustion se fait alors incomplètement par manque d'oxygène et entraîne la formation de particules.

5.1.1 Le modèle de Hiroyasu pour la formation et l'oxydation de suie

5.1.1.1 Formulations

La détermination des taux de formation des suies a été l'objet de plusieurs travaux de modélisations. La concentration des suies à l'échappement est gouvernée par la quantité des suies formées et celles oxydées, selon la formule suivante [96,97] :

$$\frac{dm_{suie}}{dt} = \frac{dm_{suie}}{dt} \Big|_{form} - \frac{dm_{suie}}{dt} \Big|_{oxyd} \quad (5.1)$$

Les indices s, s_f, s_o dénotent respectivement les suies émises, formées, et oxydées. Où les taux de formation [98] et d'oxydation [99] sont donnés par la formule d'Arrhenius comme suit [97]:

$$\frac{dm_{\text{suie_form}}}{dt} = A_1 \cdot \exp\left(-\frac{T_{A1}}{T}\right) \cdot m_{\text{fuelv}} \cdot \left(\frac{P_{\text{gas}}}{P_{\text{gas_ref}}}\right)^{n1} \quad (5.2)$$

$$\frac{dm_{\text{suie_oxid}}}{dt} = A_2 \cdot \exp\left(-\frac{T_{A2}}{T}\right) \cdot (m_{\text{suie}})^{n2} \cdot \left(\frac{P_{o2}}{P_{o2_ref}}\right)^{n3} \quad (5.3)$$

Où [97]:

- A_1 : Constante pour la formule de formation de suie, [toujours presque $1.0e-4 \text{ s}^{-1}$]
- A_2 : Constante pour la formule d'oxydation de suie, [égale à 4000 pour $n_2=1$]
- T_{A1} : la température d'activation [6313° K], pour la formation de suie
- T_{A2} : la température d'activation [7070° K], pour l'oxydation de suie
- m_{fuelv} : la masse du fuel vaporisé [g]
- m_{suie} : la masse de suie émise à l'échappement
- P_{gas} : la pression du gaz [MPa]
- P_{gas} : la référence de pression du gaz [0.1MPa]
- P_{o2} : la pression partielle de O_2 [MPa]
- P_{o2_ref} : la référence de pression partielle de O_2 [0.021 MPa]
- $n1 = 1.8, n2 = 1.0, n3 = 1.0$ [100]

5.1.1.2 Résultats

Le moteur diesel utilisé dans la simulation est le même présenté dans le chapitre4. Les résultats sont présentés dans les sections suivantes.

1. les courbes

La fig 5.1 montre la densité (g/cm^3) du fuel (n-heptane) à l'intérieur du cylindre. La valeur maximale est de $1.4 \cdot 10^{-3} \text{ (g/cm}^3\text{)}$ pour l'injection de 0.01g. Cette valeur est valide parce que la fin d'injection est près de -6 atdc, puis la concentration de C_7H_{16} diminue linéairement.

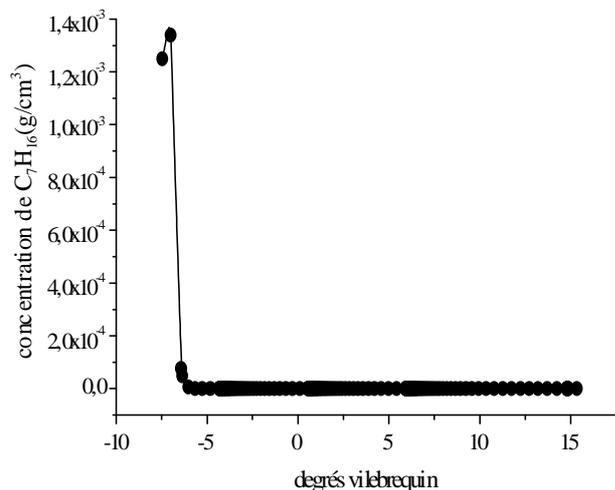


Figure 5.1 : la densité du C_7H_{16}

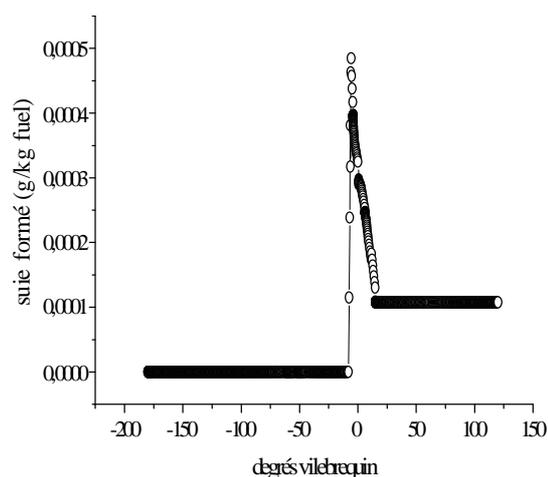


Figure 5.2 : la masse de suie formée

Analyse des suies émises

Le modèle de Hiroyasu [98,66] pour la formation de suie a été utilisé dans notre simulation. On a implanté ce modèle dans le code kiva-3v. Le processus de formation de suie dans une flamme de diffusion turbulente a été étudié numériquement. Les résultats obtenus prédisent la masse de suie pour 1kg de n-heptane.

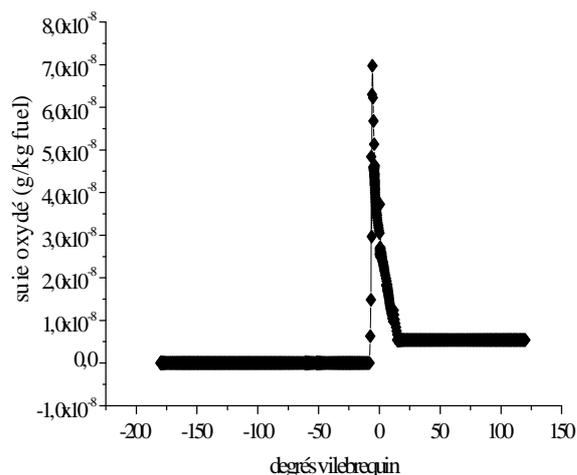


Figure 5.3 : la masse de suie oxydée

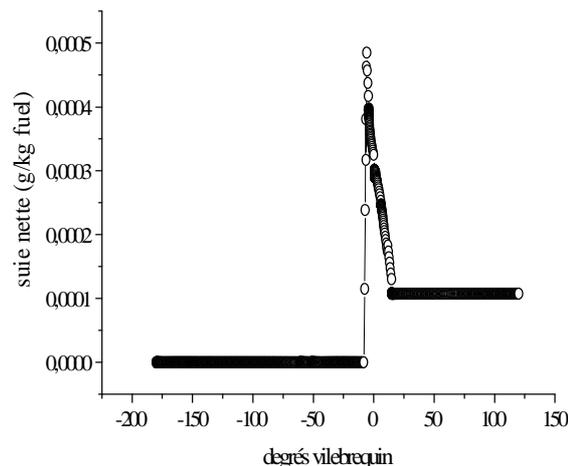


Figure 5.4 : la masse de suie nette

Les graphes de masse de suie nette, du taux de formation et d'oxydation de suie sont présentés sur les figs 5.2, 5.3, 5.4.

On peut distinguer d'après les courbes des figs 5.2, 5.3, 5.4, trois zones différentes : la première ; une région linéaire ; une zone de transition entre la fin de la région linéaire et le maximum de la courbe ; et la troisième est entre le pic et la fin du processus de formation. C'est intéressant de noter que la portion linéaire de la courbe est exclusivement de la concentration du vapeur du fuel.

Selon le modèle utilisé [97], le taux de production de suie temporel est donné par la différence entre le taux de formation de suie et le taux d'oxydation de suie (voire eq5.1).

Le modèle de Hiroyasu pour la formation de suie nous permet d'estimer la formation de suie par : $5 \cdot 10^{-4}$ pour l'injection de 0.01g.

2. les contours

Les contours sont à crank = +0.78 btcd pour une masse injectée de $c_7h_{16} = 0.05g$

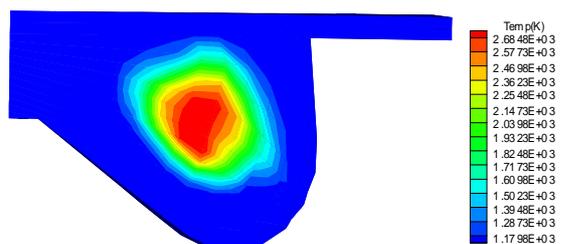


Figure 5.5 : contour de température

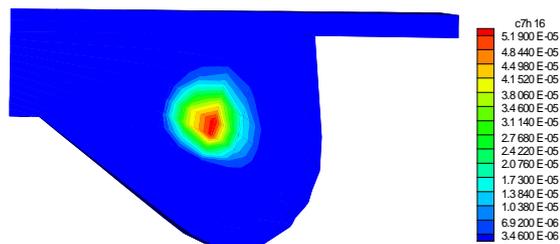


Figure 5.6 : contours de c_7h_{16}

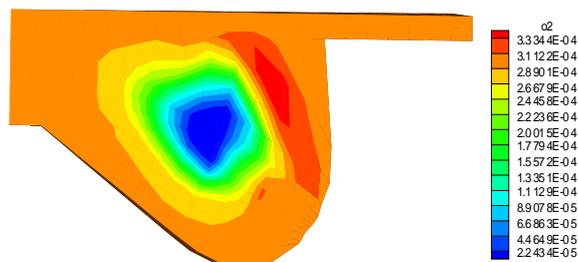


Figure 5.7 : contour de O_2

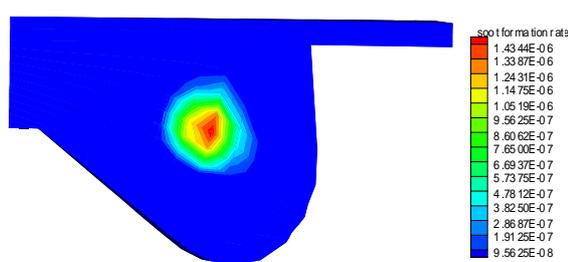


Figure 5.8 : contours du taux de suie formée

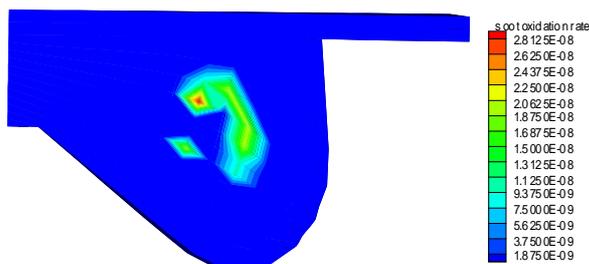


Figure 5.9 : contours du taux de suie oxydée

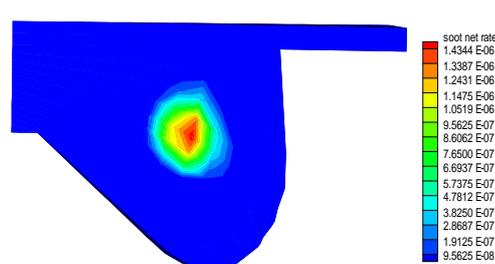


Figure 5.10 : contours du taux de suie nette

La forme du bol de piston est axisymétrique, pour cela, on a schématisé les contours de suie dans le plan (x, z) pour montrer les régions de formation de suie dans la chambre de combustion. L'évaporation du fuel provoque une baisse de température (voir les champs de température près d'axe du cylindre, fig 5.5). Le mélange fuel-air près du jet de spray commence à brûler au PMH (voir l'augmentation de la température). La combustion est contrôlée par la fraction massique locale de l'oxygène. Des premières traces des particules de suie formées ont apparu.

Les courbes schématisées sur les figs 5.5 – 5.10, sont des graphiques des fichiers de sortie du code kiva-3v à +0.78 btdc et pour 2600 rpm. Presque tout le combustible a été brûlé près de 90° après PMH, la masse de suie continue à s'oxyder lentement.

5.1.2 Le modèle de Lindstedt's (1994) pour la formation et l'oxydation de suie

5.1.2.1 Présentation du modèle

Ce modèle de formation de suie est le modèle de **Lindstedt's (1994)** [101,66], c'est une amélioration de la version de Leung et Lindstedt's [102] pour la formation de suie (1991). C'est un modèle de suie chimique. Dans ce modèle l'acétylène est assumé comme une espèce pyrolytique cruciale pour les processus de la nucléation et de croissance de la surface des suies. Dans ce modèle la quantité du fuel vaporisé se transforme en acétylène par simple réaction, comme présenté par l'équation 4 : (Belardini et al., 1999) [103].



3 étapes pour le modèle de formation et d'oxydation de suie [101]



Les taux de réactions sont présentés sur le tableau 5.1, ces taux sont donnés par Belardini and Bertoli (Belardini et al., 1999) [103].

	Eq5.2	Eq5.3	Eq5.4	Eq5.5
C ₁₄ H ₃₀				
Pre exp	2.4 E+15	1.0 E+06	2.1 E+05	1.6 E+04
Act. Temp	60418	21000	12100	19680

Tableau 5.1 : les taux de réactions [103]

5.1.2.2 Résultats obtenus

Le moteur diesel utilisé dans la simulation est le même modèle présenté en chapitre 4.

1. courbes

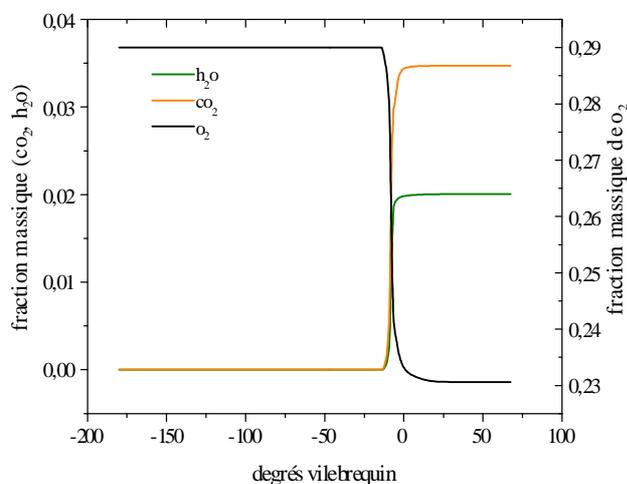


Figure 5.11 : fraction massique de H_2O , CO_2 , O_2 vs degrés vilebrequin

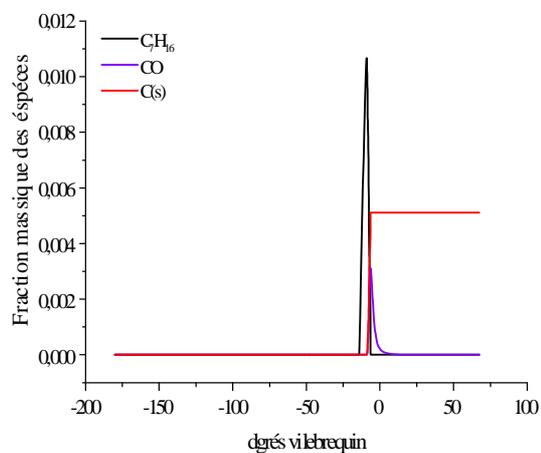


Figure 5.12 : fraction massique de C_7H_{16} , CO , suie vs degrés vilebrequin

La quantité d'oxygène qui compose l'air admis dans le cylindre, passe premièrement par une valeur constante (c'est la composition d'air ambiant), mais avec l'avance du temps d'injection, cette quantité baisse successivement parce que le fuel injecté est oxydé avec l'air ambiant comprimé. Le carbone dioxyde (CO_2), résulte de l'interaction directe entre le fuel injecté et l'air comprimé dans le cylindre, les premières traces de CO_2 apparaissent avec les premières gouttelettes de n-heptane et augmentent successivement avec la masse injectée de fuel jusqu'à l'obtention d'une quantité max et constante. L'évolution du H_2O pendant le cycle moteur est la même comme celle de CO_2 , les atomes de carbone du fuel transforme en CO_2 avec O_2 et les atomes de hydrogène transforme en H_2O avec O_2 . La fig 5.11, présente l'évolution des espèces chimique de CO_2 et H_2O .

La Fig 5.12 montre l'évolution du n-heptane dans le cylindre comme une fonction des degrés vilebrequin, le taux du C_7H_{16} injecté est 0.01g. Pendant l'injection, le jet du liquide pénètre et atteint la quantité maximale presque linéairement, la fraction massique de C_7H_{16} augmente successivement et atteint un pic de 0.011. Le dioxyde de carbone formé se transforme en CO par dissociation, la courbe de variation de CO est schématisée sur la fig 5.12.

Pour la formation du carbone solide (suie), les facteurs préexponentielle des réactions de formation d'acétylène varient selon du type de fuel, pendant que l'autre constante du modèle peut rester non modifiée. Par conséquent, la limitation principale du modèle proposé est la disponibilité de détails expérimentaux plus exacts à propos du mécanisme de la formation de l'acétylène pour des combustibles différents. Simultanément, le combustible se transforme en acétylène par une réaction simple (équation 4). En plus de l'évolution de C_7H_{16} et CO , la fig 5.12 nous permet de comprendre l'histoire de formation de suie dans le cylindre du moteur.

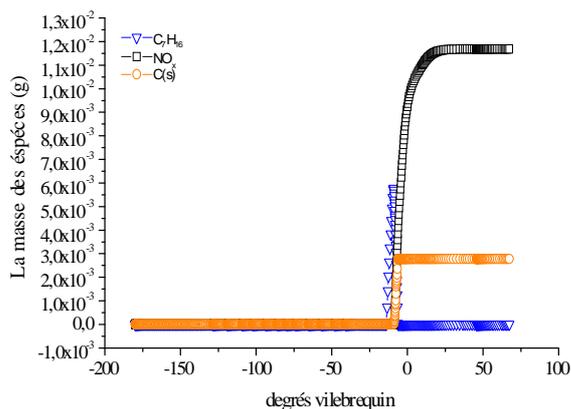


Figure 5.13 : fraction massique de c_7h_{16} , NO_x , Suie vs degrés vilebrequin

Le but d'utilisation de ce modèle est d'estimer la concentration de suie, d'après la fig 5.13, on peut conclure que l'injection de 0.01g de n-heptane à -14 atdc et pour une durée de $7^\circ CA$, résulte en une masse de $2.78 \cdot 10^{-3}$ de suie et $1.16 \cdot 10^{-2}$ de NO_x .

2. contours au pmh

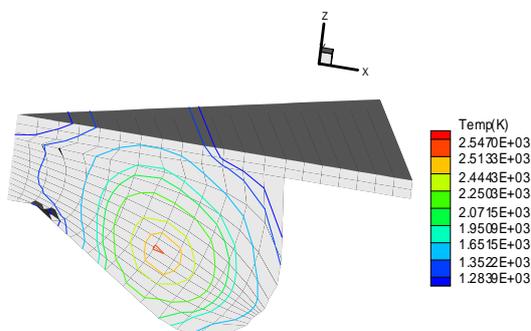


Figure 5.14 : contours de température

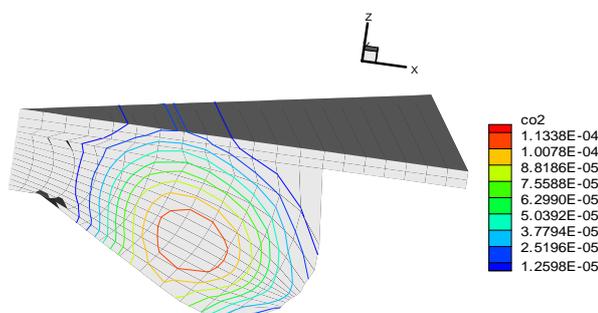


Figure 5.15 : contours de CO_2

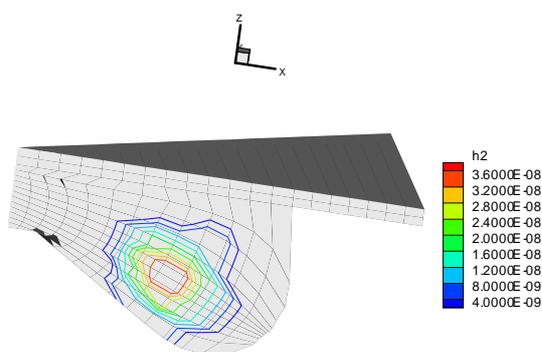


Figure 5.16 : contours de H_2

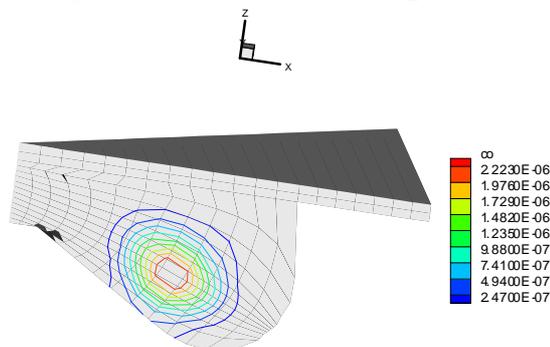


Figure 5.17 : contours de CO

Sur les figs 5.14 – 5.20, on a illustré les champs de température et les principaux produits de combustion (H_2 , CO , NO , NO_2etc.) au pmh. Le pic de graphe représente l'évolution de $c(s)$ obtenue dans la région où la température est maximale.

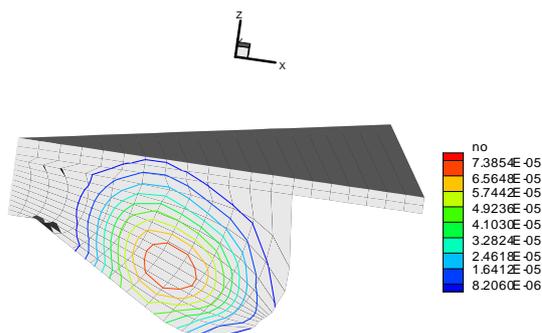


Figure 5.18 : contours de NO

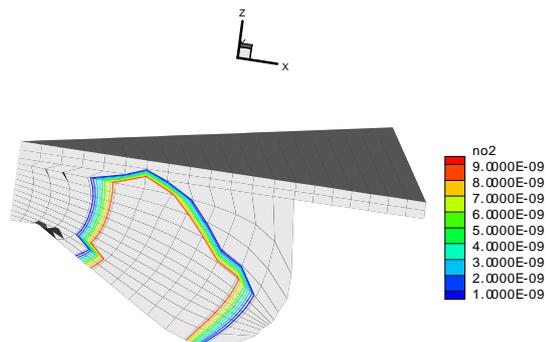


Figure 5.19 : contours de NO₂

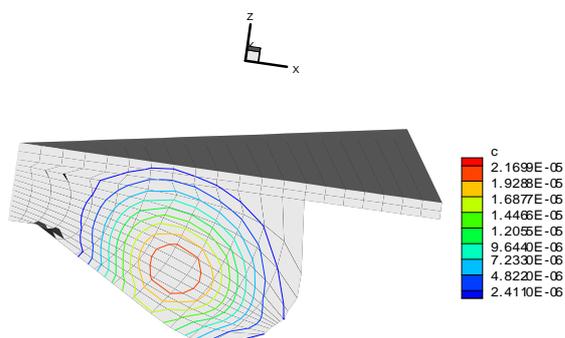


Figure 5.20 : contours de C(s)

5.1.2.3 Paramètres influents sur la formation de carbone solide

1. Le type de combustible

On a déjà annoncé que les réactions de formation de suie d’après le modèle de **Lindstedt’s** dépendent essentiellement des facteurs pré exponentiels de la réaction de formation de la quantité du fuel vaporisé transformé en acétylène par simple réaction.

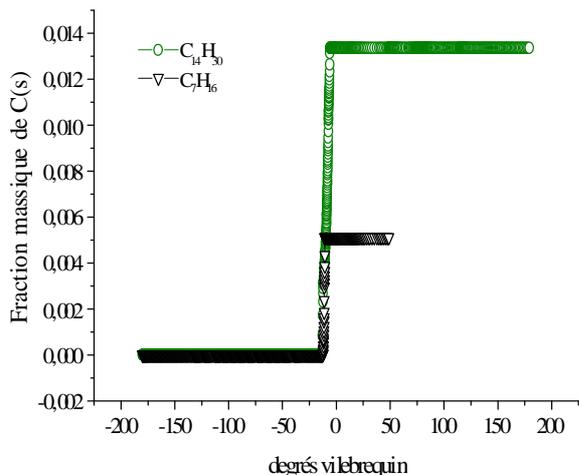


Figure 5.21 : fraction massique de C(s) vs degrés vilebrequin pour différents fuels

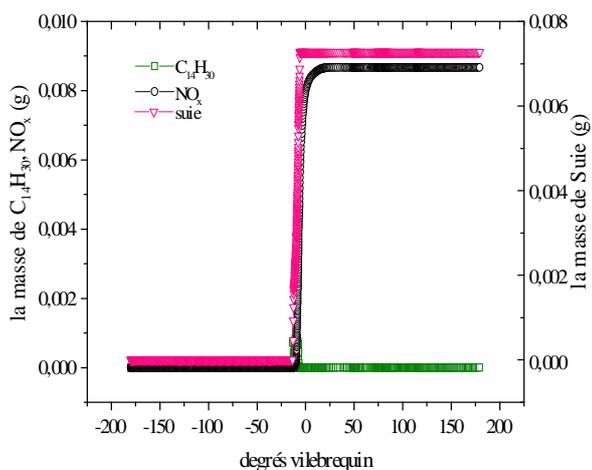


Figure 5.22 : la masse de c₁₄h₃₀, NO_x, suie vs degrés vilebrequin

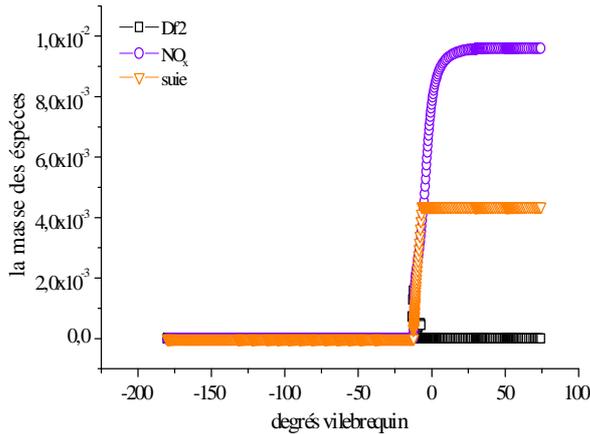


Figure 5.23 : la masse de df_2 , NO_x , Suie vs degrés vilebrequin

On a analysé par une simulation numérique de deux autres combustibles et comparé les résultats obtenus avec ceux de c_7h_{16} . Les fuels étudiés sont le df_2 et $c_{14}h_{30}$ [101]. Les résultats obtenus pour cette comparaison sont regroupés sur les figs.21, 22, 23.

Pour les même conditions de simulation :

Pour 0.01g de c_7h_{16} , on a obtenu $2.78 \cdot 10^{-3}$ de suie et $1.16 \cdot 10^{-2}$ de NO_x .

Pour 0.01g de df_2 , on a obtenu $4.37 \cdot 10^{-3}$ de suie et $9.59 \cdot 10^{-3}$ de NO_x .

Pour 0.01g de $c_{14}h_{30}$, on a obtenu $7.27 \cdot 10^{-3}$ de suie et $8.67 \cdot 10^{-3}$ de NO_x .

On peut donc conclure que $c_{14}h_{30}$ est le fuel qui produit une quantité max de suie comparé au df_2 et c_7h_{16} , par contre il produit une quantité min de NO_x . Le c_7h_{16} contrairement au $c_{14}h_{30}$ produit la quantité max de NO_x et la quantité min de suie.

2 Le modèle de la turbulence et la vitesse de rotation

Le moteur diesel utilisé est le même présenté dans le chapitre 4. Mais, le cone est 160° , la forme du piston est présentée dans la figure suivante (Stanislav et al., 2001) [104] :

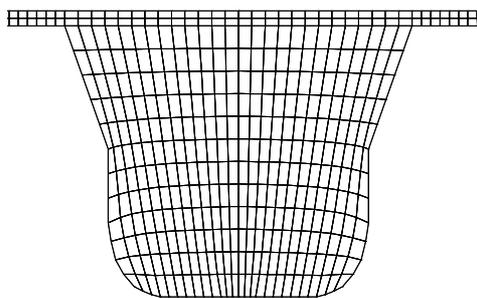


Figure 5.24 : la 2^{ème} géométrie

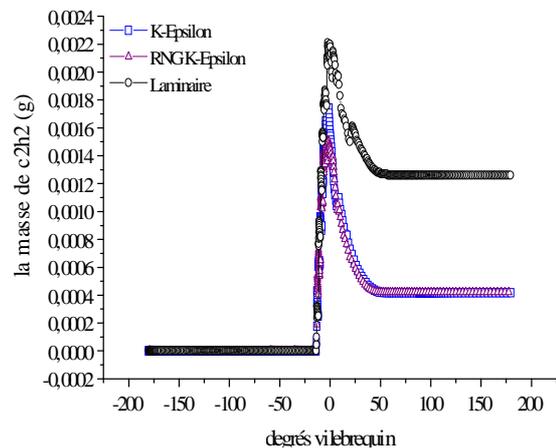


Figure 5.25 : la masse de c_2h_2 pour différents modèles de turbulence

On tire de la fig 5.25 que la masse de c_2h_2 formée est maximale pour le cas laminaire, et minimale pour le modèle de turbulence RNG k- ϵ . Donc, en absence de turbulence la quantité vaporisée de fuel se transforme en acétylène rapidement. Par contre la masse produite de suie (g) est minimale en absence de turbulence, ce qui est montré par la courbe schématisée sur la fig 5.26.

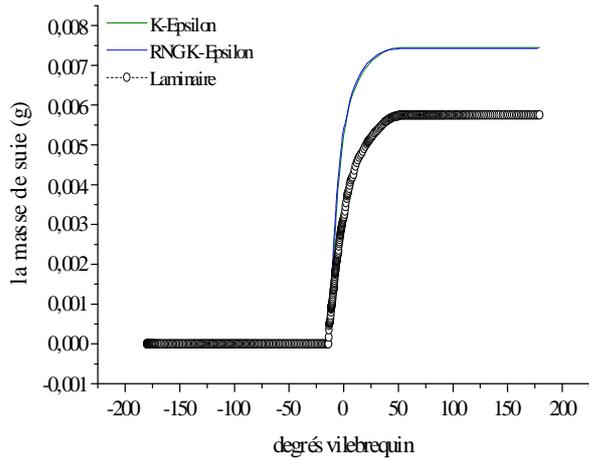


Figure 5.26 : la masse de suie vs degrés Vilebrequin pour différents modèles de turbulence

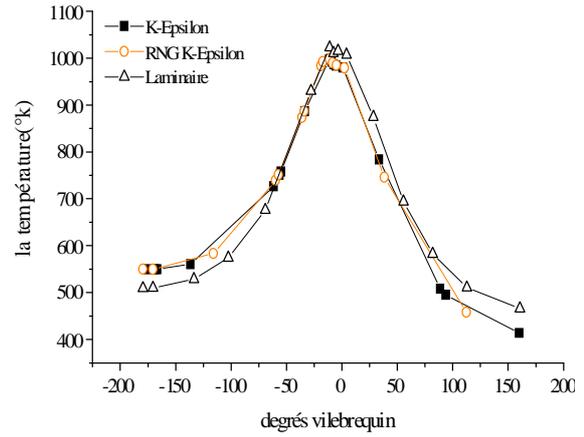


Figure 5.27 : la température vs degrés Vilebrequin pour différents modèles turbulence

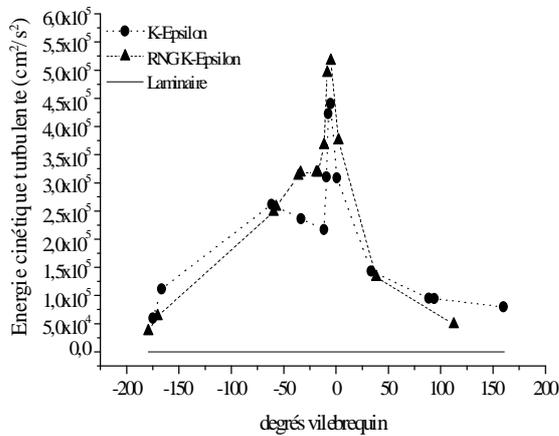


Figure 5.28 : TKE vs degrés Vilebrequin pour différents modèle de turbulence

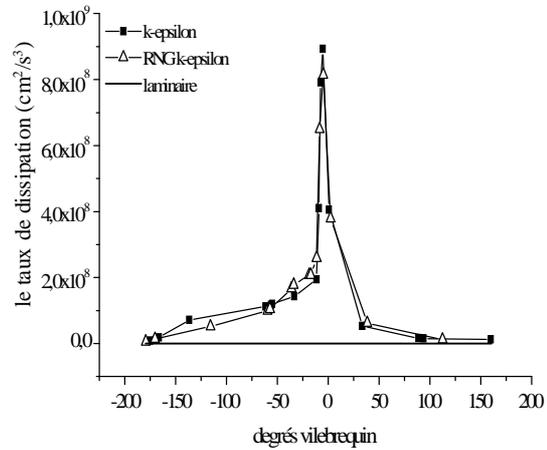


Figure 5.29 : Epsilon vs degrés vilebrequin pour différents modèles de turbulence

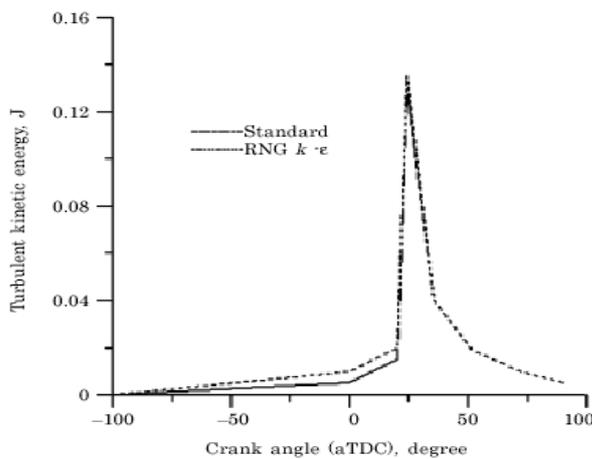


Figure 5.30 : variation de l'énergie cinétique turbulente en fonction degrés vilebrequin Pour deux modèles de turbulence [111]

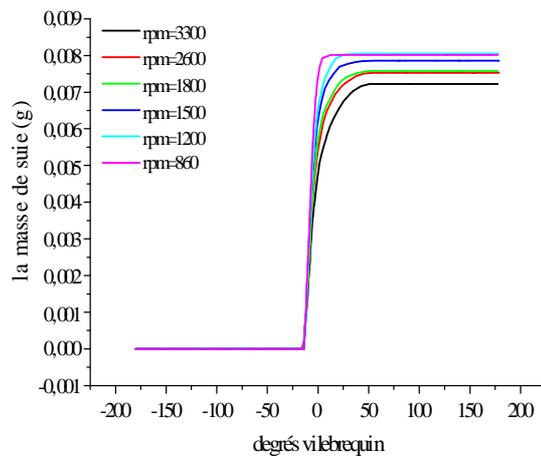


Figure 5.31 : la masse de suie vs degrés vilebrequin pour différentes vitesses de rotation du moteur

Chapitre 5. Autres modèles de formation de suie et Technologies pour réduire les NOx

La température de combustion est maximale en absence de turbulence, c'est pour cette raison que l'acétylène atteint une valeur max dans le cas laminaire. La fig 5.27, présente le profile de température pour les 3 cas.

L'énergie cinétique turbulente produite lors de la combustion est maximale si on modélise la turbulence par RNG k- ϵ (voir fig 5.28). Pour le taux de dissipation ϵ , la fig.29 présente l'évolution de ϵ vs les degrés vilebrequin en absence de turbulence et en présence de turbulence.

La vitesse de rotation du moteur influe aussi sur la formation de suie. On a schématisé l'allure sur la fig 5.31. On peut conclure que la masse de suie formée augmente avec la diminution de la vitesse de rotation du moteur.

Contour pour la 2^{ème} géométrie à crank = +2 BTD pour k-epsilon

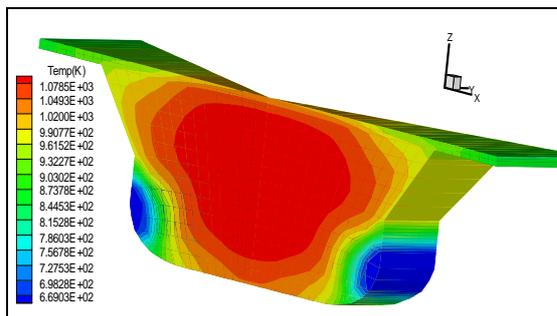


Figure 5.32 : contours de température

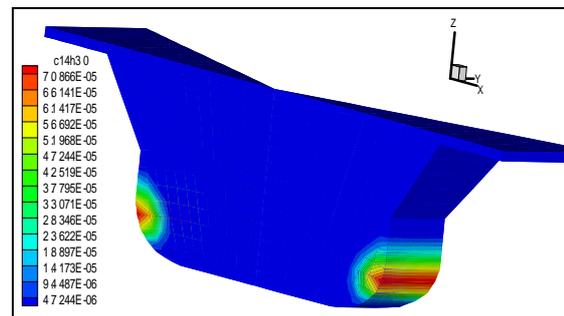


Figure 5.33 : contours de $c_{14}h_{30}$

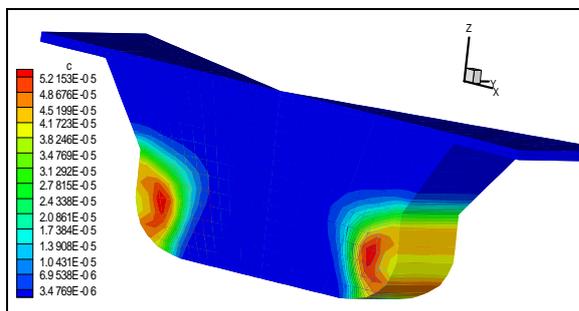


Figure 5.34 : contours de suie

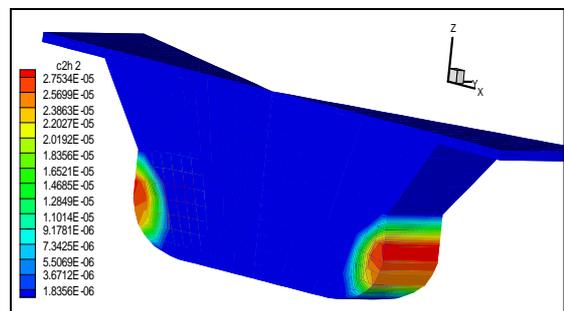


Figure 5.35 : contours de c_2h_2

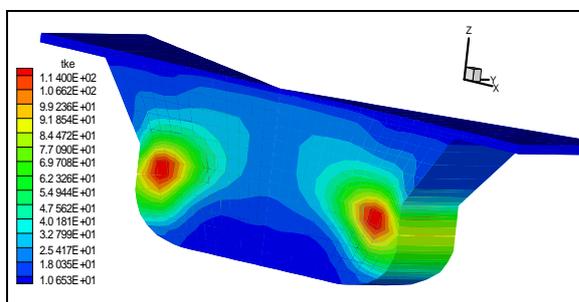


Figure 5.36 : contours de tke

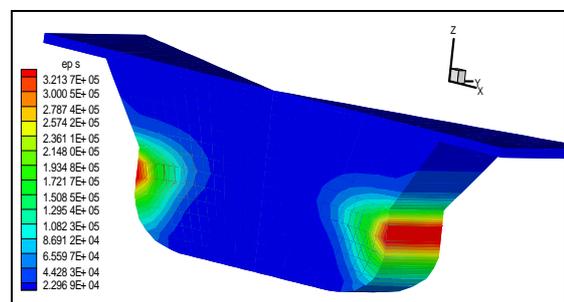


Figure 5.37 : contours de epsilon

Pour bien décrire l'effet du modèle de turbulence sur la température et les produits de combustion, on a tracé les contours pour la 2^{ème} géométrie à crank = +2 BTD pour k-epsilon sur les figs 5.32 – 5.37.

Chapitre 5. Autres modèles de formation de suie et Technologies pour réduire les NOx

Contour pour la 2^{ème} géométrie à crank = +2 BTDC pour RNG k-epsilon

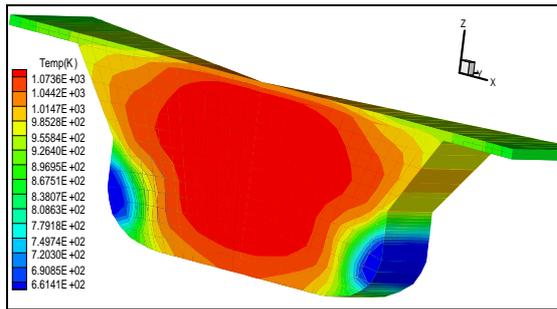


Figure 5.38 : contours de température

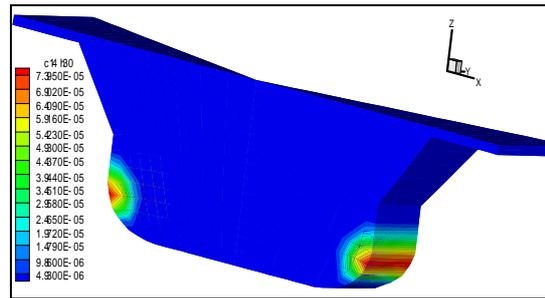


Figure 5.39 : contours de $c_{14}h_{30}$

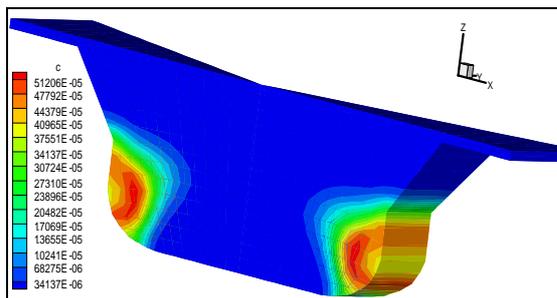


Figure 5.40 : contours de suie

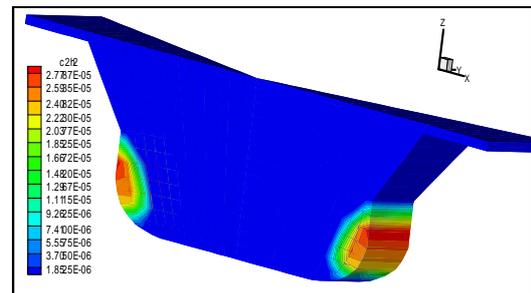


Figure 5.41 : contours de c_2h_2

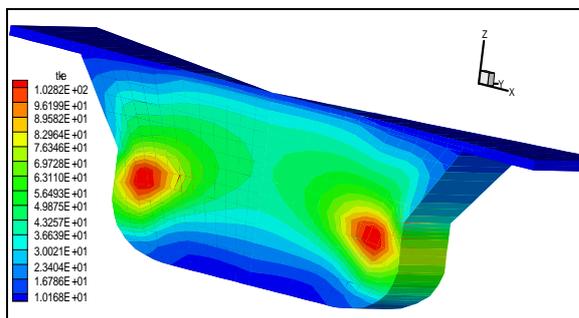


Figure 5.42 : contours de k

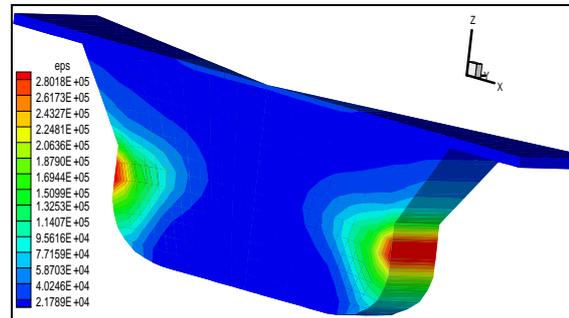


Figure 5.43 : contours de ϵ

Pour le modèle de turbulence RNG k- ϵ , on a aussi schématisé à crank = +2 BTDC pour RNG k-epsilon les contours et les champs des performances du moteur ayant la 2^{ème} géométrie. Ces contours sont présentés sur les figs 5.38 – 5.43.

Contour pour la 2^{ème} géométrie à crank = +2 BTDC pour le cas laminaire

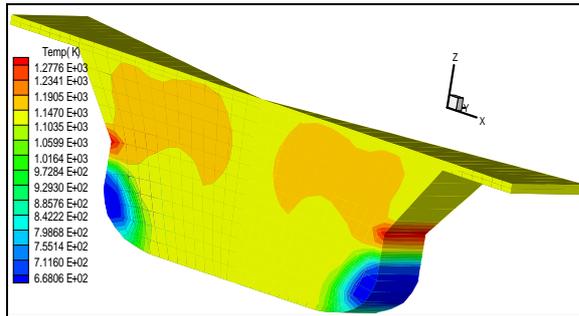


Figure 5.44 : contours de température

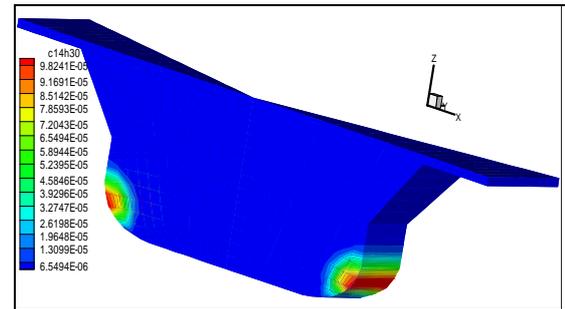


Figure 5.45 : contours de $c_{14h_{30}}$

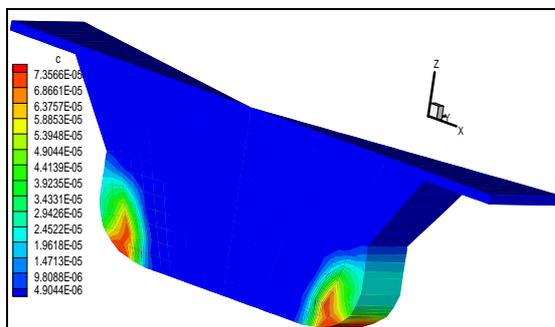


Figure 5.46 : contours de suie

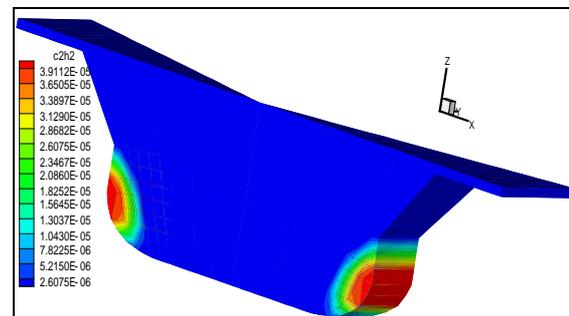


Figure 5.47 : contours de c_{2h_2}

Pour le cas laminaire, on n'a pas besoin des contours d'énergie cinétique turbulente et du taux de dissipation ε . Pour cela le champ de température est représenté par la fig 5.44, les contours de $c_{14h_{30}}$ sont présentés sur la fig 5.45. Les champs de distribution de suie et de c_{2h_2} sont schématisés sur les figs 5.46 et 5.47.

5.2 TECHNOLOGIE DE RÉDUCTION DE NO_x

5.2.1 Effets de la combustion retardée

L'angle du début d'injection a une grande influence sur la pression et la température moyennes dans le cylindre. Cela est tout à fait logique car l'avance à l'injection conduit à avancer toutes les phases de combustion, c'est à dire au déplacement de tous les points qui marquent les débuts et les fins de ces phases.

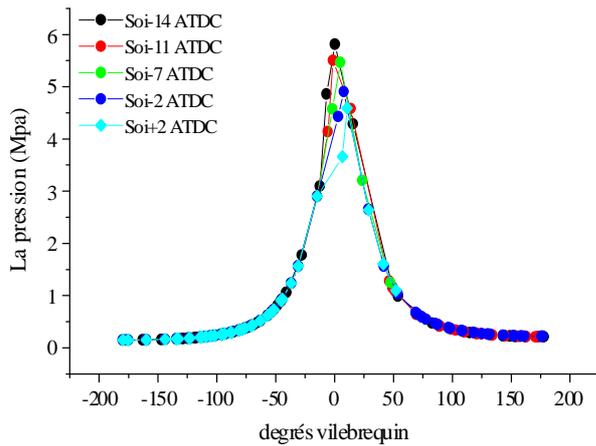


Figure 5.48 : la pression pour différents Temps d'injection

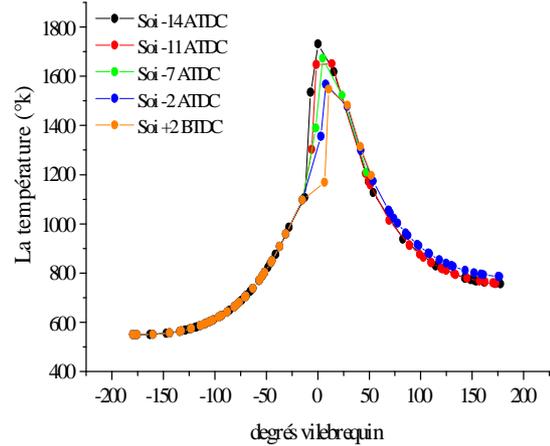


Figure 5.49 : la Température pour différents Temps d'injection

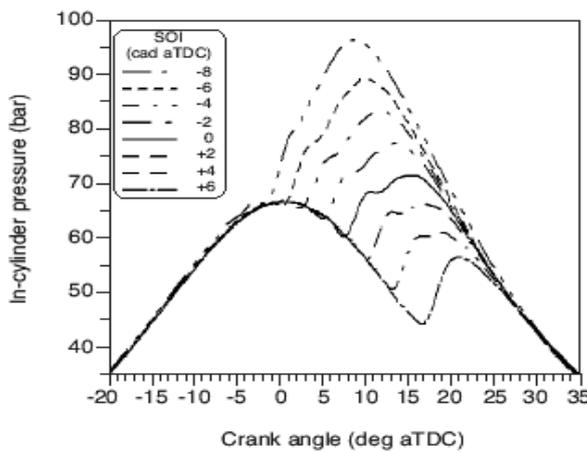


Figure 5.50 : évolution de pression pour Pour différentes valeurs de soi selon [107]

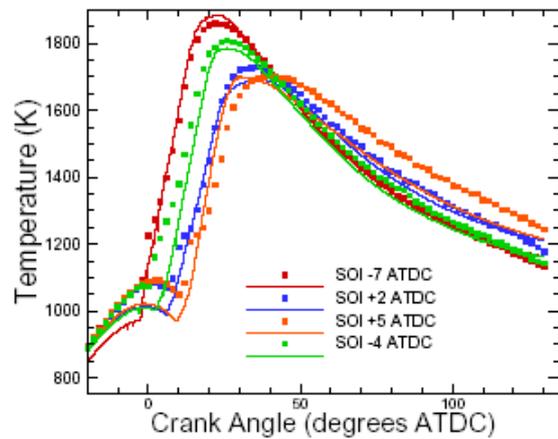


Figure 5.51 : évolution de pression pour Pour différentes valeurs de soi selon [58]

Les résultats numériques montrent que les températures et les pressions diminuent (voir les Figs. 5.48, 5.49) quand le SOI (Start of Injection=Début d'Injection) est avancé. Quand le combustible est injecté avant d'atteindre le PMH, il est introduit dans un courant qui est comprimé. Comme la chaleur de combustion augmente après l'inflammation, les pressions maximum sont aussi plus hautes comparées au cas où le combustible est injecté après le Pmh.

Le retard de SOI produit une parution tardive défavorable d'énergie, ce qui est exprimé sur la fig 5.50 [107]. Laquelle présente l'évolution de pression en fonction des degrés vilebrequin pour différentes valeurs de début d'injection (soi). La combustion retardée produit une réduction claire d'énergie du moteur. La comparaison entre les deux courbes des Figs. 5.48 et 5.70, 5.49 et 5.51 montre une concordance entre les deux graphes.

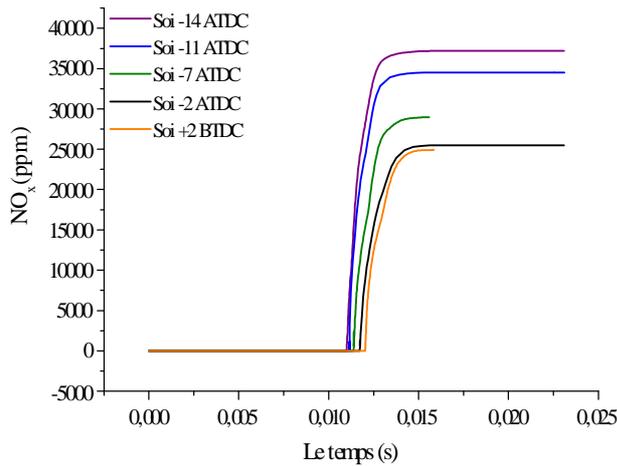


Figure 5.52 : la concentration de NOx pour Différents temps d'injection

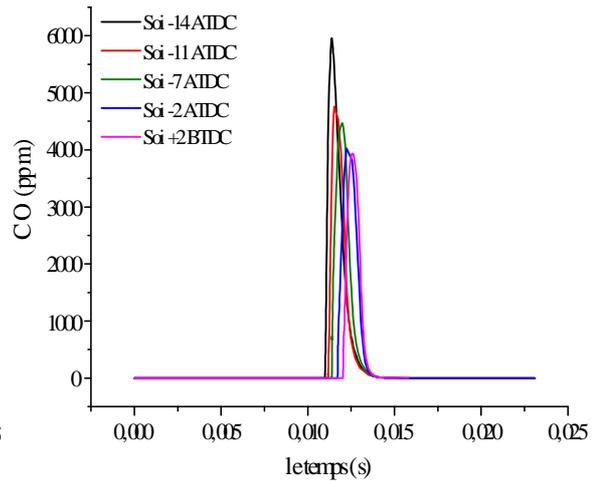


Figure 5.53 : la concentration de CO pour différents temps d'injection

Les figures 5.52, 5.53 montrent que la concentration émise des NOx et CO diminue successivement avec l'avance du temps d'injection (degrés d'injection).

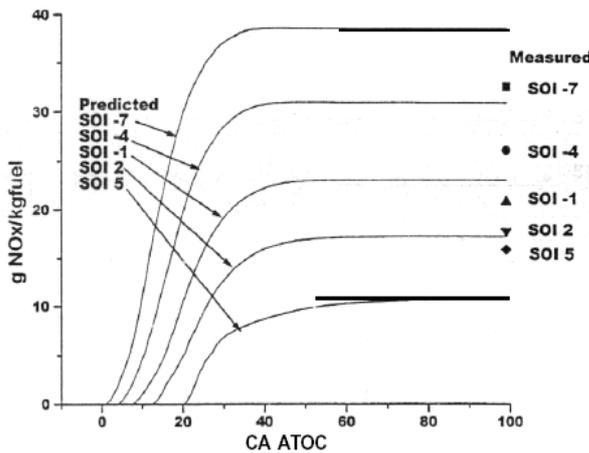


Figure 5.54: évolution de NOx [110]

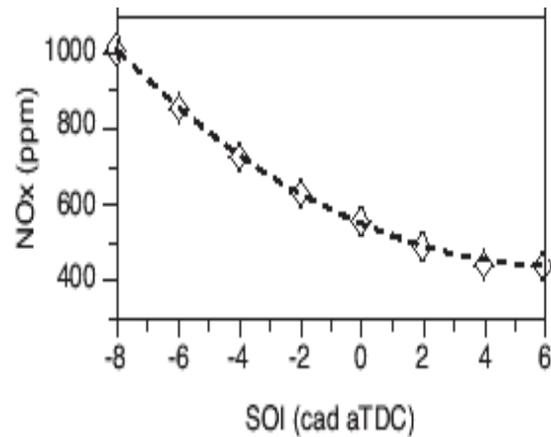


Figure 5.55: variation de NOx avec soi [107]

Quand SOI est retardé, les émissions NOx diminuent régulièrement, dus aux faibles températures à l'intérieur du cylindre [107]. Selon les figures 5.52, 5.54, 5.55 on peut conclure qu'il y a une concordance entre les courbes calculées et celles publiées par d'autres chercheurs.

5.2.2 Recirculation des gaz éjecté (EGR)

5.2.2.1 Principe de l'EGR (Exhaust Gas Recirculation)

Pour diminuer les émissions d'oxydes d'azote, il faut donc abaisser la température dans la chambre de combustion. Pour cela, on injecte un gaz qui ne participe pas à la combustion. On prend alors la chaleur à la combustion pour réchauffer des gaz inertes. Cela permet d'abaisser la température des gaz de combustion surtout après un refroidissement préalable des gaz recirculés.

Chapitre 5. Autres modèles de formation de suie et Technologies pour réduire les NOx

On définit le taux d'EGR comme le rapport en masse de la quantité de gaz d'échappement recirculés par rapport à la masse totale de gaz dans le cylindre [113]

$$X_{EGR} = \frac{m_{EGR}}{m_{tot}} \quad (5.9)$$

5.2.2.2 Circuit d'EGR

Le circuit de recirculation comprend une canalisation de communication entre le circuit d'échappement et le circuit d'admission (Fig 5.56). L'abaissement de la température dans la chambre de combustion est fonction de la quantité et de la température des gaz recirculés si bien que certains moteurs disposent d'un échangeur destiné à refroidir les gaz d'EGR.



Figure 5.56 : Système d'EGR. (Source : NISSAN) [113]

5.2.2.3 Résultats obtenue

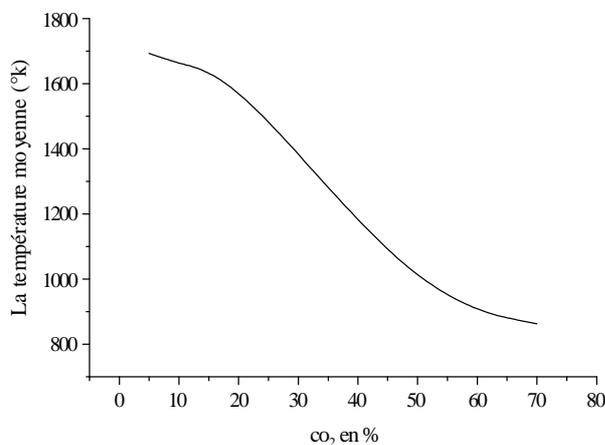


Figure 5.57 : La température moyenne Vs Pourcentage de CO₂

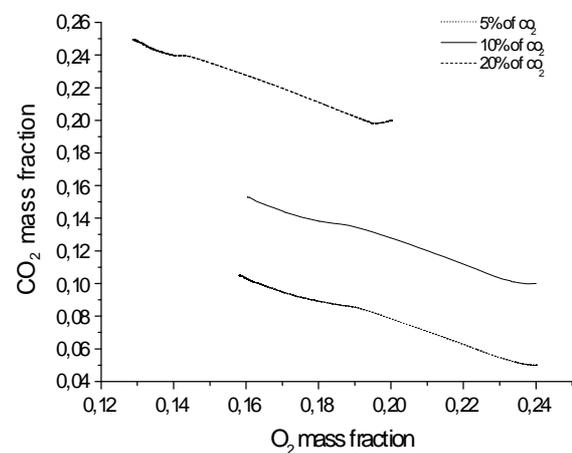


Figure 5.58 : la fraction massique de CO₂ vs fraction massique de O₂ pour différentes valeurs de CO₂

La fig 5.57 présente l'évolution de la température moyenne dans le cylindre avec la recirculation du CO₂. Sa valeur diminue successivement avec l'augmentation du pourcentage du CO₂. Le profil de température moyenne (après la compression d'air) indique que la température atteint un sommet près du point mort haut (Pmh). Ce pic de température dépend du taux de compression. Sa valeur est 1700°k. Ce sommet varie entre la valeur de température de fin de compression et la température de fin de compression avec la recirculation du CO₂. Si toute la composition des gaz d'échappement et du gaz d'admission a

Chapitre 5. Autres modèles de formation de suie et Technologies pour réduire les NOx

été analysée et un modèle de la combustion qui décrit l'effet EGR à été appliqué, ce serait possible d'estimer une baisse de température de combustion.

Selon la Fig 5.58, la quantité de CO_2 diminue avec l'augmentation de O_2 . Aussi cette valeur augmente avec le taux de CO_2 recyclé.

La Fig 5.59 présente l'évolution de la fraction massique du CO en fonction du O_2 , cette valeur a un sommet obtenu près du PMH, et varie avec la quantité recyclée du CO_2 . Les résultats nous permettent de conclure qu'un maximum est obtenu à une valeur de 10% de CO_2 , et la valeur minimale atteinte à 20% de CO_2 .

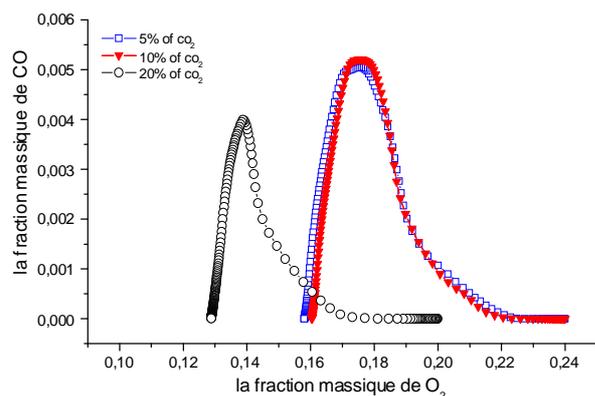


Figure 5.59 : la fraction massique de CO vs fraction massique de O_2 pour différents pourcentages de CO_2

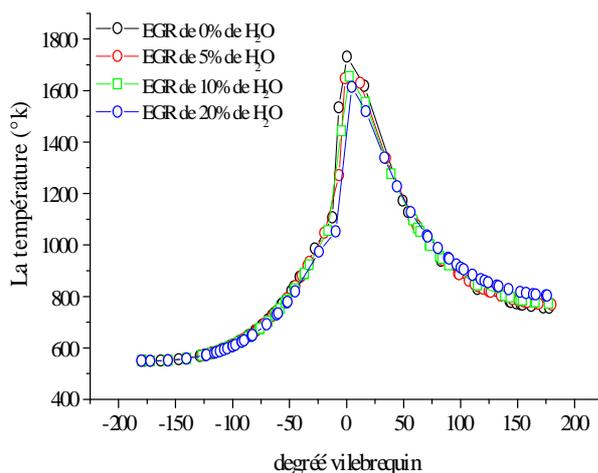


Figure 5.60 : Effet de pourcentage de H_2O sur la température moyenne

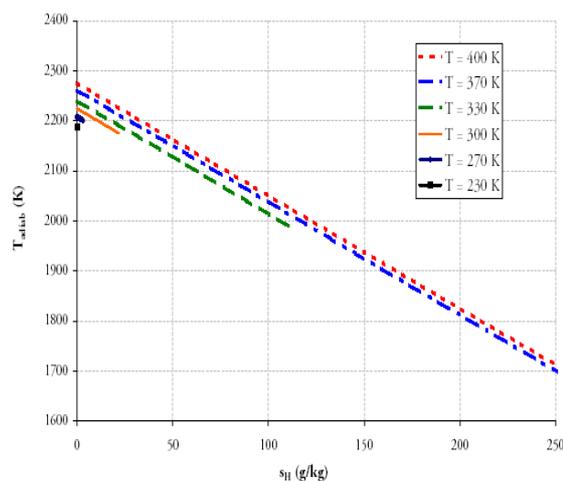


Figure 5.61 : Effet de s_H sur la température différentes Températures des gaz frais pour un mélange air/méthane [112].

s_H est définie comme le rapport de la masse d'eau dans l'air sur la masse d'air humide (exprimée en $\text{g H}_2\text{O}/\text{kg air}$)[112]. La Fig 5.61 représente les températures de fin de combustion pour différentes températures des gaz frais pour un mélange air/méthane. Il est à remarquer sur cette figure que la variation de la température par rapport à s_H est constante quelle que soit la température des gaz frais. La température de la fin de combustion évolue de manière linéaire en fonction de s_H .

La recirculation de différents pourcentages de H_2O résulte en une diminution de température, ce que nous donne la fig 5.60. Nos résultats sont confirmés par les graphes présentés sur la fig 5.61

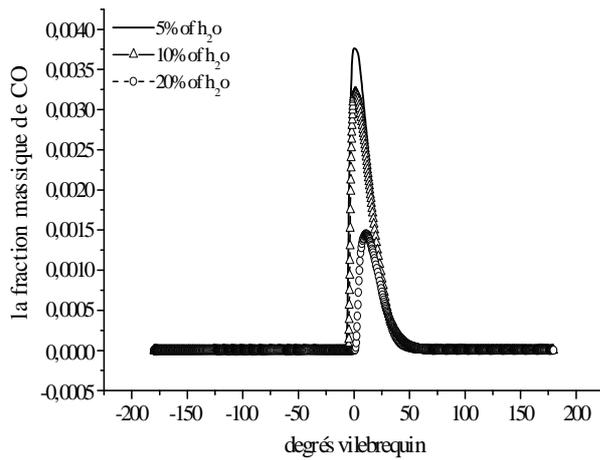


Figure 5.62 : la fraction massique de co vs fraction massique de o₂ pour différents pourcentages de h₂o

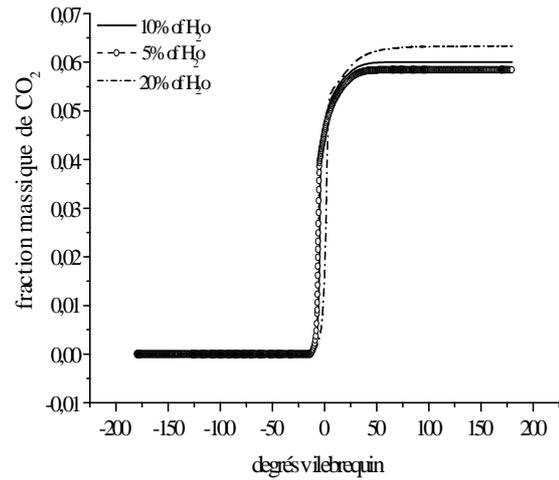


Figure 5.63: la fraction massique de co₂ vs fraction massique de o₂ pour différents pourcentages de h₂o

Un autre paramètre a été étudié, c'est la recirculation du h₂o, on a analysé des quantités différentes 5%, 10%, 20%. La fig 5.62 nous permet de conclure que la Fraction massique du co diminue si la quantité de h₂o recyclée est augmentée.

L'augmentation de la quantité de l'h₂o recyclée provoque une augmentation du co₂ formé, cela est schématisé sur la fig 5.63. Mais ce taux varie avec la recirculation d'autres constituants de EGR.

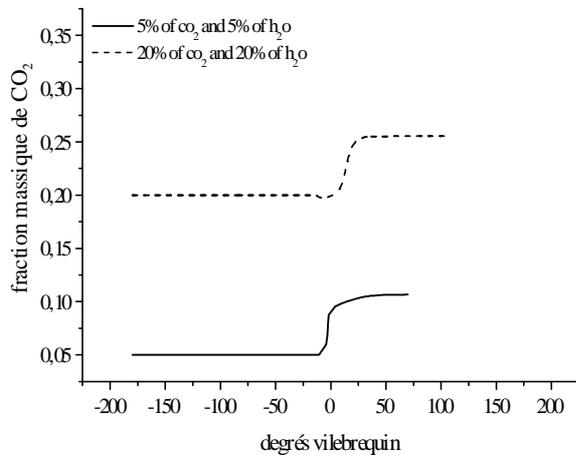


Figure 5.64 : la fraction massique de co₂ vs fraction massique de o₂ pour différents pourcentages d'espèces

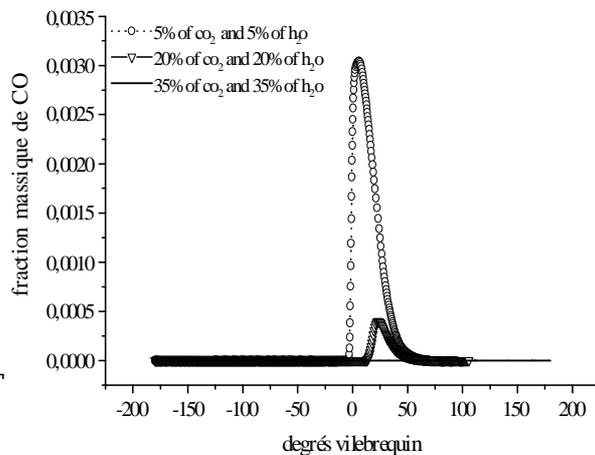


Figure 5.65: la fraction massique de co vs fraction massique de o₂ pour différents pourcentages d'espèces

Avec la recirculation de 5% du co₂ et 5% d'h₂o, la concentration de co₂ formée est moins si on utilise et analyse 20% de co₂ et 20% d'h₂o. Ce résultat obtenu illustré sur la fig 5.64.

La fig 5.65 présente la courbe d'évolution de la fraction massique du co en fonction des degrés vilebrequin, avec différents pourcentages de h₂o et co₂ dans les gaz admis dans le cylindre, c'est logique d'obtenir des faibles concentrations du monoxyde de carbone formé dans les gaz d'échappements.

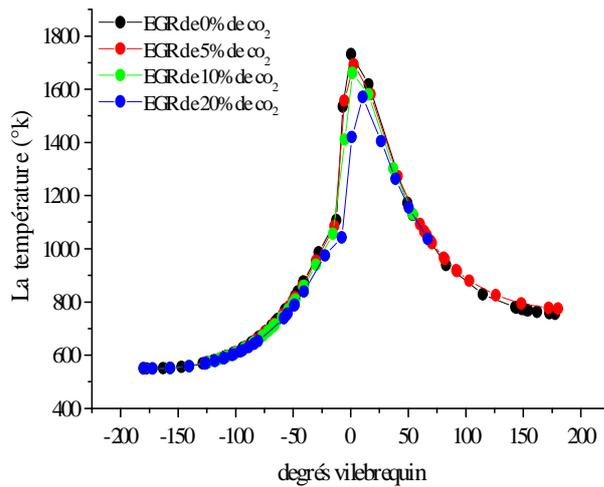


Figure 5.66 : la température vs degrés vilebrequin pour différents pourcentages de CO₂

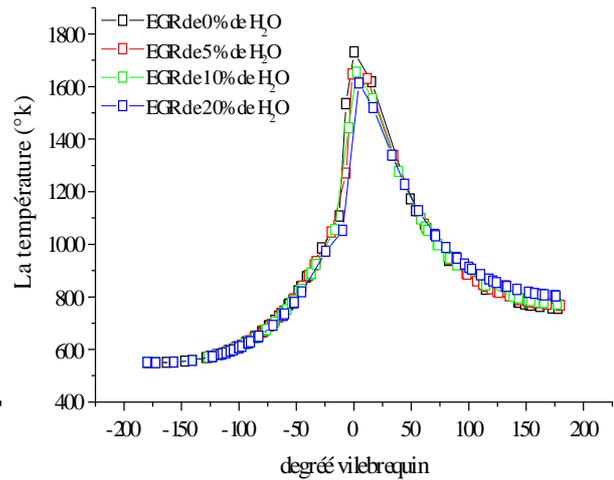


Figure 5.67: la température vs degrés vilebrequin pour différents pourcentages de H₂O

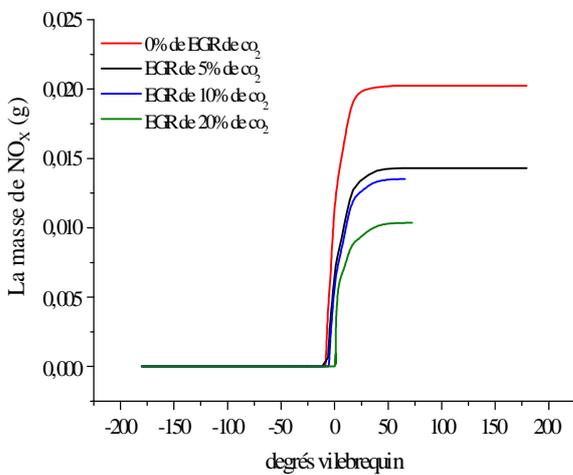


Figure 5.68 : la masse de NOx Vs degrés vilebrequin pour différents pourcentages de CO₂

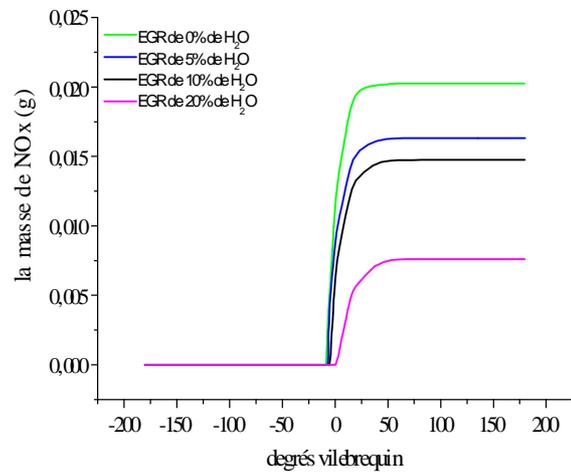


Figure 5.69 : la masse de NOx Vs degrés vilebrequin pour différents pourcentages de H₂O

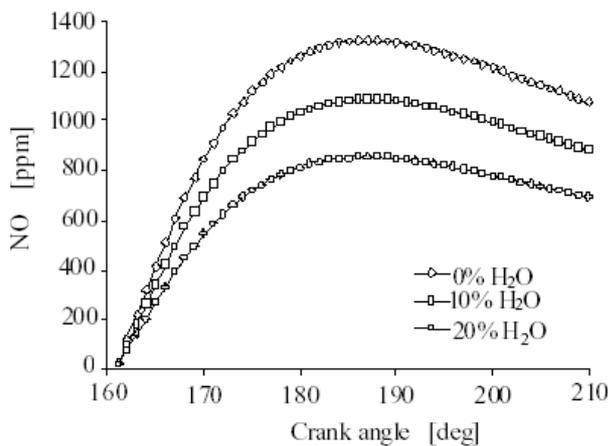


Figure 5.70 : formation de NO pour Différents pourcentages de H₂O pour RPM = 1500 [114]

L'influence du pourcentage d'eau sur la formation de NO est illustrée sur la fig 5.70, L'évaporation et la chaleur d'eau sensibles réduit la température locale adiabatique et donc

Chapitre 5. Autres modèles de formation de suie et Technologies pour réduire les NOx

la formation de NO. D'après les résultats de la simulation numérique de K. Kannan et al [114], il est trouvé que 18 et 25 % de réduction de NO est obtenue avec 10 et 20 % de dilution du moteur diesel par l'eau respectivement.

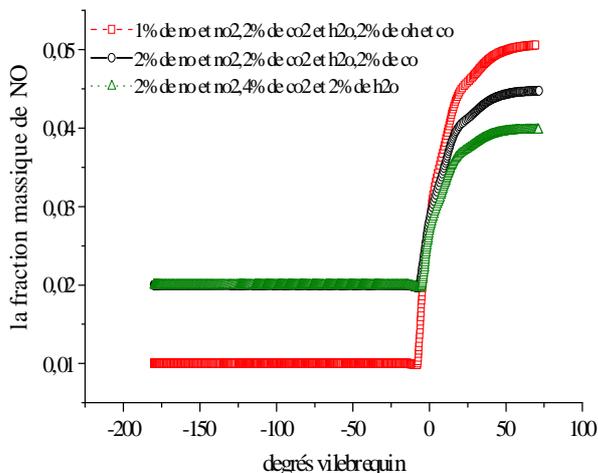


Figure 5.71 : la fraction massique de NO Vs degrés vilebrequin pour différents pourcentages d'espèces

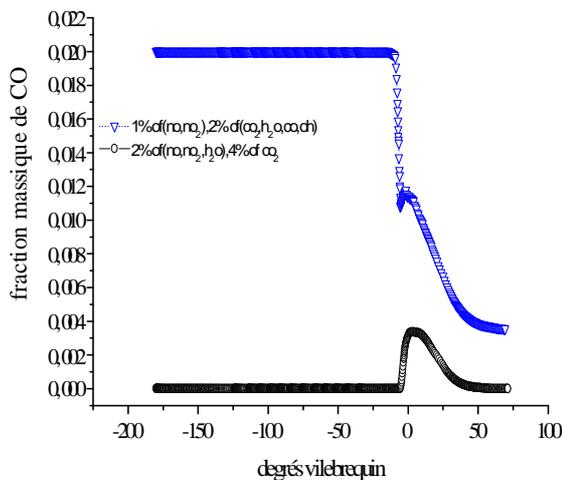


Figure 5.72 : la fraction massique de CO vs degrés vilebrequin pour différents pourcentages d'espèces

Les figures 5.68 et 5.69, présentent l'effet de la recirculation des gaz d'échappements sur le taux formé de NOx pour différents pourcentages de CO₂, H₂O. On peut conclure que la température de combustion diminue avec l'augmentation de pourcentage recirculés de CO₂ ou de H₂O. Cela provoque automatiquement une diminution de la quantité éjectée de NOx. La comparaison entre les courbes des figures 5.69 et 5.70 nous permet de conclure qu'il y a une concordance entre les deux graphes.

D'autres types de gaz recirculés ont été analysés : c'est la recirculation de différents espèces, de NO, NO₂, CO, CO₂, H₂O. On a conclu après cette analyse qu'il y a la réduction de NOx et CO formés. C'est ce qu'on peut voir dans les figures 5.71 et 5.72.

Conclusion Générale

L'objectif de notre étude est la 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 sont 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'air 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 et les mécanismes de formation des émissions polluantes ; de NOx et des suies.
- 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.

Les réactions chimiques sont très compliquées et très difficile à modéliser. C'est particulièrement vrai pour la modélisation des NOx laquelle est très difficile de prédire avec une bonne exactitude. Les différentes valeurs des constants de réactions pour les équations des réactions dynamiques connues sous le mécanisme de Zeldovich trouvé dans la littérature sont aussi un résultat de difficulté de la modélisation des NOx.

Ils y ont à plusieurs facteurs différents qui influent directement sur la formation des NOx mais la seule importante est la température. Un autre facteur important est la le taux d'excès d'air dû au fait que la formation des NOx est dépendante sur la richesse, et atteint un maximum dans la région à combustible pauvre.

Dans cette thèse, une méthode a été développée pour modéliser la formation des NOx dans le processus de combustion. La méthode utilise les deux types de réactions chimiques, les réactions d'équilibre et non équilibre. Pour la formation des suies, on à utilisés 3 modèles différentes pour estimé la concentration de suie formée et oxydée et aussi le taux net de suie dans le cylindre.

La modélisation à l'aide du logiciel KIVA-3V a permis de voir l'influence de l'injection directe sur les émissions polluantes, permet de traité la méthode utilisée pour réduire les

émissions polluantes. L'injection directe est la solution privilégiée puisqu'elle permet d'utiliser le moteur à 2 temps qui offre un bon rapport poids/puissance.

L'importance des particules des suies dans l'atmosphère due à leur impact sanitaire et environnemental nous a poussé à les étudier d'une manière approfondie dans cette thèse.

Les oxydes de carbone et les oxydes d'azote sont les principaux polluants émis par les installations de combustion, notamment les moteurs diesel. Le CO₂ est le principal gaz à effet de serre et les NO_x ont des effets sur la destruction de la couche d'ozone ainsi que sur l'écosystème et la santé humaine. Le contrôle des rejets de polluants peut se faire par une réglementation qui pousse les constructeurs automobiles à l'amélioration technologique des moteurs ou par la diminution de consommation d'énergie par les industriels.

Différentes techniques sont utilisées pour contrôler la stabilisation des flammes et réduire la pollution : la recirculation des gaz éjectés avec une température plus basse et la combustion retardée sont les plus importantes.

Les démarches de notre travail sont comme suivant :

Dans un premier temps, une étude bibliographique a permis de confronter les sources de la pollution atmosphérique, les principaux polluants et les effets sur la santé et sur l'environnement. De plus on a effectué une recherche sur les moteurs à combustion interne, Spécialement sur la combustion dans les moteurs diesel.

Les modèles physiques et chimique traités par le code kiva-3v ont ensuite été développés. Le modèle de fractionnement du jet, l'évaporation, l'allumage, le modèle de combustion, le modèle de turbulence aussi prendre en compte et l'interaction chimie turbulence. On à interpréter le cas laminaire, le modèle de turbulence k-ε et RNG k-ε . Le transfert de chaleur, les modèles de formation des polluants ont aussi traité.

Les équations et les expressions de tous les modèles ont été implantées dans le code kiva-3v. Ce code est un logiciel de mécanique des fluides dédié à la simulation tridimensionnelle des moteurs à combustion interne.

Enfin, des calculs sur un cas d'un moteur diesel ont été réalisés. Plusieurs comparaisons ont été faite concernant l'influence des différents paramètres comme la vitesse de rotation, la géométrie de la chambre de combustion et la richesse du mélange.

En effet, cette thèse représente le point de départ et la base d'une approche de réduction des polluants et d'amélioration du rendement pour les moteurs à combustion interne.

Comme perspectives, plusieurs problèmes peuvent être traités à l'aide du code KIVA-3v. On peut en effet mener plusieurs recherches sur les moteurs à essence : incorporation des différents modèles de combustion, d'allumage, d'autres modèles des NO_x, incorporation des différents modèles des suies, utilisation d'autres réactions chimiques, traitement de géométries complexes de chambres de combustion....etc.

Annexe A

Thermodynamique

A.1 Loi des gaz parfaits

Les espèces gazeuses qui composent le fluide de travail dans le moteur (c'est-à-dire l'oxygène, l'hydrogène, l'azote, etc.) sont généralement considérées comme des gaz parfaits. Ils respectent donc l'équation d'état thermique [28] :

$$pV = mrT \quad (\text{A.1})$$

Où, p représente la pression, V le volume, m la masse de gaz, T la température et r la constante des gaz. Cette dernière est différente pour chaque espèce ; elle est donnée par la relation :

$$r = \frac{R}{M} \quad (\text{A.2})$$

Où, R est la constante universelle des gaz et M est la masse molaire du gaz considéré exprimée en kg/mol. En fonction du nombre de moles $n=m/M$, l'Equation (A.2) peut se réécrire :

$$pV = \frac{mRT}{M} = nRT \quad (\text{A.3})$$

A.2 Lois fondamentales de conservation de la masse et de l'énergie

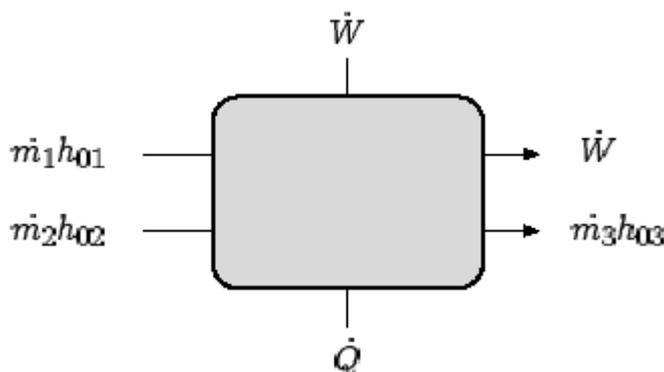


Figure. A.1 : Système thermodynamique ouvert [28].

Conservation de la masse

La vitesse de variation de la masse totale m dans un système thermodynamique ouvert est égale à la somme des débits entrant et sortant :

$$\dot{m} = \sum_j \dot{m}_j \quad (\text{A.4})$$

Conservation de l'énergie

L'équation fondamentale pour la modélisation des machines thermiques est dérivée du premier principe de la thermodynamique et de la loi des gaz parfaits. En négligeant les variations de l'énergie potentielle, le premier principe de la thermodynamique appliqué au système ouvert de volume \mathbf{V} (FIG. A.1) s'écrit [28] :

$$\frac{dU}{dt} = \frac{dQ}{dt} - \frac{dW}{dt} + \sum_i \frac{dH_{0j}}{dt} \quad (A.5)$$

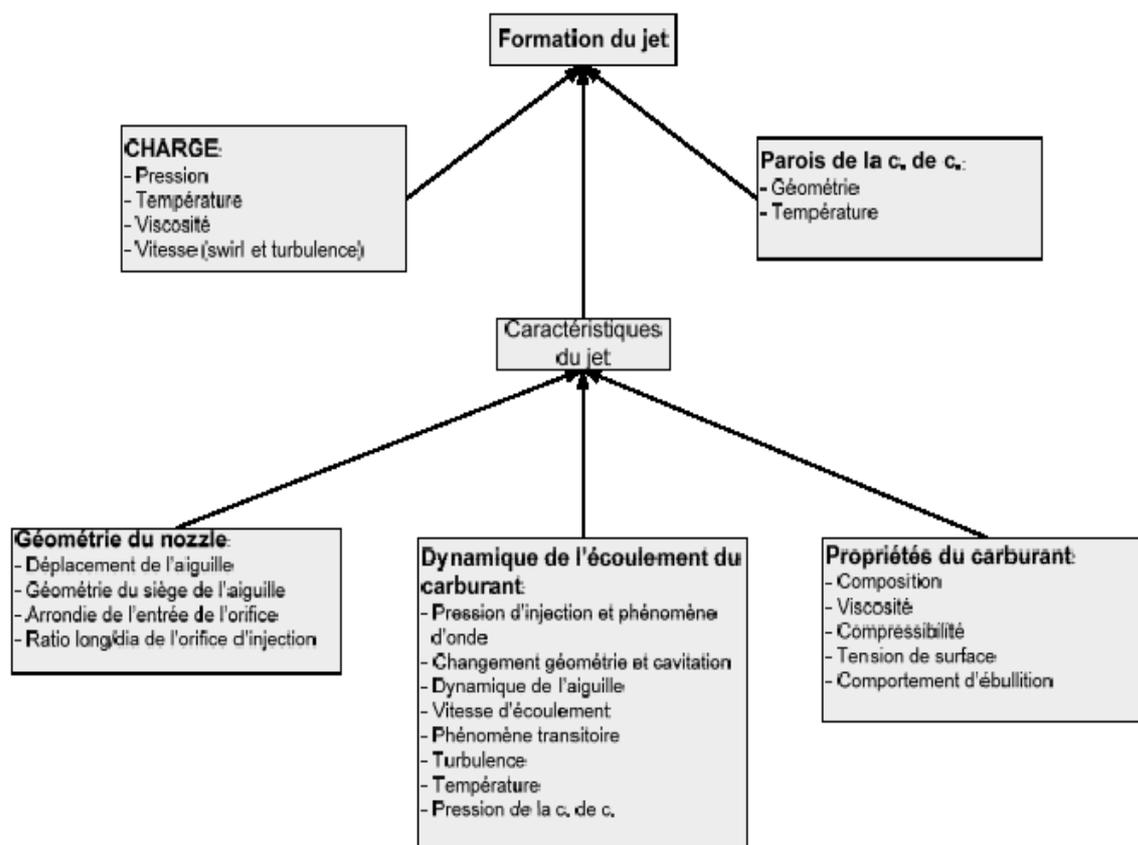
Où, Q est la chaleur échangée avec l'extérieur du système, W est le travail fourni par les gaz au sein du système et le troisième terme du membre de droite correspond à la somme des énergies reçues et cédées. L'Équation (A.5) peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\frac{d(mu)}{dt} = \sum_i \frac{dQ_i}{dt} - p \frac{dV}{dt} + \sum_j h_{0j} \dot{m}_j \quad (A.6)$$

Où, \mathbf{m} est la masse totale de gaz contenue dans le système thermodynamique ouvert, \mathbf{u} l'énergie interne des gaz, Les indices i et j font référence, respectivement, aux surfaces de transfert de chaleur et aux entrées (ou sorties) du volume de contrôle. Les enthalpies massiques à chaque entrée ou sortie du système thermodynamique ouvert (indices j) sont notées \mathbf{h}_{0j} .

Annexe B

B.1 Paramètres influençant la formation du jet [145]



B.2 Mélange air-carburant

- *Swirl trop lent*
 - Réduit vitesse de mélange et combustion possible
 - Mouillage de parois
- *Swirl trop rapide*
 - Les différents jets entre en contact les uns aux autres
 - Réduction de la vitesse de mélange
 - Augmentation de la fumée

B-3 Délai d'initiation de la combustion

- Dans moteur diesel, l'auto-inflammation n'est pas instantanée, donc on parle de délai d'initiation [145]
- Lorsque la vapeur du carburant atteint la température d'auto d'auto-inflammation il y a quand même un laps de temps pour atteindre une peroxyde pour concentration suffisante de provoquer l'inflammation

- Exemple pour diesel avec cétane de 50
 - $T_{\text{gaz}} = 370^\circ \text{C}$: aucune inflammation
 - $T_{\text{gaz}} = 390^\circ \text{C}$: délai 1.6 ms
 - $T_{\text{gaz}} = 420^\circ \text{C}$: délai 1.3 ms
 - $T_{\text{gaz}} = 450^\circ \text{C}$: délai 1.6 ms
 - $T_{\text{gaz}} = 480^\circ \text{C}$: délai 0.9 ms
- Délai = $A \exp(B/T) / p^n$

Facteurs affectant le délai d'initiation de la combustion [145]

- Avance à l'injection (10-15° avant PMH)
 - Trop tôt : $T_{\text{air}} \downarrow$ donc délai \uparrow
 - Trop tard : T_{air} et $P \uparrow$ mais après PMH T et $P \downarrow$
- Quantité de carburant injecté ou charge
 - Délai \downarrow linéairement avec \uparrow charge car T et quantité gaz résiduels brûlés \uparrow
- Diamètre gouttelettes, vitesse d'injection et taux d'injection
 - $P_{\text{inj}} \uparrow$ faible réduction du délai d'initiation
 - Diam. Gout. et quantité injectée peu d'effet

Annexe C

Classification des différentes variétés de combustion

3 catégories de combustion qui sont contrôlées par [146] :

- la cinétique chimique. Exemple : inflammation, explosion. Taux de réaction lent comparé aux taux de chaleur et diffusion des espèces.
- la diffusion, les procédés physiques de mélange. Exemple : combustion d'un spray, d'une goutte, d'une sphère de carbone, d'une bougie. Taux de réaction beaucoup plus rapide que le taux de diffusion.
- la cinétique chimique + les procédés physiques de mélange. Exemple : flammes dans un moteur essence, bec Bunsen → prémélange du combustible et de l'oxydant.

→ Comparaison des temps physique et chimique [146] :

- temps physique : l^2/D avec l : longueur caractéristique du système et D : coefficient de diffusion
- temps chimique : temps nécessaire pour consommer la moitié des réactifs.

Si temps chimique \gg temps physique : combustion contrôlée par la cinétique chimique.

Si temps physique \gg temps chimique : combustion contrôlée par la physique ou la diffusion.

→ Calcul du nombre de Damköhler :

$$D_a = \frac{k \cdot \rho \cdot L \cdot \exp(-E_a / RT)}{h_D} \quad (C.1)$$

Avec k : constante de vitesse, L : longueur caractéristique, h_D : coefficient de transfert de masse (proportionnel à $\rho \cdot D$).

Régime contrôlé par la cinétique : $Da \rightarrow 0$

Régime contrôlé par la diffusion : $Da \rightarrow \infty$

Différents processus d'inflammation :

- inflammation thermique : chaleur apportée par une source externe de chaleur (étincelle, compression, parois chaudes d'une enceinte...)
- inflammation chimique : sous des conditions isothermes, porteurs de chaîne intermédiaires qui accélère la réaction jusqu'à l'inflammation.
- inflammation spontanée ou auto-inflammation : augmentation de la température d'un mélange combustible gazeux par compression adiabatique ou isentropique.
- inflammation forcée : source externe de chaleur (fil chaud, étincelle, particule incandescente, flamme pilote...). Une flamme est initiée localement près de la source puis se propage.

Annexe D

Techniques de limitation des rejets du moteur

D.1 Améliorations moteurs

Les solutions présentées ici ont le double intérêt de permettre une amélioration des performances du moteur (en général en limitant les pertes énergétiques) et une réduction des émissions d'imbrûlés, par une meilleure combustion. On obtient donc, pour des conditions de charge et de régime données, un meilleur compromis NOX/particules. Les évolutions technologiques des moteurs Diesel ont accompagné les différentes étapes Normatives [147].

L'entrée en vigueur de la norme Euro2 en 1996 a amené la généralisation des techniques d'amélioration de l'écoulement et de réduction des pertes énergétiques (4 soupapes/cylindre, turbo refroidi, optimisation de la chambre et des écoulements). Pour les véhicules particuliers, les techniques d'injection directe (déjà présentes pour les PL) avec des pressions d'injection plus élevées (gouttes plus fines) sont apparues.

L'étape suivante Euro3 (2001 pour les PL) a été rendue possible par l'utilisation de systèmes permettant une injection à très haute pression d'une quantité contrôlée et phasée de carburant. Ces systèmes, déjà largement répandus, sont : le common rail, les injecteurs-pompes unitaires (un par cylindre

Les évolutions futures (et actuellement présentes sur certains véhicules) concernent principalement l'utilisation d'une « pré-et-post » injection permettant une optimisation du fonctionnement des post-traitements, comme la régénération des filtres à particules. Le meilleur contrôle de la combustion offert par ce type de système permet l'usage d'un fort taux d'EGR (Exhaust Gas Recirculation ou Recirculation des gaz brûlés) sans pénaliser les rejets imbrûlés.

D.2 Réduction des NOX par l'EGR (recirculation des gaz brûlés)

D.2.1 Principe et attraits

Le principe de l'EGR réside dans l'introduction d'une quantité donnée de gaz d'échappement en remplacement d'une partie de l'air frais à l'admission des moteurs Diesel ou essence. Ce recyclage a plusieurs effets sur le processus de combustion :

- pour une quantité de gazole injectée, le remplacement partiel de l'air (contenant 21 % d'O₂) par des gaz d'échappement (contenant généralement moins de 10 % d'O₂) conduit à une limitation de la concentration d'oxygène, ce qui réduit pour une température donnée la formation des NO_x
- la présence de CO₂ augmente la capacité calorifique du mélange du fait de sa forte chaleur massique ; la température de flamme sera donc plus faible pour une énergie délivrée égale
- le CO₂ a une légère action inhibitrice sur la combustion (on observe une faible dissociation du CO₂ durant le processus) « captant » une partie de l'énergie dégagée

- les gaz recyclés étant généralement plus chauds que l'air, l'utilisation de l'EGR peut conduire à une augmentation de la température de mélange à l'admission. On a donc recours à des systèmes de refroidissement de l'air recyclé.

Ces trois effets conduisent donc à :

1. une limitation des émissions NOX d'autant plus importante que la fraction de gaz recyclés (appelée généralement taux d'EGR) est grande ;
2. une tendance à l'augmentation des émissions imbrûlées (HC et particules), cette tendance est également croissante avec le taux d'EGR ;
3. une réduction des performances du moteur [147].

Cette solution est utilisée depuis plusieurs années sur les véhicules légers (essence puis Diesel). Son application aux moteurs lourds se heurte aux difficultés suivantes.

- Contrairement aux moteurs légers pour lesquels les réglementations « antipollution » ne concernent que les charges et régimes partiels, les moteurs lourds sont homologués sur l'ensemble de leurs plages d'utilisation. La mise au point d'un système EGR doit donc se faire en optimisant son fonctionnement pour toutes les plages d'utilisation moteur. Le problème est particulièrement critique dans les conditions de pleine charge pour lesquelles la limitation de rendement et l'augmentation des émissions de particules dues à l'EGR sont les plus importantes.
- Les particules recyclées et admises dans la chambre d'admission des moteurs diesel ont des effets de nature à nuire à la durabilité des moteurs, paramètre important pour les PL.

D.2.2 Fonctionnement technique : Différentes approches

On distingue deux types de systèmes EGR.

- Les systèmes d'EGR internes sont des systèmes directement intégrés au moteur. Les principales techniques se basent sur une modification de la loi de levée des soupapes (distribution variable) et d'un pilotage de la pression des gaz admis par des Suralimentations à géométrie variable. La mise en place et le réglage de ces systèmes fait partie intégrante d'un développement moteur et sort du cadre de ce rapport. Ces systèmes sont principalement utilisés pour les moteurs essence.
- Les systèmes d'EGR externes sont basés sur l'utilisation d'une vanne qui prélève une partie des gaz d'échappement pour les réintroduire à l'admission.

D.2.3 Effets sur l'usure et la durabilité du moteur

La mise en place de l'EGR a pour conséquences de réintroduire à l'intérieur de la chambre des gaz brûlés chargés d'un certain nombre de composants susceptibles de dégrader les qualités de l'huile (en particulier une réduction de son pouvoir lubrifiant) et d'accroître l'usure des pièces mobiles du moteur.

L'analyse (au banc) de l'influence de la mise en place de l'EGR sur l'usure moteur a fait l'objet de plusieurs études dont les résultats sont les suivants :

- l'EGR a tendance à accroître les teneurs en cendre (causant une dégradation de l'huile) ainsi que la teneur en métaux (traduisant une usure du moteur)
- l'usure est plus marquée dans des conditions de fortes charges, les effets étant faibles en condition de charge partielle et fort excès d'air

- les effets sont d'autant plus marqués que le taux d'EGR est élevé

On en déduit donc que :

- le recours à l'EGR devra être limité pour les véhicules fonctionnant de manière trop fréquente en conditions de très fortes charges ;
- la mise en place de l'EGR devra s'accompagner d'un changement de lubrifiant plus fréquent.

D.3 Réduction des NO_x par les carburants seuls

A priori, la solution la plus simple de limitation des émissions d'oxydes d'azote est la modification de la formulation des carburants. Si les carburants à très basse teneur en soufre n'ont pas d'effet direct sur les NO_x, ils permettent cependant d'utiliser des systèmes de post-traitement qui sont affectés par le soufre.

Les biocarburants constitués de mélanges d'esters d'huiles végétales et de gazole ont des effets contrastés sur les NO_x : bien qu'une tendance à l'augmentation (les bio additifs sont des produits oxygénés) soit observée les résultats sont très dispersés et très dépendants des conditions d'essais (charge et régime).

Dans cette catégorie de solutions, l'alternative la plus courante passe par l'utilisation d'eau qui réduit la température de combustion et donc les oxydes d'azote. Généralement ce sont les émulsions eau/gazole qui sont utilisées (ces produits formulés à base de gazole contiennent jusqu'à 20 % d'eau, à laquelle sont ajoutés des agents tensioactifs permettant de stabiliser l'émulsion).

D.4 Réduction des NO_x par les systèmes de post-traitements

Le rôle d'un post-traitement est d'éliminer par voie chimique les principaux polluants issus de la combustion des carburants dans l'air. Globalement, deux types de réactions sont mis en :

- l'oxydation des espèces issues de la combustion incomplète, HC, CO et particules
- la réduction des oxydes d'azote

Comme il a été expliqué précédemment, les échappements des moteurs Diesel se caractérisent par la présence d'oxygène résiduel, ainsi que des températures relativement basses. La problématique est donc double : cinétique (température) et chimique (présence d'oxydant). Les solutions envisagées font appel à des artifices rendant possible la réaction.

- L'introduction d'un agent réducteur permettant la transformation chimique [147] :
 $\text{NO et NO}_2 \rightarrow \text{N}_2$
- des voies limitant l'énergie d'activation des réactions (par voie catalytique ou par génération d'espèces hautement réactives (plasma)).

Annexe E

Principaux paramètres de dimensionnement de la chambre de combustion

Le système de combustion est composé [148] :

1. d'un injecteur qui a pour fonction d'introduire le carburant dans la chambre de combustion
2. d'une culasse générant du swirl
3. d'un piston dans lequel est usiné une forme couramment appelée « bol »

Ce triplet (figure E.1) est indissociable, toute modification sur l'un d'entre eux nécessite une ré-optimisation sur les deux autres.

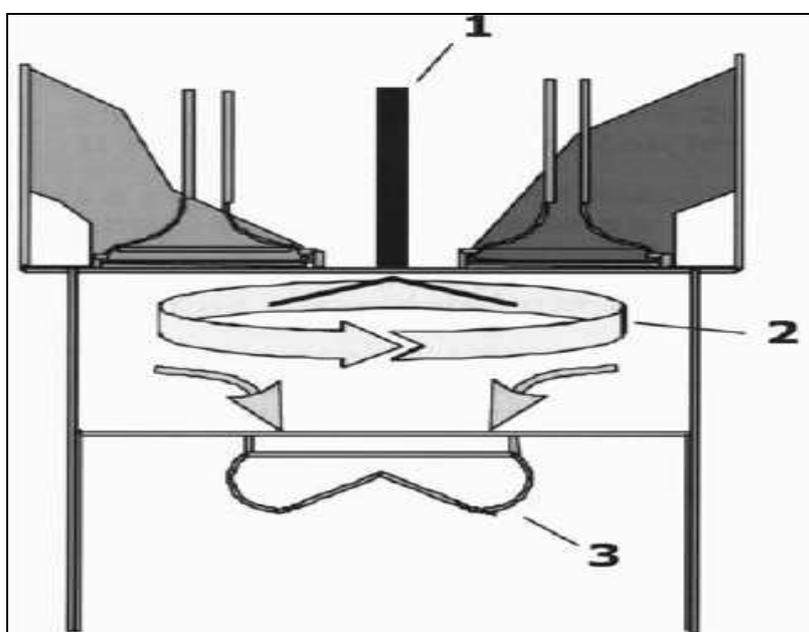


Figure E.1 : Schéma d'une chambre de combustion [Fasolo et Gastaldi (2002)]

Le bol (figure E.2) a pour rôle d'amplifier le mouvement de swirl durant la phase de compression et de créer une aérodynamique permettant de faciliter le mélange air / carburant avant la combustion et pendant la combustion [148]. Il est de révolution et en général de forme torique. Il possède en général une restriction de diamètre à son entrée appelée « lèvre ».

Les principaux paramètres de dimensionnement sont :

- le diamètre du bol
- la profondeur du bol
- le diamètre de lèvre

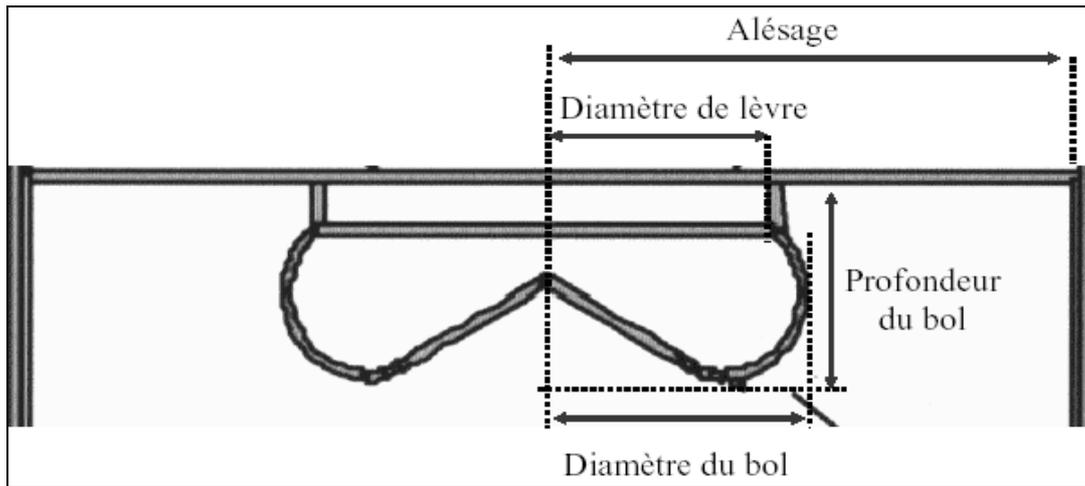


Figure E.2 : Schéma du bol [Fasolo et Gastaldi (2002)]

Il existe aussi des paramètres sans dimension [Maroteaux et Fasolo (1997)] :

- diamètre bol / alésage (ϵ [52 % - 55 %])
- diamètre lèvres / alésage (ϵ [46 % - 49 %])
- diamètre bol / profondeur bol (ϵ [2.4 - 2.7])
- diamètre chambre / diamètre lèvres (ϵ [1.1 - 1.2])

Ces valeurs usuelles peuvent varier avec la cylindrée unitaire du moteur.

Références Biographiques

- [1] <http://www.actualites-news-environnement.com/21364-pollution-interieure-ufc-que-choisir-pouvoirs-publics.html>
- [2] La pollution du trafic aérien selon l'Union Francilienne Contre les Nuisances Aériennes
- [3] **Anthony UNG**. Cartographie de la pollution atmosphérique en milieu urbain à l'aide de données multisources, Thèse de Doctorat, Université de Paris, **2003**
- [4] **E.C.Halliday**. Historique de la pollution atmosphérique, Phd, Genève **1963**
- [5] http://environnement.wallonie.be/rapports/dppgss/air1999/m_princ.htm
- [6] **W.Richard**, D.Boubel, D Turner. Fundamentals of air Pollution, Third edition, academic press, Sydney, **1994**
- [7] **Hugh E C**. Problems and Control of Air Pollution, Reinhold, New York, 1955
- [8] [http:// MEMO - Le site de l'Histoire.htm](http://MEMO - Le site de l'Histoire.htm)
- [9] **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**
- [10] **R. Atkinson**, D. L. Baulch, R.A. Costa, R.F. Hampson, J.A Kerr & J. Troe, Journal of physical and chemical reference data, vol.26, pp.521, **1997**
- [11] **E.C. Zabetta**, P. Kilpinen, M. Hupa. Kinetic Modeling Study on the potential of Staged Combustion in Gas turbines for the reduction of nitrogen oxide emissions from Biomass IGCC plants, journal of Energy and Fuels, vol.14, pp.751-761, **2000**
- [12] **S.A. Driscoll**, D.K. Gardner, U.S.Ozkan. Transient isotopic labeling studies using CH₄/CH₄ over alkali-promoted molybdate catalysts in the oxidative coupling of methane, *Catalysis letters*, vol.25, pp.191-199, **1994**
- [13] **P. Quénel**, W Dab, B Festy, C Viau. Qualité de l'air : environnement et santé publique-fondements et pratiques, pp. 219-315, **2003**
- [14] **Peiry Jean-luc D**. Pollution atmosphérique et impacts environnementaux. **2005**
- [15] **Popovich, M., and Hering, C**. Fuels and Lubricants. Oregon State University Press, Corvallis, 1978
- [16] **Souf**. Généralités sur la pollution atmosphérique et ses effets, **1999**
- [17] **karim mouaici**. Étude de quelques sources de polluants atmosphériques dans la région de Bejaia , Mémoire à l'université de Bejaia, **2002**
- [18] **kimbaloo**. Les principaux polluants, **2001**
- [19] **Mouhamadou Moustapha L**. Croissance économique et protection de l'environnement le cas du CO₂ au Sénégal, Université Gaston Berger
- [20] **direction générale de l'aviation civile**. Pollution atmosphérique et aviation, **2003**
- [21] **Cellule interrégionale d'épidémiologie de Haute-Normandie (Cire)**, Effets de la pollution atmosphérique sur la santé, **2005**
- [22] **S. Lacour**. Cours de pollution atmosphérique, école Nationale des Ponts et Chaussées, **2005**
- [23] **Coparly**, l'air et les polluants, **2004**
- [24] **Laurie Pesant**. Elaboration d'un nouveau système catalytique à base de carbure de silicium (β -SiC) pour la combustion des suies issues des automobiles à moteur Diesel,

- Thèse de Doctorat à l'Université de Louis Pasteur, **2005**
- [25] **P. Sovanna**. Moteurs thermiques : moteurs à cycle deux temps, **2004**
- [26] **P. Sovanna**. Moteurs thermiques : particularités du moteur diesel, **2004**
- [27] **P. Sovanna**. Moteurs thermiques : fonctionnement du moteur, **2004**
- [28] **Olivier Grondin**. modélisation du moteur à allumage par compression dans la perspective du contrôle et du diagnostic. Thèse de Doctorat à l'Université de Rouen, **2004**
- [29] **A.Haupais**. Combustion dans les moteurs Diesel, Techniques de l'Ingénieur, pp. 1-33, **1994**
- [30] **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**
- [31] **caroline marchal**. modélisation de la formation Et de l'oxydation des suies dans Un moteur automobile, Thèse de Doctorat à l'Université d'Orléans, **2008**
- [32] **Ganesan Subramanian**. Modélisation de l'auto-inflammation : Analyse des effets de la dilution par les gaz brûlés et des interactions avec la turbulence dédiée aux moteurs Diesel à charge homogène, Laboratoire IFP, **2005**
- [33] **J. B. Heywood** . Internal Combustion Engine Fundamentals, McGraw-Hill book CO, Singapore, **1988**
- [34] **T. W. Ryan, T. J. Callahan**. Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) of Diesel fuel, Society of Automotive Engineers, **1996**
- [35] www.Dieselnet.com
- [36] **H. Lüders, P. Stommel, R. Backes**. Applications for the regeneration of diesel particulate traps by combining different regeneration systems, SAE 970470, **1997**
- [37] **Miguel-Angel Gomez-Garcia**. Absorption - réduction des NOx provenant D'installations fixes sur systèmes catalytiques HPW--métal supportés, Thèse de Doctorat à l'Université de louis pasteur, **2004**
- [38] **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**
- [39] 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**
- [40] **G.Dufour**. Contributions à la modélisation et au calcul des écoulements dans les compresseurs centrifuges : application `a la conception par lois de similitude. Thèse de doctorat à l'institut national polytechnique de Toulouse, **2006**
- [41] Computational fluid dynamics, Wikipédia, **2008**
- [42] **R. Muriel**. Codes de champ : potentialité et limites, INSA, **2000**
- [43] **D. C Amsden, A. A. Amsden**. The KIVA Story: A Paradigm of Technology Transfer, IEEE transactions on professional communication, vol. 36, no. 4, **1993**
- [44] **Kong**. kiva_intro: how to run kiva_3v, **2001**
- [45] **Kong**. Kiva note_part3: the computer program, **1999**
- [46] **Patrice Seers**. Conception d'une motoneige environnementale, mémoire de Maîtrise A L'université Du Québec, **2000**
- [47] **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**
- [48] **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**
- [49] **P. J. O'Rourke, A. A. Amsden**. Three-dimensional numerical simulations of the UPS-292 stratified charge engine, SAE Paper 870597, **1987**

- [50] **A. A. Amsden**, T. D. Butler, and P. J. O'Rourke. The KIVA-II computer program for transient multidimensional chemically reactive flows with sprays, SAE Paper 872072, **1987**
- [51] **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**
- [52] **R. Diwakar**. Engine and High Turbulence Piston, U. S. Patent No. 4, 955,338, **1990**
- [53] **A. A. Amsden**. KIVA-3 A KIVA Program with Block-Structured Mesh for Complex geometries, Los Alamos National Laboratory report LA-12503-MS, **1993**
- [54] **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**
- [55] **A. A. Amsden**. KIVA-3V release 2, improvements to KIVA-3V, Los Alamos National Laboratory report LA-13608-MS, **1999**
- [56] **G. A. Weisser**. Modelling of combustion and nitric oxide formation for medium-speed diesel engines: a comparative evaluation of zero- and three-dimensional approaches. Thèse de Doctorat à l'Université de Karlsruhe, **1965**
- [57] **R. Lebas**. Modélisation Eulérienne de l'Atomisation Haute Pression Influences sur la Vaporisation et la Combustion Induite, Thèse de Doctorat à l'Université de Rouen, **2007**
- [58] **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**
- [59] **Ftao**. Kinetic combustion mechanism, **2003**
- [60] **Nicolas Baricault**. Modélisation de la combustion des sprays par une approche de type RANS/PDF calculée. Prise en compte de l'intermittence aux petites échelles, Thèse de Doctorat à l'Université de Rouen, **2005**
- [61] **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**
- [62] **T. Bhaskar**, S. Pramod, S.Mehta .A multi-zone diesel combustion model Using Eddy dissipation concept, Internal combustion engines laboratory. India. Comodia **1998**
- [63] **B. E. Launder**, D. B. Spalding. Computer Methods, Applied Mechanics and Engineering vol. **3**, 269, **1974**
- [64] **B. Jeanne**. Étude par diagnostics optiques de l'impact d'une très haute pression d'injection sur le fonctionnement d'un moteur a injection directe essence, Thèse de Doctorat à l'Université de Rouen, **2004**
- [65] **W. Yuan**. Computational Modeling of NOx Emissions from Biodiesel Combustion Based on Accurate Fuel Properties, Urbana, **2005**
- [66] **Ftao**. Soot formation and oxidation, **2003**
- [67] **P. Van-Hulle**. Caractérisation des aérosols émis par la combustion des hydrocarbures : application a la mesure de l'indice de réfraction des suies. Thèse de Doctorat à l'Université de Rouen, **2002**
- [68] **Pertti Taskinen**. Modelling of Spray Combustion, Emission Formation and Heat Transfer in Medium Speed Diesel Engine, Thèse de Doctorat à l'Université de Tampere, **2005**
- [69] **V. F. Surovikin**. Analytical description of the processes of nucleus-formation and Growth of particles of carbon black in the thermal decomposition of aromatic hydrocarbons in the gas phase, khimiyatverdogo topliva, **10** (1), pp. 111-122, **1976**
- [70] **B. S. Haynes**, H. G. Wagner. Soot formation, Progress in energy and combustion science, Vol.7, pp. 229-273, **1981**

- [71] **J. Nagle**, r. f. Strickland-constable, Oxidation of carbon between 1000-2000°C, proc. of the fifth conf. on carbon, pp.154-164 (pergamon press, London), **1962**
- [72] **W.P.J. Visser**, S.C.A. Kluiters. Modelling the effects of operating conditions and alternative fuels on gas turbine performance and emissions, NLR-**1998**
- [73] **J. B. moreau**. Modélisation de l'écoulement polyphasique à l'intérieur et en sortie des injecteurs diesel, Thèse de Doctorat à l'institut national polytechnique de Toulouse, **2005**
- [74] **C.W.Hirt**, A.A.Amsden, J.L.Cook. An arbitrary lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds. Journal of computational physics, vol.14, pp. 227-253, **1974**
- [75] **D. Lornage**. Dynamique globale des lignes d'arbres de turbo machine. Laboratoire de mécanique des structures INSA, Lyon, **2003**
- [76] **Ftao**. Numerical implementation, **2003**
- [77] **Ftao**. Governing equations, **2003**
- [78] **S. Yang**. Notes on the Numerical Scheme for Governing Equations in KIVA, **2007**
- [79] **J. Kim, S. Wook Park, 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**
- [80] **M. T. Chassain**. La combustion, l'université paul sabatier de Toulouse, **2003**
- [81] **T. Donato**. Modelling of Soot Formation and Oxidation, University of Salento, Italy, **2001**
- [82] **A. V. Kumar**, H. Ishii, Y. Goto. Development of a Soot Module for Simulating Soot Emission from Diesel Engines using a Three Dimensional KIVA Code, Kotsu Anzen Kankyo Kenkyujo Kenkyu Happyokai Koen Gaiyo, 2, pp. 157-162, **2002**
- [83] **N.N. Semenov**. Some problems of chemical kinetics and reactivity, Izd –vo SSSR, **1958**
- [84] **D. Jung**, D. N. Assanis. Multi –Zone DI Diesel Spray Combustion Model for Cycle Simulation Studies of Engine Performance and Emissions, SAE paper 1246, **2001**
- [85] **P. Sovanna**. Moteurs thermiques : combustion et suralimentation, **2004**
- [86] **V. I. Golovitchev**, J. Hansson. Some Trend in Improving Hypersonic Vehicles, Aero dynamics and Propulsion, **2001**
- [87] **S.Yang**, Note on the Numerical Scheme for Governing Equations in Kiva, Proceedings, Conference of High Technology Development on ICE, Hefei, Anhui, China, pp. 1-6, **2003**
- [88] **K. Roth**. Soot Formation during the Production of Syngas from the Partial Oxidation of Diesel Fuel, Berichte ans der Energietechnik, Germany, **2007**
- [89] **P.R. Teakle**. a numerical investigation of a two-stroke poppet-Valved diesel engine concept. Queensland University of Technology, **2004**
- [90] **Correa, S. M.** A review of Nox formation under gas turbine combustion conditions. Comb. Sci. and Tech., vol. 87, pp. 329-362, **1992**.
- [91] **A. Agarwal**, D. Assanis, W. E. Lay. Multi-dimensional modeling of ignition, combustion and nitric oxide formation in direct injection natural gas engines. Automotive Laboratory, the University of Michigan, **2000**
- [92] **R. D. Reitz** Computational Fluid Dynamics Modeling of Diesel Engine Combustion and Emissions, Engine Research Center , University of Wisconsin-Madison, **2005**
- [93] **C. Thumthae**, C. Sangkasem, C. Charoenphonphanich. Study of Fuel Assisted Injection in a Direct Injection Diesel Engine by Kiva3V_lite, **2003**
- [94] **R. P. Hessel**. How to Use the kiva3v_lite Suite, engine research center, **2002**
- [95] **R.P. Hessel**. Coarse mesh CFD: Trend Analysis In a fraction of the time, engine Research center, university of Wisconsin – Madison.**2001**
- [96] **A. Risi**, D. F. Manieri, D. Laforgia. A Theoretical Investigation on the Effects of Combustion Chamber Geometry and Engine Speed on Soot and NOx Emissions,

- Università degli Studi di Lecce, Italy, **2004**
- [97] **K. Vlášek**. Modelling of combustion by means of kiva 3 focused on soot simulation. Czech Technical University in Prague, **2001**
- [98] **A. A. Amsden**. KIVA 3V code, Los Alamos National Laboratory, 1997, <http://t3.lanl.gov/Kiva/Kiva.html>
- [99] **S. C. Kong**, Z. Han and R. D. Reitz. The Development and Application of a diesel Ignition and Combustion Model for Multidimensional Engine Simulation, SAE Technical Paper 950278, **1995**
- [100] **H. Hiroyasu**. Diesel Engine Combustion and Its Modeling, International Symposium COMODIA, **1994**
- [101] **P. Belardini**, C. Bertori. A coupled diesel combustion and soot formation Model for kiva2 code: characteristics and experimental validation, international symposium COMODIA 94, CNR, Italy, **1994**
- [102] **K.M. Leung lindsedt**, W.P Jones. A simplified reaction mechanism for soot formation in non-premixed Flames, combustion and flames vol.87, pp.289-305, **1991**
- [103] **Belardini. P**, Sertoli. C. Multi-Dimensional Modeling of Combustion and Pollutants Formation of New Technology Light Duty Diesel Engines, Rev. IFP, Vol. 54, No. 2, pp. 251-257, 1999
- [104] **B. Stanislav**, J. MARTINS. The development of gas engines for buses and trucks and their emission and cycle variability characteristics, **2001**
- [105] **G. Dayma**. Aspects physico-chimiques, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI. **2007**
- [106] Fiche toxicologique sur les oxydes d'azote, **INRS**
- [107] **F. Payri**. Combustion and Exhaust Emissions in a Heavy-Duty Diesel Engine with Increased Premixed Combustion Phase by Means of Injection Retarding, Universidad Politécnica de Valencia, Camino de Vera s/n, 46022 Valencia – Spain, **2006**
- [108] **J. Kusaka**. Numerical Study on Diesel Combustion Using a Computational Fluid Dynamics Code Accounting for the Finite-rate Elementary Chemical reaction (Analysis under EGR Conditions), Waseda university, **2006**
- [109] **P. L. Pommier**. Modélisation de l'interaction entre la cinétique chimique et la turbulence : Application à la combustion HCCI, INRIA, **2007**
- [110] **C. Y. Choi**, G. R. Bower, R. D. Retiz. Mechanisms of emissions reduction using biodiesel fuels, Engine Research Center, University of Wisconsin– Madison, **1997**
- [111] **A. S. Gowd**, V. Ganesan, K. Rajagopal, Prediction of In-Cylinder Flow in DI Diesel Engine with RNG k – ϵ Model, Andhra, **2007**
- [112] **Yannick Dhué**. Etude numérique et expérimentale de l'influence de l'humidité de l'air sur la combustion. Application aux stratégies de réduction d'émissions polluantes et de consommation des moteurs à pistons, Thèse de Doctorat à l'Université de Toulouse, **2009**
- [113] **pascal giansetti**. Estimation / prédiction de la masse et de la composition du mélange enfermé dans le cylindre. Thèse de doctorat à l'université d'orleans, **2005**
- [114] **K. Kannan**, M. Udayakumar. Modeling of Nitric Oxide Formation in Single Cylinder Direct Injection Diesel Engine Using Diesel-Water Emulsion, India, **2009**
- [115] **S. Labor**. Étude expérimentale d'une flamme de diffusion oxygène - hydrogèneensemencée en particules solides d'alumine, Thèse de doctorat a l'école centrale de Lyon, 2003
- [116] **K.Miet**. Etude expérimentale de la dégradation hétérogène des Composés Aromatiques Polycycliques (CAP) d'intérêt troposphérique, Thèse de doctorat à L'université bordeaux I, 2008
- [117] **C. Crua**. Combustion Processes in a Diesel Engine, Thèse de doctorat à L'université

- de Brighton, **2002**
- [118] **Y. M. Wright**. Numerical investigation of turbulent spray combustion with conditional moment closure, PhD thesis in Swiss federal institute of technology Zurich, **2005**
- [119] **C. Schwerdt**. Modelling NO_x-Formation in Combustion Processes, Lund University, **2006**
- [120] **F. Tabet-Helal**, B. Sarh, I. Gökalp. A Comparative Study of Turbulence Modelling in Diluted Hydrogen non-premixed Flames, IFRF Combustion Journal. Vol.3, pp. 1-41, **2008**
- [121] **A. R. Noori**. Prediction of heat flux distribution in PAYKANE Engine combustion chamber using KIVA-3V CFD Code, Shiraz University, **1999**
- [122] **H.P. Trinh**. Modeling of Turbulence Effect on Liquid Jet Atomization, Marshall Space Flight Center, MSFC, Alabama, **2007**
- [123] **W. A. I. Abdelghaffar**. Modelling of Fuel Droplet Heating in Diesel Engines, Thèse de doctorat à l'université de Brighton, **2005**
- [124] **A. Gel**. a distributed-memory implementation of kiva-3 with refinements for large eddy simulation, PhD thesis, West Virginia University, **1999**
- [125] **G. Delay**. Analyse des écoulements transitoires dans les systèmes d'injection directe essence effets sur l'entraînement d'air instationnaire du spray, Thèse de doctorat à l'institut national polytechnique de Toulouse, **2005**
- [126] **I. Glassman**. Combustion, Second Edition, Princeton University, **1987**
- [127] **S. Andersson**, Combustion Physics, Thermo and Fluid Dynamics, Chalmers, **1999**
- [128] **M. Ghazikhani**, M. R. Kalateh, Y. K. Toroghi, M. Dehnavi. An Experimental Study on the Effect of Premixed and Equivalence Ratios on CO and HC Emissions of Dual Fuel HCCI Engine, journal Engineering and Technology, vo.52, pp. 129-135, **2009**
- [129] **I. Zahmatkesh**, M. Moghiman. On the suitability of soot formation models in turbulent flames: a comparison study, Emirates Journal for Engineering Research, vol.11, pp. 89-98, **2006**
- [130] **K. Akihama**, Y. Takatori, K. Inagaki. Mechanism of the Smokeless Rich Diesel Combustion by Reducing Temperature, Colorado School of Mines, Golden, **2001**
- [140] **B. Fasolo**, P. Gastaldi. La combustion dans les moteurs Diesel, Renault Powertrain Division, **2002**
- [141] **D. Maroteaux**, B. Fasolo. Cours de combustion DI. D.M. / D.S.A. / Sce 62121 Renault, **1997**
- [142] **F. Xu**, **A.M. El-Leathy**, C.H. Kim, G.M. Faeth. Soot surface oxidation in hydrocarbon/air diffusion flames at atmospheric pressure. Combustion and Flame. 132, 43–57, **2003**
- [143] **R. Dorai**, M. J. Kushner. Repetitively Pulsed Plasma Remediation of NO_x in Soot Laden Exhaust Using Dielectric Barrier Discharges, J. Phys. D: Appl. Phys., 35, 2954, **2002**.
- [144] **G.W. Smith**. Kinetic aspects of diesel soot coagulation. SAE Paper_No. 820466, **1982**
- [145] **I. garand**. Combustion par autoinflammation, **2009**
- [146] [www. Écoulements avec réaction de combustion.fr](http://www.Écoulements avec réaction de combustion.fr)
- [147] **G. Plassat**. Les systèmes de NO_x et leur évaluation, ADEME, **2005**
- [148] **A. Arbeau**. Étude de l'entraînement d'air dans un spray haute pression. diagnostics optiques et application a l'injection diesel, Thèse de doctorat a l'institut national polytechnique de Toulouse, **2004**