

Chapitre 3 : Modélisation de la combustion dans les moteurs thermiques

3.1 Introduction :

Les caractéristiques d'un modèle de combustion comprennent la prédiction du taux de combustion, de la température et de la pression dans le cylindre. Ces paramètres sont étroitement liés aux performances du moteur (le couple et la puissance). Différents types de modèles de combustion ont été développés et peuvent être classés en trois catégories, en fonction de leur complexité: les modèles à dimension zéro (0D), les modèles quasi-dimensionnels (1D) et les modèles multidimensionnel (3D).

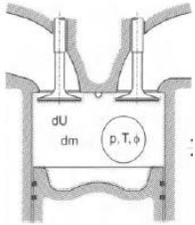
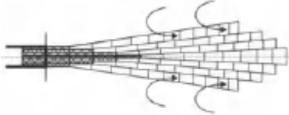
Thermodynamique (0-dimensionnel) <ul style="list-style-type: none"> ▪ fonction de dégagement de chaleur empirique ; ▪ pas de formation de polluants 	Phénoménologique (quasi-dimensionnel) <ul style="list-style-type: none"> ▪ sous-modèles physiques et chimiques ; ▪ pas de champ d'écoulement turbulent 	CFD (multidimensionnel) <ul style="list-style-type: none"> ▪ conservation de la masse, de l'énergie et de la quantité de mouvement ▪ sous-modèles physiques et chimiques détaillés
 <p>Equations différentielles ordinaires=f(temps)</p>	 <p>Equations différentielles ordinaires =f (x, t)</p>	 <p>Equations aux dérivées partielles =f (x, y, z, t)</p>

Fig.1 : Classification des modèles de combustion

- 1) Les modèles zéro dimension prédisent et analysent les caractéristiques des propriétés thermodynamiques du moteur. ces modèles sont subdivisées en deux catégories selon le nombre de zones utilisées, une zone ou deux zones. Les modèles à dimension zéro sont basés sur la première loi de la thermodynamique appliquée à un cycle fermé lorsque les soupapes d'admission et d'échappement sont fermées (c'est-à-dire pendant la période de compression et de combustion). Par conséquent, le modèle à dimension zéro convient pour observer les effets de la variation du taux de dégagement de la chaleur et des paramètres de pression dans le cylindre du moteur.

- 2) Les modèles quasi-dimensionnels peuvent être classés entre les modèles thermodynamique et multidimensionnel, (Fig. 2). Dans ces modèles, la chambre de combustion est généralement divisée en plusieurs zones qui sont caractérisées par des températures et des compositions différentes. L'avantage des modèles phénoménologiques ou quasi-dimensionnels par rapport aux modèles CFD est que les hypothèses simplificatrices faites ont pour effet que seules les équations différentielles ordinaires par rapport au temps doivent être résolues. Ceci contraste avec les équations différentielles partielles en ce qui concerne le temps et l'espace qui doivent être résolues avec les codes CFD et en plus de la résolution spatiale réduite et des sous-modèles qui ne sont généralement pas aussi détaillés que ceux utilisés dans la modélisation CFD, conduit à une réduction substantielle du temps de calcul qui peut être aussi importante (Fig. 2).

- 3) Les modèles multidimensionnels qui sont basés sur les solutions résolues localement de conservation de la masse, de l'énergie et de la quantité du mouvement et qui incluent des sous-modèles détaillés

pour les phénomènes de pulvérisation et de combustion, sont coûteux et exigent que l'utilisateur ait une compréhension beaucoup plus approfondie de gérer les processus physiques et chimiques afin d'interpréter correctement les résultats de la simulation. De plus, la qualité prédictive par rapport aux grandeurs globales telles que la pression et les taux de dégagement de la chaleur apparents n'est pas nécessairement meilleure qu'avec des modèles plus simples.

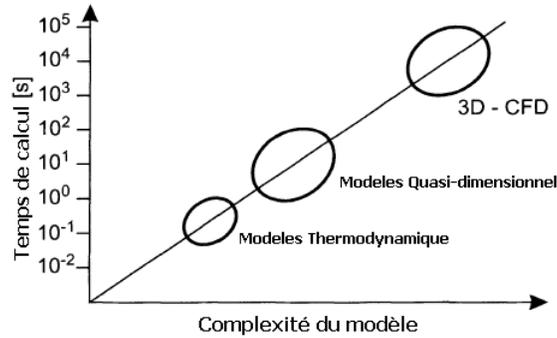


Fig. 2 : Exigences de calcul approximatives pour les modèles de combustion

3.2 Principes thermodynamiques fondamentaux

En général, un système thermodynamique ouvert avec des entrées et de sorties transitoires comme le montre la figure 3 peut être décrit par des bilans de masse et d'énergie. Le changement de masse contenu dans le volume de contrôle est égal à la différence entre tous les flux massiques entrants et sortants, \dot{m}_e and \dot{m}_s respectivement:

$$\frac{dm_{vc}}{dt} = \sum_e \dot{m}_e - \sum_s \dot{m}_s \quad (1)$$

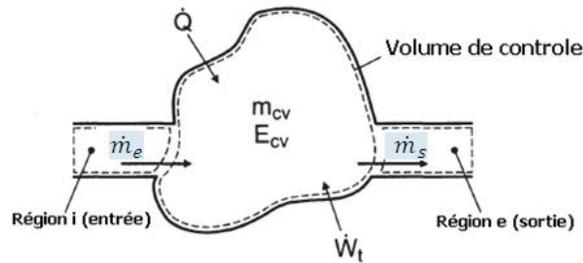


Fig. 3 : Schéma d'un volume de contrôle ouvert avec entrées et sorties transitoires

Le bilan énergétique (en appliquant la première loi de la thermodynamique) pour un volume de contrôle est donné par:

$$\frac{dE_{vc}}{dt} = \dot{Q} + \dot{W}_t + \sum_e (\dot{m}_e h_e) - \sum_s (\dot{m}_s h_s) \quad (2)$$

Où \dot{W}_t représente le travail mécanique fourni par le système par unité du temps et \dot{Q} , la chaleur fournie au système par unité du temps. Si les variations des énergies potentielle, cinétique et gravitationnelle de la

masse dans le système sont négligées, la variation de l'énergie totale dE_{vc} est égale à la variation de l'énergie interne dU_{vc} et l'équation (2) peut être donnée sous la forme suivante :

$$\frac{dU_{vc}}{dt} = \dot{Q} + \dot{W}_t + \sum_e (\dot{m}_e h_e) - \sum_s (\dot{m}_s h_s) \quad (3)$$

3.3 Modèle de cylindre à zone unique (Modèle à une zone)

3.3.1 Bilans massiques et énergétiques

Le nom du modèle à zone unique vient du fait que le contenu de la chambre de combustion est supposé être mélangé à tout moment de manière homogène. Ainsi, l'état thermodynamique du fluide est seulement en fonction du temps, mais il ne dépend pas de la position dans l'espace intérieur du cylindre. Avec cette hypothèse, toute la chambre de combustion peut être choisie comme volume de contrôle pour lequel les bilans massique et énergétique sont appliqués selon les formes générales données par les Eqs. 1 et 3, respectivement.

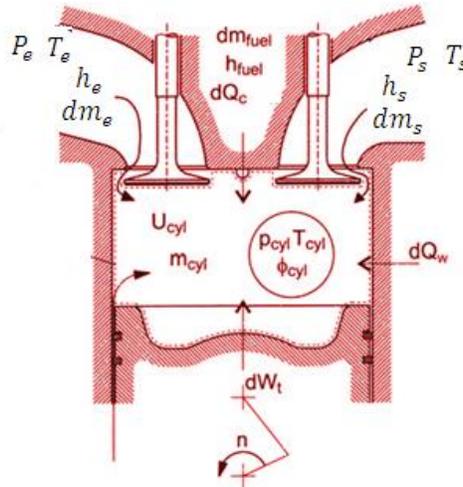


Fig. 4 : Modèle de cylindre à zone unique

La figure 4 montre une chambre de combustion typique d'un moteur qui est entourée par la chemise, la tête de piston, la culasse et les soupapes d'admission et d'échappement qui relie la chambre de combustion aux collecteurs. De plus, la limite du volume de contrôle ainsi que les propriétés thermodynamiques et les flux de masse et d'énergie pour établir les équations d'équilibre sont inclus. Selon le schéma représenté ci-dessus, et en considérant par convention de signe que, tous les flux massiques et énergétiques dirigés vers le système ont des valeurs **positives** et que tous les flux dirigés en dehors du système ont des valeurs **négatifs**, le bilan massique de la chambre de combustion peut être écrit comme suit :

$$\frac{dm_{cyl}}{dt} = \frac{dm_e}{dt} - \frac{dm_s}{dt} + \frac{dm_{fuel}}{dt} \quad (4)$$

Et le bilan énergétique est donné par :

$$\frac{dU_{cyl}}{dt} = \frac{dQ_c}{dt} - \frac{dQ_p}{dt} + \frac{dW}{dt} + \frac{dm_e}{dt} h_s - \frac{dm_s}{dt} h_e + \frac{dm_{fuel}}{dt} h_{fuel} \quad (5)$$

Q_p : Quantité de chaleur dissipée à travers les parois du cylindre ;

Q_c : Quantité de chaleur dégagée par le processus de combustion ;

Le modèle peut être présenté en fonction de l'angle de vilebrequin par les équations suivantes:

$$\frac{dm_{cyl}}{d\theta} = \frac{dm_e}{d\theta} - \frac{dm_s}{d\theta} + \frac{dm_{fuel}}{d\theta} \quad (6)$$

$$\frac{dU_{cyl}}{d\theta} = \frac{dQ_c}{d\theta} - \frac{dQ_p}{d\theta} - P_{cyl} \frac{dV_{cyl}}{d\theta} + \frac{dm_{fuel}}{d\theta} h_{fuel} \quad (7)$$

3.3.2 Travail mécanique

Le taux de travail fourni par le système (dW/dt) peut être calculé à partir de la pression du cylindre et la variation de volume du cylindre.

$$\frac{dW}{d\theta} = -P \frac{dV_{cyl}}{d\theta} \quad (8)$$

$$\frac{dV_{cyl}}{d\theta} = -\frac{\pi}{4} D^2 \frac{dz}{d\theta}$$

D : diamètre d'alésage (diamètre du piston);

z : le déplacement du piston, $z = z_1 + z_2$

Pour une configuration standard du mécanisme **bielle-manivelle** avec des axes croisés du piston et du vilebrequin, comme illustré sur la Fig.5, les relations suivantes s'appliquent:

$$c = a \cdot \sin \theta$$

a : rayon de manivelle.

$$z_1 = a \cdot \cos \theta$$

$$z_2 = \sqrt{l^2 - c^2} = \sqrt{l^2 - a^2 \sin^2 \theta}$$

l : la longueur de la bielle.

$$z = z_1 + z_2 = a \cdot \cos \theta + \sqrt{l^2 - a^2 \sin^2 \theta}$$

Ainsi, la dérivée de z par rapport à l'angle de vilebrequin θ peut être exprimée comme suit:

$$\frac{dz}{d\theta} = -a \cdot \sin \theta - \frac{a^2 \sin 2\theta}{2\sqrt{l^2 - a^2 \sin^2 \theta}}$$

Où θ est lié au temps par la vitesse de rotation du moteur:

$$d\theta = \omega dt = (2\pi n/60) dt$$

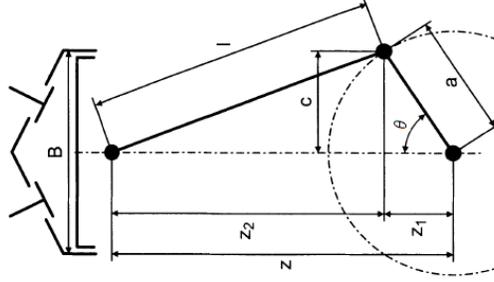


Fig.5 : Géométrie du mécanisme de bielle-manivelle

L'équation 8 devient :

$$\frac{dW}{d\theta} = P \left(\frac{\pi}{4} D^2 \right) \left(a \cdot \sin \theta + \frac{a^2 \sin 2\theta}{2\sqrt{l^2 - a^2 \sin^2 \theta}} \right) \quad (9)$$

3.3.3 Taux apparent net de dégagement de la chaleur :

$$\frac{dU}{d\theta} = \frac{dW}{d\theta} + \frac{dQ_n}{d\theta} = -P \frac{dV}{d\theta} + \frac{dQ_c}{d\theta} - \frac{dQ_p}{d\theta} \quad (10)$$

Pour la solution du bilan massique et énergétique, nous avons besoin de l'équation d'état des gaz parfait :

$$PV = mRT \quad (11)$$

$$\frac{dU}{d\theta} + P \frac{dV}{d\theta} = \frac{dQ_c}{d\theta} - \frac{dQ_p}{d\theta}$$

$$\frac{dQ_c}{d\theta} - \frac{dQ_p}{d\theta} = mC_v \frac{dT}{d\theta} + P \frac{dV}{d\theta}$$

$$\frac{dQ_c}{d\theta} - \frac{dQ_p}{d\theta} = \frac{PV}{RT} C_v \frac{dT}{d\theta} + P \frac{dV}{d\theta} \quad (12)$$

En utilisant la méthode différentielle logarithmique, l'équation d'état (11) devient :

$$\frac{dP}{P} + \frac{dV}{V} = \frac{dm}{m} + \frac{dR}{R} + \frac{dT}{T}$$

En supposant que la masse du cylindre est constante, avec R représente la constante des gaz on obtient :

$$\frac{dP}{P} + \frac{dV}{V} = \frac{dT}{T} \quad (13)$$

En remplaçant $\frac{dT}{T}$ par $\left(\frac{dP}{P} + \frac{dV}{V}\right)$ de 13, l'équation 12 devient :

$$\begin{aligned}\frac{dQ_c}{d\theta} - \frac{dQ_p}{d\theta} &= \frac{PV}{R} C_v \frac{\left(\frac{dP}{P} + \frac{dV}{V}\right)}{d\theta} + P \frac{dV}{d\theta} \\ \frac{dQ_c}{d\theta} - \frac{dQ_p}{d\theta} &= \left(\frac{C_v}{R}\right) V \frac{dP}{d\theta} + \left(1 + \frac{C_v}{R}\right) P \frac{dV}{d\theta}\end{aligned}\quad (14)$$

C_p, C_v et R sont liées par :

$$C_p - C_v = R; \quad \frac{C_p}{C_v} = \gamma;$$

Tels que :

C_p : Chaleur spécifique du fluide moteur à pression constante en [kJ/kg. K] ;

C_v : Chaleur spécifique du fluide moteur à volume constant en [kJ/kg. K] ;

γ : Coefficient adiabatique.

$$\begin{cases} C_v = \frac{R}{\gamma - 1} \\ C_p = \frac{\gamma R}{\gamma - 1} \end{cases}$$

$$\frac{dQ_c}{d\theta} - \frac{dQ_p}{d\theta} = \left(\frac{1}{\gamma - 1}\right) V \frac{dP}{d\theta} + \left(\frac{\gamma}{\gamma - 1}\right) P \frac{dV}{d\theta}\quad (15)$$

3.4 Modèle de cylindre à deux zones

Dans le modèle à deux zones, le fluide est supposé être constitué de deux zones, une zone imbrûlée et une zone brûlée. Ces deux zones sont en fait deux systèmes thermodynamiques distincts avec des interactions d'énergie et de masse entre eux-mêmes et leur environnement commun. Ce modèle a acquis une certaine importance pour le calcul de la formation de NOx, car le taux de dégagement de chaleur est donné à l'avance. L'idée de base du modèle est schématisée sur la figure 6.

La zone 2 doit contenir un mélange imbrûlé, c'est-à-dire de l'air et du carburant, qui sera désigné ci-après comme zone imbrûlée et décrit avec les quantités d'état P, V_i, T_i, n_i et λ_i .

La zone 1 doit contenir du mélange brûlé, ou plus précisément du combustible incomplètement oxydé, et sera par la suite désignée comme zone brûlée et décrite avec les grandeurs d'état P, V_b, T_b, n_b et λ_b . Dans la zone 1, une "oxydation secondaire" se produit. Pour cela, des modèles cinétiques réactionnels sont nécessaires.

Le front de la flamme sépare ces deux zones. Il est supposé être infiniment mince et sans masse. «L'oxydation primaire» a lieu dans le front de flamme jusqu'à l'équilibre OHC, c'est-à-dire que les

composants OHC, O, H, O₂, H₂, H₂O, CO, CO₂ et HO sont en équilibre chimique dans le front de la flamme.

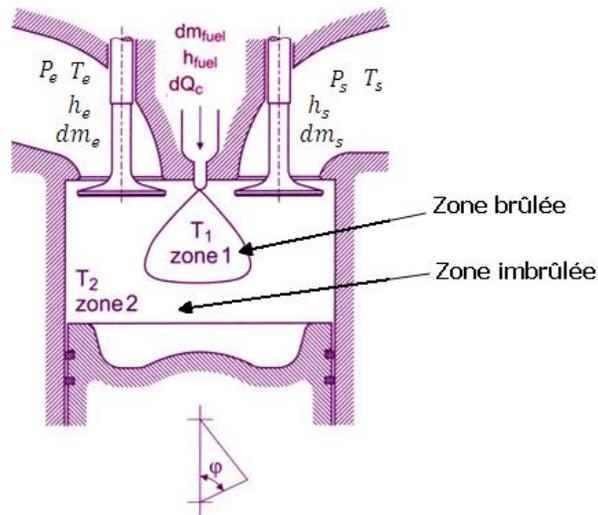


Fig.6: Modèle à deux zones

Le calcul des états dans les deux zones est mis en place sur la solution du modèle zone unique de zéro dimension et repose en outre sur les conditions et les hypothèses suivantes:

- ✓ Conservation de la masse et du volume pour les deux zones ;
- ✓ Comportement idéal des gaz pour les deux zones ;
- ✓ La chaleur de combustion est totalement libérée dans la zone 1 de réaction. La masse de combustible dans la zone 1 est donc donnée par le taux globale de dégagement de la chaleur et le pouvoir calorifique du combustible ;
- ✓ Le rapport d'équivalence dans la zone de réaction 1 est constant dans le temps;
- ✓ La différence de température entre les zones 1 et 2 a un maximum au début de la combustion et se réduit à zéro à l'ouverture de la soupape d'échappement en raison du transfert d'énergie entre les deux zones.

3.4.1 Bilans massiques et énergétiques

Le modèle thermodynamique à deux zones exprime la conservation de la masse et de l'énergie à l'intérieur de la chambre de combustion. Afin d'écrire ces équations en fonction de l'angle de fermeture de la soupape d'admission à l'angle d'ouverture de la soupape d'échappement, certaines hypothèses simplificatrices doivent être faites. Pour commencer, la masse totale est conservée, puisqu'aucune perte par coupure n'est supposée.

$$\dot{m}_l + \dot{m}_b = \dot{m}_{cyl} \quad (16)$$

Avant le début de la combustion, tout le contenu du cylindre est dans la zone 2 (imbrulée). Ensuite, la masse est soustraite de la zone 2 et ajoutée à la zone 1 (brulée) à la fois par combustion à travers le front de la flamme (FF) et par le mélange turbulent qui est supposé de subir un entraînement direct d'air non brûlé dans la zone 2.

L'équation de **conservation de la masse** pour chaque zone, peut s'écrire comme suit:

$$dm_i = dm_f - dm_b = dm_f - dm_{FF} - dm_{i,b} \quad (17)$$

$$dm_b = dm_{FF} + dm_{i,b} \quad (18)$$

Le volume du cylindre est égal à la somme des volumes des deux zones brûlée et imbrûlée :

$$V_i + V_b = V_{cyl} \quad (19)$$

Les volumes de chaque zone sont liés aux masses, températures et à la pression du cylindre par la loi des gaz parfaits:

$$P_i = P_b = P_{cyl}$$

$$P_{cyl} = \frac{m_i T_i R_i}{V_i} = \frac{m_b T_b R_b}{V_b} \quad (20)$$

L'équation de **conservation de l'énergie** pour chaque zone, peut s'écrire comme suit:

Zone imbrûlée

$$\frac{dU_i}{dt} = -P \frac{dV_i}{dt} + \frac{dQ_i}{dt} + \dot{m}_i h_i \quad (21)$$

Zone brûlée

$$\frac{dU_b}{dt} = -P \frac{dV_b}{dt} + \frac{dQ_b}{dt} + \dot{m}_b h_b \quad (22)$$

3.4.2 Transfert de chaleur

Le dégagement de la chaleur et la fraction massique brûlée sont apparents puisqu'ils sont obtenus indirectement à partir de la mesure de la pression dans le cylindre. La précision est limitée à la fois par les hypothèses des données de pression et par le modèle. Les équations correspondantes pour les deux zones imbrûlée et brûlée peuvent être écrites comme suit:

$$-Q_{p,i} - PV_i + m_i h_i = \overline{m_i u_i} \quad (23)$$

$$Q_c - Q_{p,i} - PV_b + m_i h_i = \overline{m_b u_b} \quad (24)$$

3.5 Modèles multizones

Ces modèles prennent en compte un certain nombre de zones (de produits) différentes générées dans un ordre séquentiel au cours de la combustion. Comme indiqué sur la figure 7, une zone nouvellement construite, se compose initialement des produits de combustion (à partir du front de la flamme) de telle sorte qu'ils sont caractérisés par un rapport d'équivalence stœchiométrique et une température de flamme adiabatique.

Un système de N zones (fig. 8 a un volume, pression et une masse (V, P et m)). Le changement de volume du système et le transfert de masse de la zone i à la zone j (dV et dm_{ij}) sont supposés connus, et la masse d'une zone peut être facilement déterminée en intégrant les flux massiques entrant et sortant de la zone. L'évolution des quantités restantes (P, V_i et $T_i, i = 1, 2, \dots, N$) est inconnue et reste à déterminer.

Hypothèses supplémentaires du modèle multi-zone:

- Le volume du cylindre est divisé en un nombre prédéterminé de zones ;
- Chaque zone à son propre volume, température et masse (V_i, T_i et m_i pour la zone i) et composition de gaz;
- La pression dans chaque zone est la même et égale à la pression dans le cylindre.

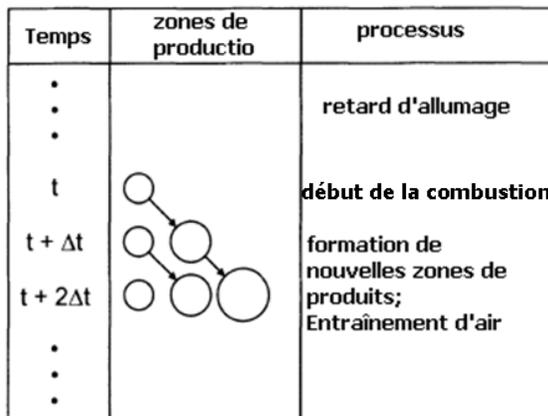


Fig. 7 : Génération séquentielle et entraînement d'air dans les zones de produits

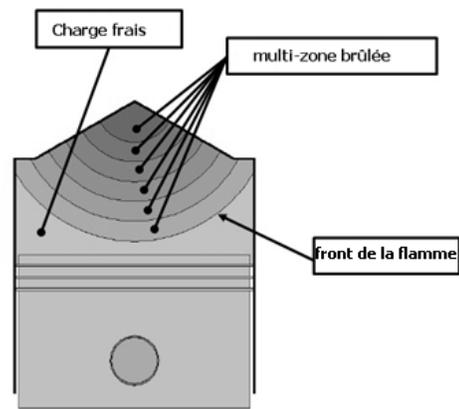


Fig. 8 : Modèles multizones

Le système se compose de N zones. Par conséquent, nous savons que la somme de tous les $V_i, i = 1, 2, \dots, N$, doit être la même que le volume de l'ensemble du système, c'est-à-dire :

$$dV = \sum_i dV_i \quad (25)$$

$$V_N = \frac{m_N R_N T_N}{P} \quad (26)$$

La loi de **conservation de la masse**, appliquée au cylindre, donne :

$$dm = d(m_{fuel} + m_{air} + m_r) \quad (27)$$

m_r : Masse de gaz résiduel.

L'équation du **bilan énergétique** pour la zone i est donnée par :

$$dU_i = -dQ_i - dW_i + \sum_{j \neq i} dm_{ij} h_{ij} \quad (28)$$

References:

Gunnar Stiesch, Modeling Engine Spray and Combustion Processes, Instit. of. Technische Verbrennung

Sebastián Galindo López, Three-Zone in-cylinder process model for DI diesel engines, Mechanical Systems and Integration.