



République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



## **Université Amar Thelidji- Laghouat**

**FACULTE de TECHNOLOGIE**  
**DEPARTEMENT de GENIE MECANIQUE**

### **THESE**

*Pour l'obtention du diplôme de :*

**DOCTORAT en Sciences**

**Spécialité : Energétique**

*Présentée par :* **BENHORMA Slimane**

### **Thème**

**Contribution à l'étude de la combustion en mode HCCI et l'effet  
des EGR sur le déroulement de la combustion dans un moteur  
HCCI.**

**Soutenu publiquement le :26/10/2017**

**devant le jury :**

**Mr: Ahmed BENCHATTI, Professeur, U. A. T. Laghouat, Président.**

**Mr: Said BOUABDALLAH, Professeur, U. A. T. Laghouat, Examineur.**

**Mr: Mohamed TEGGAR, MCA, U. A. T. Laghouat, Examineur.**

**Mr: Yahia LASBAT, MCA, U. Z. A. Djelfa, Examineur.**

**Mr: Kouider RAHMANI, MCA, U. Z. A. Djelfa, Examineur.**

**Mr: Mokhtar AOUISSI, Professeur, U. A. T. Laghouat, Directeur de thèse.**

*Année universitaire 2016/2017*



République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



## **Université Amar Thelidji- Laghouat**

**FACULTE de TECHNOLOGIE**  
**DEPARTEMENT de GENIE MECANIQUE**

### **THESE**

*Pour l'obtention du diplôme de :*

**DOCTORAT en Sciences**

**Spécialité : Energétique**

*Présentée par :* **BENHORMA Slimane**

### **Thème**

**Contribution à l'étude de la combustion en mode HCCI et l'effet  
des EGR sur le déroulement de la combustion dans un moteur  
HCCI.**

**Soutenu publiquement le :26/10/2017**

**devant le jury :**

**Mr: Ahmed BENCHATTI, Professeur, U. A. T. Laghouat, Président.**

**Mr: Said BOUABDALLAH, Professeur, U. A. T. Laghouat, Examineur.**

**Mr: Mohamed TEGGAR, MCA, U. A. T. Laghouat, Examineur.**

**Mr: Yahia LASBAT, MCA, U. Z. A. Djelfa, Examineur.**

**Mr: Kouider RAHMANI, MCA, U. Z. A. Djelfa, Examineur.**

**Mr: Mokhtar AOUISSI, Professeur, U. A. T. Laghouat, Directeur de thèse.**



## Remerciements

*Tout d'abord je rends grâce à Dieu de m'avoir donné le courage et la volonté, ainsi que la conscience d'avoir pu terminer mon travail.*

*Mes remerciements vont tout d'abord à mon directeur de thèse Prof. Mokhtar AOUISSI, pour l'encadrement de ce travail, ses compétences, son amitié et sa disponibilité.*

*Je remercie également les membres du jury : Ahmed BENCHATTI : Prof à l'université Amar Thelidji – Laghouat, Said BOUABDALLAH : Prof à l'université Amar Thelidji – Laghouat, Mohamed TEGGAR : MCA à l'université Amar Thelidji – Laghouat, Yahia LASBAT : MCA à l'université de Djelfa et Kouider RAHMANI : MCA à l'université de Djelfa pour avoir accepté d'examiner ma thèse, pour tout l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail et pour leurs commentaires constructifs.*

*Mes vifs remerciements vont à tous les enseignants du département de Génie Mécanique de l'université Amar Thelidji – Laghouat qui ont veillé sur notre formation et qui ont tenu à faire accroître nos connaissances.*

*Enfin, merci de tout mon cœur à mes parents, à ma femme et mes enfants, à tout mes familles et à tous mes amis... pour leur patience et leur soutien tout au long de ces années.*



**Abstract:**

*Nowadays, the exhaust emissions of vehicle became very dangerous. Low temperature combustion in automotive engines becomes more and more important and it is achieved by high rates of Exhaust Gas Recirculation (EGR). EGR gases are used to dilute the fuel/air mixture in the engine and to control ignition delay times. In this work we will present a numerical study of the impact of various additives on the oxidation of a typical automotive surrogate fuel blend, i.e. n-heptane/toluene mixture. The tested engine was fueled with n-heptane/toluene by varying dilution with simulated Exhaust Gas Recirculation (EGR) at 0, 20,30,40,50 and 60 % when equivalence ratio, intake temperature and engine speed were kept constant at 0.4, 380 °k and 1500 rpm respectively . It examines the impact of EGR compounds on the operating parameters of homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine combustion -fueled by a mixture of heptane and toluene- and on the formation of emissions pollutant and how to reduce it. We used the CHEMKIN software and the combined chemical kinetics mechanism of the heptane and toluene to determine the exhausts gases composition. The numerical simulation is based on the code PSR (perfectly-Stirred Reactor). The influence of various additives, namely nitric oxide (NO) and ethylene (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) on the oxidation of n-heptane/toluene blend was studied with a different concentrations of NO and C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>. First, the NO addition guided to an inhibition, more or less important with added quantities, of cool flame, but an important promotion of main combustion. Second, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> had no impact on the cool flame ignition, but promoted the main combustion. In addition, the addition of EGR improved fuel economy, reduced NO<sub>x</sub> emissions and increased HC and CO emissions. Indeed; some components of the EGR gas species had a very significant effect on initiation of combustion, which gives a general idea about the control of combustion in HCCI mode.*

**Keywords:** *Combustion, Pollution, Kinetics mechanism, EGR, HCCI, Nitrogen oxides.*

**Résumé:**

*De nos jours, les émissions des gaz d'échappement devenaient très dangereuses. La combustion à basse température dans les moteurs automobiles devient de plus en plus importante et elle est obtenue grâce à des taux élevés de recirculation des gaz d'échappement (EGR). Les gaz EGR sont utilisés pour diluer le mélange carburant / air dans le moteur et pour contrôler les temps de retard d'allumage. Dans ce travail, nous présentons une étude*

numérique de l'impact de divers additifs sur l'oxydation d'un mélange typique de carburant d'automobile, c'est-à-dire le mélange de n-heptane / toluène. Le moteur testé a été alimenté avec du n-heptane / toluène en modifiant la dilution avec la recirculation de gaz d'échappement simulée (EGR) à 0, 20, 30, 40,50 et 60% lorsque le taux d'équivalence, la température d'admission et la vitesse du moteur ont été maintenues constantes à 0,4, 380 ° k et 1500 tr / min respectivement. Il examine l'impact des composés EGR sur les paramètres de fonctionnement de la combustion du moteur à allumage par compression à charge homogène (HCCI) - alimenté par un mélange d'heptane et de toluène - et sur la formation de polluants et comment les réduire. Nous avons utilisé le logiciel CHEMKIN et le mécanisme réactionnel de la cinétique chimique combinée de l'heptane et du toluène pour déterminer la composition des gaz d'échappement. La simulation numérique est basée sur le code PSR (Perfect-Stirred Reactor). L'influence de divers additifs, à savoir l'oxyde nitrique (NO) et l'éthylène (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) sur l'oxydation du mélange n-heptane / toluène a été étudiée avec des concentrations différentes de NO et de C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>. Tout d'abord, l'addition de NO a conduit à une inhibition, plus ou moins importante avec des quantités ajoutées, de flamme froide, mais une promotion importante de la combustion principale. Deuxièmement, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> n'a eu aucun impact sur l'allumage par flamme froide, mais a favorisé la combustion principale. En outre, l'ajout d'EGR a amélioré l'économie de carburant, réduit les émissions de NO<sub>x</sub> et a augmenté les émissions de HC et de CO. Effectivement, certains composants des espèces de gaz EGR ont eu un effet très important sur l'initiation de la combustion, ce qui donne une idée générale sur le contrôle de la combustion en mode HCCI.

**Mots-clés:** Combustion, Pollution, mécanisme cinétique, EGR, HCCI, oxydes d'azote.

#### ملخص:

في الوقت الحاضر انبعاثات الغازات المحترقة أصبحت خطيرة جدا. ان الاحتراق في درجة حرارة منخفضة داخل محركات السيارات يزداد أهمية أكثر فأكثر و يتحقق ذلك باعادة استخدام معدلات عالية من الغازات المحترقة. و تستعمل غازات EGR لتخفيف الخليط (وقود/هواء) و كذلك لأجل تأخير زمن الاشتعال. في هذا العمل نقدم دراسة عددية لتأثير اضافات مختلفة على أكسدة خليط نمودجي من وقود السيارات، بمعنى استعمال الخليط (n-heptane / toluène). وقد تمت تغذية محرك الاختبار باستخدام الخليط (n-heptane / toluène) المخفف بواسطة غازات EGR عند القيم التالية : 0 ، 20 ، 30 ، 40 ، 50 ، 60 % عندما يكون كل من معامل التكافؤ ، درجة حرارة مدخل المحرك و كذا

سرعة المحرك على التوالي: 0.4 ، 380°K و 1500 دورة/ثانية. درسنا تأثير مكونات *EGR* على العوامل المتحكممة في عملية الاحتراق داخل محرك يعمل بنظام ضغط كتلة متجانسة من الخليط (وقود/هواء) و الذي يرمز له بالرمز (*HCCI*) - هذا المحرك مغذى بخليط (*n-heptane / toluène*) - وكذا تأثيرها على الانبعاثات الملوثة و كيفية التقليل منها. استعملنا برنامج *CHEMKIN* و الية التفاعل الكيميائي لعنصرين مجتمعين في الية واحدة وهما *n-heptane* و *toluène* لأجل تعيين مكونات الغازات المنبعثة من المحرك. و تستند المحاكاة العددية على برنامج يسمى *PSR* . تمت دراسة تأثير المواد المضافة المختلفة وهي، أحادي أكسيد الأزوت (*NO*) و الاثلين (*C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>*) على أكسدة خليط (*n-heptane / toluène*) . بتراكيز مختلفة من *NO* و *C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>* . أولاً، مهما تكن الكمية المضافة من أكسيد الأزوت فانها تثبط شعلة اللهب البارد بينما تحفز اللهب على مستوى الاحتراق الرئيسي. ثانياً، ان اضافة الاثلين ليس لها تأثير و خاصة على مستوى اللهب البارد. و بالاضافة الى ذلك، فان تدوير غازات *EGR* لها اهية في تحسين اقتصاد الوقود و التقليل من انبعاث أكسيدات الأزوت و بالمقابل ترفع من انبعاث *HC* و أحادي أكسيد الكربون *CO* . في الواقع، بعض مكونات غازات *EGR* لها أهمية كبيرة في عملية الاحتراق، مما يعطينا فكرة عامة حول مراقبة الاحتراق داخل محرك ذو نوع *HCCI* .

**كلمات المفتاحية ( كلمات البحث) :** الاحتراق ، التلوث، آلية الحركية ، *HCCI* ، *EGR* ، أكاسيد النيتروجين.



**NOMENCLATURE..... 7****INTRODUCTION GENERALE..... 11****CHAPITRE I : Les émissions polluantes d'un moteur à combustion interne..... 14**

I.1	Introduction .....	14
I.2	Formation des émissions polluantes .....	16
I.2.1	Formation des oxydes d'azotes.....	16
I.2.1.1	Effet sur la santé.....	16
I.2.1.2	Effet sur l'environnement .....	17
I.2.1.3	Impact sur le changement climatique .....	17
I.2.1.4	Mécanismes de formation des oxydes d'azote.....	18
I.2.1.4.1	Le mécanisme du NO-thermique .....	18
I.2.1.4.2	Le mécanisme du NO-combustible.....	19
I.2.1.4.3	Le mécanisme du NO-précoce .....	20
I.2.1.4.4	Mécanisme de formation du NO à partir de N <sub>2</sub> O .....	21
I.2.1.4.5	Mécanisme de formation du NO à partir de NNH .....	22
I.2.1.4.6	Formation du NO <sub>2</sub> .....	22
I.2.1.4.7	Formation du N <sub>2</sub> O .....	22
I.2.2	Mécanismes de formation des particules de suies .....	23
I.2.2.1	Formation du premier cycle aromatique .....	23
I.2.2.2	Les particules et leurs effets sur la santé.....	27
I.2.3	La relation existée entre la formation des oxydes d'azote et des particules de suie.....	27
I.2.4	Formation du CO .....	28
I.2.5	Les hydrocarbures imbrûlés.....	29
I.3	La réduction des NO <sub>x</sub> et des particules .....	29
I.3.1	La réduction des NO <sub>x</sub> .....	29
I.3.2	Les systèmes de post-traitement des NO <sub>x</sub> .....	30

---

I.3.3	La réduction des émissions de particules.....	32
I.3.3.1	Réduction des émissions de particules par les filtres à particules .....	32
I.3.3.1.1	Filtres à particules fermés .....	32
I.3.3.1.2	Filtres à particules ouverts .....	32
I.3.3.2	Réduction des émissions de particules par les catalyseurs d'oxydation.....	33
I.4	Conclusion.....	33
<b>CHAPITRE II : Les moteurs à combustion interne et la technologie HCCI .....</b>		<b>34</b>
II.1	Introduction .....	34
II.2	Les moteurs thermiques et la technologie HCCI .....	34
II.2.1	Généralités sur les moteurs à combustion interne .....	34
II.2.1.1	Les moteurs diesel .....	35
II.2.1.1.1	Les moteurs à injection directe .....	36
II.2.1.1.2	Les moteurs à injection indirecte .....	36
II.2.1.1.3	Formation des polluants dans les moteurs Diesel .....	37
II.2.2	Les moteurs à allumage commandé (moteurs essence) .....	38
II.2.2	La combustion HCCI .....	40
II.3	Principe de fonctionnement de la combustion HCCI .....	41
II.3.1	Généralités sur l'oxydation des hydrocarbures.....	41
II.3.1.1	Domaine de basse température .....	42
II.3.1.2	Coefficient négatif de température CNT .....	42
II.3.1.3	Domaine de haute température .....	43
II.3.2	Comparaison entre le moteur HCCI et le moteur Diesel .....	44
II.3.3	Déroulement de la combustion HCCI .....	45
II.3.4	Les avantages et les inconvénients du moteur HCCI .....	46
II.3.5	Contrôle du moteur HCCI .....	48
II.3.6	Paramètres moteur influençant la combustion HCCI .....	50

---

II.3.6.1	Influence de la richesse .....	50
II.3.6.1.1	Influence sur le délai d'initiation .....	50
II.3.6.1.2	Influence sur le déroulement de la combustion et le dégagement de la chaleur d'initiation .....	50
II.3.6.2	Influence du régime moteur .....	51
II.3.6.2.1	Influence sur l'initiation de la combustion .....	51
II.3.6.2.2	Influence sur le dégagement d'énergie et la durée de combustion .....	52
II.3.6.3	Influence de la température d'admission .....	52
II.3.6.3.1	Influence sur l'initiation de la combustion .....	52
II.3.6.3.2	Influence sur le dégagement d'énergie et le déroulement de la combustion .....	53
II.3.6.4	Influence de la pression .....	53
II.4	Conclusion .....	54
<b>CHAPITRE III : La recirculation des gaz d'échappement .....</b>		<b>55</b>
III.1	Introduction .....	55
III.2	La recirculation des gaz d'échappement .....	55
III.2.1	Historique. ....	55
III.2.2	Les différents types de vanne EGR .....	55
III.2.3	Le principe des EGR .....	56
III.2.4	Les différents types des EGR .....	57
III.2.5	Les effets des EGR .....	57
III.2.6	Les EGR et les émissions polluantes .....	58
III.2.7	Les avantages des EGR .....	59
III.2.8	Les inconvénients des EGR .....	59
III.2.9	Description du dispositif et envisageable défaillance .....	59

---

III.2.10	Le taux de recirculation des gaz d'échappement .....	61
III.2.11	Les carburants .....	61
III.2.12	Formule du taux d'EGR .....	62
III.3	La composition des gaz brûlés recyclés .....	63
III.3.1	Impact des espèces inertes : CO <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> et H <sub>2</sub> O .....	63
III.3.2	Impact du CO sur la combustion .....	63
III.3.3	Impact des NO <sub>x</sub> sur la combustion .....	65
III.3.3.1	Régime des basses températures .....	65
III.3.3.2	Régime des températures intermédiaires NTC .....	66
III.3.3.3	Régime des hautes températures .....	66
III.3.4	Impact de la présence de NO <sub>2</sub> sur la combustion en moteur .....	67
III.3.5	Impact du formaldéhyde CH <sub>2</sub> O .....	68
III.3.5.1	Mécanisme d'oxydation du CH <sub>2</sub> O .....	68
III.4.6	Impact des hydrocarbures imbrûlés .....	69
III.5	Conclusion .....	71
<b>CHAPITRE IV :</b>	<b>Simulation et modélisation .....</b>	<b>72</b>
IV.1	Introduction .....	72
IV.2	Variables de la thermochimie .....	72
IV.3	Les équations de conservation .....	74
IV.3.1	Equations de conservation de masse et d'espèces .....	75
IV.3.2	Equations de la quantité de mouvement .....	75
IV.3.3	Equations de la conservation d'énergie .....	76
IV.4	Cinétique chimique .....	77
IV.5	Facteurs stœchiométriques .....	78
IV.6	Modélisation (simulation) .....	79
IV.6.1	Les outils de calcul .....	80

---

IV.6.1.1	Le logiciel CHEMKIN .....	80
IV.6.1.2	Le mécanisme réactionnel .....	81
IV.6.1.3	Les données thermodynamiques .....	82
IV.6.1.4	Le réacteur auto-agité PSR .....	84
IV.6.1.5	Le moteur HCCI .....	84
IV.7	Conclusion .....	84
<b>CHAPITRE V : Résultats et discussions .....</b>		<b>85</b>
V.1	Introduction .....	85
V.2	Influence du taux d'EGR .....	86
V.2.1	Influence du taux d'EGR sur le déroulement du fonctionnement du moteur HCCI .....	87
V.2.1.1	Influence du taux d'EGR sur la pression cylindre .....	87
V.2.1.2	Influence du taux d'EGR sur la température .....	88
V.2.2	Influence du taux d'EGR sur la formation des émissions polluantes du moteur HCCI .....	90
V.2.2.1	Influence du taux d'EGR sur la formation des oxydes d'azote .....	90
V.2.2.1.1	Influence du taux d'EGR sur la formation du NO .....	90
V.2.2.1.2	Influence du taux d'EGR sur la formation du NO <sub>2</sub> .....	92
V.2.2.2	Influence du taux d'EGR sur la formation des hydrocarbures imbrulés ..	93
V.2.2.3	Influence du taux d'EGR sur la formation du monoxyde de carbone ..	94
V.3	Influence de certaines espèces des EGR .....	96
V.3.1	Réacteur auto-agité .....	96
V.3.1.1	Influence de l'ajout du NO .....	96
V.3.1.2	Influence de l'ajout des hydrocarbures imbrûlés .....	99
V.3.1.2.1	Influence de l'ajout du C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> .....	99
V.3.1.3	Validation des résultats obtenus en PSR .....	101
V.3.1.3.1	Effet de l'ajout du NO sur la formation du CO .....	101

---

V.3.1.3.2	Effet de l'ajout du NO sur la formation du CO <sub>2</sub> .....	102
V.3.1.3.3	Effet de l'ajout du NO sur la formation du H <sub>2</sub> O .....	103
V.3.1.3.4	Effet de l'ajout du C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> sur la formation du CO .....	104
V.3.1.3.5	Effet de l'ajout du C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> sur la formation du H <sub>2</sub> O .....	105
V.3.2	Moteur HCCI .....	106
V.3.2.1	Influence de l'ajout du NO sur la combustion en mode HCCI. ....	106
V.3.2.2	Influence de l'ajout du NO Influence de l'ajout du NO sur les émissions polluantes .....	109
V.3.2.2.1	Sur les hydrocarbures imbrulés et le monoxyde de carbone ..	109
V.3.2.3	Influence de l'ajout du C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> sur la combustion en mode HCCI .....	111
V.4	Influences de l'ajout de deux espèces simultanément .....	112
V.4.1	Influence de l'ajout du NO avec l'éthylène. ....	112
V.4.2	Influence de l'ajout du NO avec du méthanol .....	114
V.4.3	Influence de l'ajout d'éthylène avec le méthanol. ....	115
V.4.4	Comparaison des résultats .....	117
	<b>CONCLUSION GENERALE.....</b>	<b>120</b>
	<b>REFERENCES.....</b>	<b>123</b>
	<b>ANNEXE .....</b>	<b>134</b>



**Nomenclature**

ATAC	Active Thermo Atmosphere Combustion
CAI	Controlled Auto Ignition
CFD	Computational Fluid Dynamics
CHEMKIN	Code and format for chemical kinetics modelling
DME	Diméthyles Ether
EGR	Exhaust Gas Recirculation
FAP	Filtre A Particules
GPL	Gaz de pétrole liquéfié
HAP	Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques
HC	Hydrocarbures imbrûlés
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition
NADI	Narrow Angle Direct Injection
NTC	Negative Temperature Coefficient
PCCI	Premixed Controlled Compression Ignition
PMB	Point Mort Bas
PMH	Point Mort Haut
PREDIC	Combustion Diesel pré-mélangée pauvre
PRF	Primary Reference Fuels
PSR	Perfect Steered Reactor
RON	Research Octane Number
SCR	Selective Catalytic Reduction
SNCR	Sélective Non Catalytique

---

$C_p$	Chaleur massique à pression constante [J/Kg. K]
$C_v$	Chaleur massique à volume constant [J/Kg. K]
$E_a$	Energie d'activation [J/mole]
$G^0$	L'enthalpie libre standard de Gibbs [J]
$H$	Enthalpie [J]
$h$	Enthalpie spécifique [J/kg]
$h_v$	Quantité de chaleur
$m$	Masse [kg]
$m_a$	Débit massique air [kg/s]
$m_e$	Débit massique d'EGR [kg/s]
$m_f$	Débit massique fuel [kg/s]
$m_k$	Masse de l'espèce $k$ [kg]
$p$	Pression [Pa]
$P_k$	Pression partielle
$Q$	Quantité de chaleur [J/mole. K]
$R_u$	Constante des gaz parfaits [J/mol. K]
$R$	Constante massique des gaz parfait [J/kg. K]
$S$	Entropie [J/mole]
$T$	Température [K]
$U$	Energie interne [J]
$V$	Volume [m <sup>3</sup> ]
$Y_k$	Fractions massiques de l'espèce $k$ [-]
$\rho_k$	Densité de l'espèce $k$ .

---

$W$	Masse moléculaire moyenne
$W_k$	Masse moléculaire de l'espèce $k$ .
$\lambda$	Coefficient d'excès d'air [-]
$\varphi$	Richesse [-]
$s$	Rapport stœchiométrique [-]

**Symboles chimiques**

$C_xH_y$	Hydrocarbure non spécifié
$CO$	Monoxyde de carbone
$CO_2$	Dioxyde de carbone
$CHO$	Aldéhyde
$CH_2O$	Formaldehyde
$CH_3$	Méthyle
$C_6H_6$	Benzène
$C_2H_3$	Vinyl Radical
$C_2H_2$	Acétylène
$C_4H_5$	Cyclobutenylium
$C_6H_7$	Cyclohexadienyl
$C_3H_3$	Propargyle
$H\cdot$	Radical hydrogène
$H_2$	Hydrogène
$H_2O$	Eau
$H_2O_2$	Peroxyde d'hydrogène
$HC$	Hydrocarbures imbrûlés
$HAP$	Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques
$(HOCN)_3$	Acide cyanurique
$HONO$	Nitrous Acid
$N_2$	Azote
$NH_3$	Ammoniac
$NO$	Monoxyde d'azote
$NO_2$	Dioxyde d'azote

---

$N_2O$	protoxyde d'azote
$O_2$	Oxygène
$O_3$	Ozone
$HCN$	Acide cyanhydrique
$CN$	Cyanide
$NCO$	Isocyanate
$HO_2$	Hydroperoxyde
$CH_4$	Méthane
$NO_x$	Oxydes d'azote
$O\cdot$	Radical oxygène
$OH\cdot$	Radical hydroxyle
$PM$	Particules (particulate matter)
$R\cdot$	Radical alkyl



# INTRODUCTION GENERALE

---

## INTRODUCTION GENERALE

Au siècle dernier, le développement de la combustion interne (CI) des moteurs a atteint un niveau élevé de succès. Ces moteurs ont été progressivement optimisés pour atteindre les meilleures performances. L'augmentation de la puissance du moteur et l'amélioration de sa fiabilité étaient les objectifs les plus importants pour les fabricants de moteurs. Mais ce processus de combustion produit des émissions qui polluent l'air et ainsi qui contribuent au changement climatique.

Le transport représente une source majeure de ces émissions. Le développement des moteurs diesel concentre sur la réduction des émissions à l'échappement, notamment des oxydes d'azote (NO<sub>x</sub>) et des particules de suies. Les technologies de réductions utilisées actuellement sont l'utilisation des recirculations des gaz d'échappement (EGR), pour la réduction des NO<sub>x</sub> et les filtres à particules pour réduire les suies et ainsi de remplacer le moteur Diesel conventionnel par un nouveau moteur à combustion interne qui fonctionne en charge homogène (l'apparition du moteur HCCI). Ce type de combustion engendre une diminution significative des particules et des NO<sub>x</sub>. Elle est principalement contrôlée par la cinétique chimique.

La combustion homogène par compression (Homogenous Charge Compression Ignition HCCI) est connue de plus longtemps, et ses applications sont plus difficiles jusqu'à maintenant.

L'allumage par compression à charge homogène HCCI est en cours de développement pour les moteurs diesel afin de réduire encore les émissions des NO<sub>x</sub> et des particules de suies. Le concept de combustion HCCI vise à bénéficier des avantages des moteurs à allumage commandé et des moteurs Diesel, donc, il combine les avantages des deux combustions classiques. Des mélanges air-combustible pauvres sont utilisés ce qu'il conduit à des températures de combustion basses. Ces conditions (richesse et température) résultent d'une très faible émission du NO<sub>x</sub>. Les bons rendements des moteurs HCCI (proche du rendement du moteur Diesel conventionnel) et leurs faibles émissions polluantes en font une voie particulièrement intéressante.

La combustion à charge homogène est initiée localement, lorsque les conditions thermodynamiques et de mélange requises sont atteintes suite à la compression des gaz. D'un

point de vue théorique, lorsque le mélange est parfaitement homogène, le carburant doit s'oxyder simultanément dans toute la chambre de combustion du moteur.

L'introduction du carburant dans la chambre de combustion d'un moteur HCCI se produit de manière très précoce. Ceci conduit à une relative homogénéité du mélange entre le carburant et le comburant au moment de la combustion et donc à une combustion essentiellement pré mélangée.

Le contrôle de la combustion HCCI est très difficile mais il y a des possibilités pour le contrôler à partir de la température, la pression, la composition chimique du mélange et ainsi par l'utilisation de la recirculation des gaz d'échappement.

Ce travail présente l'effet du taux de la recirculation des gaz d'échappement EGR sur l'initiation et le déroulement de la combustion HCCI, ainsi que sur la formation et la destruction des constituants polluants. Après l'étude de l'impact du taux des EGR sur la combustion HCCI, on étudiera de façon approfondie l'effet de certaines espèces du gaz d'échappement sur l'oxydation de l'heptane ce qui donne des notions essentielles sur l'initiation et le déroulement de la combustion HCCI, ainsi que sur la formation et la destruction des constituants polluants. On étudie aussi dans ce travail l'effet de quelques espèces des gaz d'échappement sur l'oxydation des alcanes (l'heptane dans notre cas) et plus précisément l'impact de deux espèces simultanées sur l'oxydation des hydrocarbures (l'heptane), bien sûr on a choisi le mode de combustion HCCI.

On a utilisé un logiciel qui s'appelle CHEMKIN. Ce logiciel est capable de calculer les fractions molaires après une combustion d'un mélange carburant/comburant. Ce code de calcul a besoin d'un mécanisme réactionnel pour faire tout le calcul, que ce soit les paramètres du moteur HCCI tels que, la pression cylindre, la température dans la chambre de combustion, ... et ainsi les fractions molaires des gaz d'échappement rejetés par ce moteur. On a combiné trois mécanismes réactionnels détaillés pour obtenir un mécanisme réactionnel développé qui peut donner des résultats presque proche de la réalité. Les trois mécanismes réactionnels qu'on a utilisés sont le mécanisme réactionnel détaillé de l'heptane, le mécanisme réactionnel détaillé du toluène et le mécanisme réactionnel détaillé du NOx.

Le présent document se compose de cinq chapitres : les trois premiers concernent une étude bibliographique portant respectivement sur un aperçu général sur la formation des rejets

---

d'un moteur à combustion interne, leurs effets et les techniques possibles pour la réduction, sur une présentation générale des moteurs conventionnels et en particulier le nouveau concept dit mode HCCI et un bref préliminaire a été effectué sur la recirculation des gaz d'échappement EGR. Les deux derniers chapitres abordent respectivement une brève description des équations nécessaires de la simulation des écoulements réactifs et ainsi la modélisation du moteur HCCI à l'aide du logiciel CHEMKIN, les résultats obtenus par la simulation numérique, leurs commentaires et leurs validations avec les résultats trouvés dans la littérature.

Enfin, nous terminerons par les conclusions et les perspectives d'évolution de ce travail.



**CHAPITRE I :**  
**Les émissions polluantes d'un  
moteur à combustion interne**

---

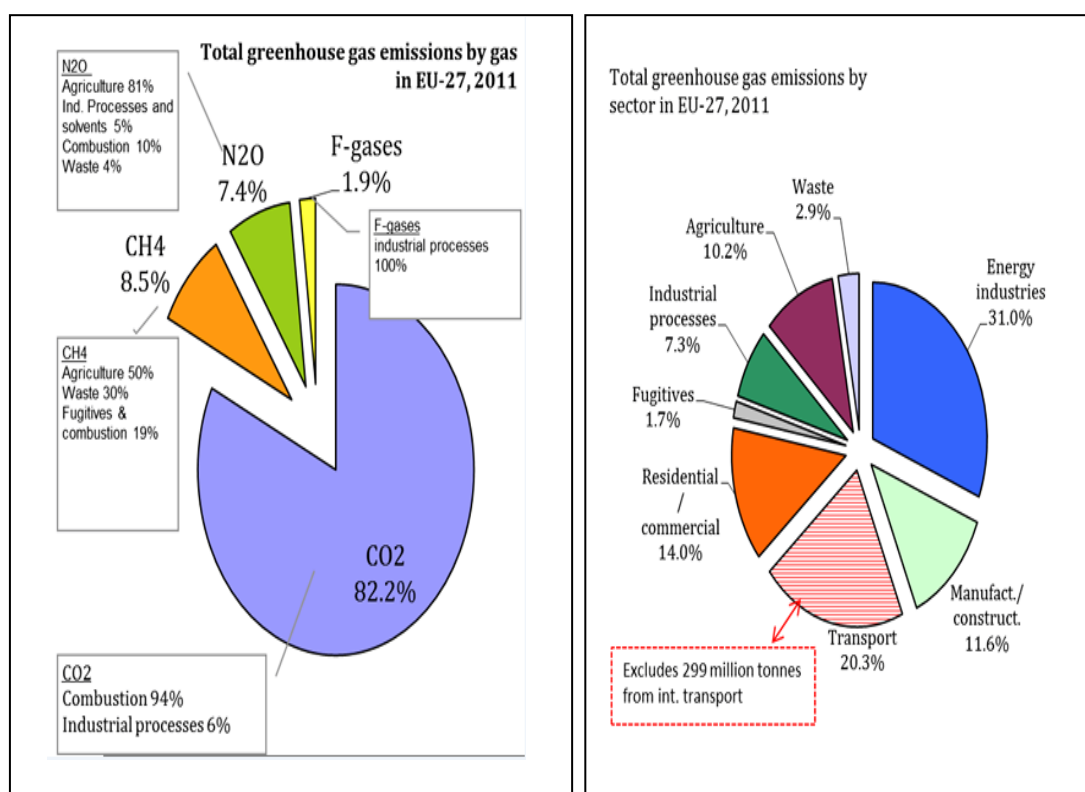
# CHAPITRE I :

## Les émissions polluantes d'un moteur à combustion interne

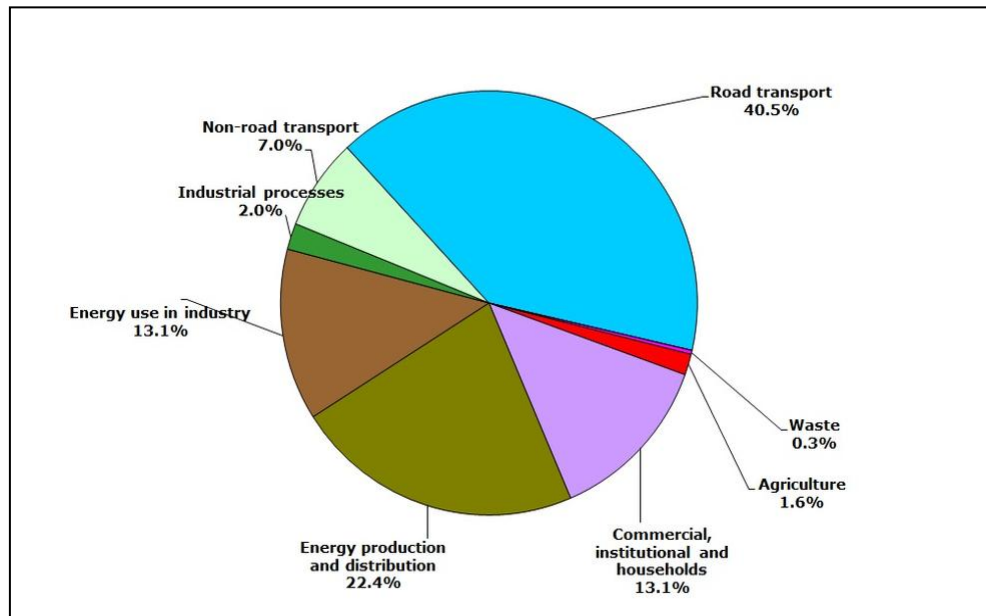
I.1	Introduction .....	14
I.2	Formation des émissions polluantes .....	16
I.2.1	Formation des oxydes d'azotes.....	16
I.2.1.1	Effet sur la santé.....	16
I.2.1.2	Effet sur l'environnement .....	17
I.2.1.3	Impact sur le changement climatique .....	17
I.2.1.4	Mécanismes de formation des oxydes d'azote.....	18
I.2.1.4.1	Le mécanisme du NO-thermique .....	18
I.2.1.4.2	Le mécanisme du NO-combustible.....	19
I.2.1.4.3	Le mécanisme du NO-précoce .....	20
I.2.1.4.4	Mécanisme de formation du NO à partir de N <sub>2</sub> O.....	21
I.2.1.4.5	Mécanisme de formation du NO à partir de NNH .....	22
I.2.1.4.6	Formation du NO <sub>2</sub> .....	22
I.2.1.4.7	Formation du N <sub>2</sub> O .....	22
I.2.2	Mécanismes de formation des particules de suies .....	23
I.2.2.1	Formation du premier cycle aromatique .....	23
I.2.2.2	Les particules et leurs effets sur la santé.....	27
I.2.3	La relation existée entre la formation des oxydes d'azote et des particules de suie.....	27
I.2.4	Formation du CO .....	28
I.2.5	Les hydrocarbures imbrûlés.....	29
I.3	La réduction des NO <sub>x</sub> et des particules .....	29
I.3.1	La réduction des NO <sub>x</sub> .....	29
I.3.2	Les systèmes de post-traitement des NO <sub>x</sub> .....	30
I.3.3	La réduction des émissions de particules.....	32
I.3.3.1	Réduction des émissions de particules par les filtres à particules .....	32
I.3.3.1.1	Filtres à particules fermés .....	32
I.3.3.1.2	Filtres à particules ouverts .....	32
I.3.3.2	Réduction des émissions de particules par les catalyseurs d'oxydation.....	33
I.4	Conclusion .....	33

### I.1 INTRODUCTION

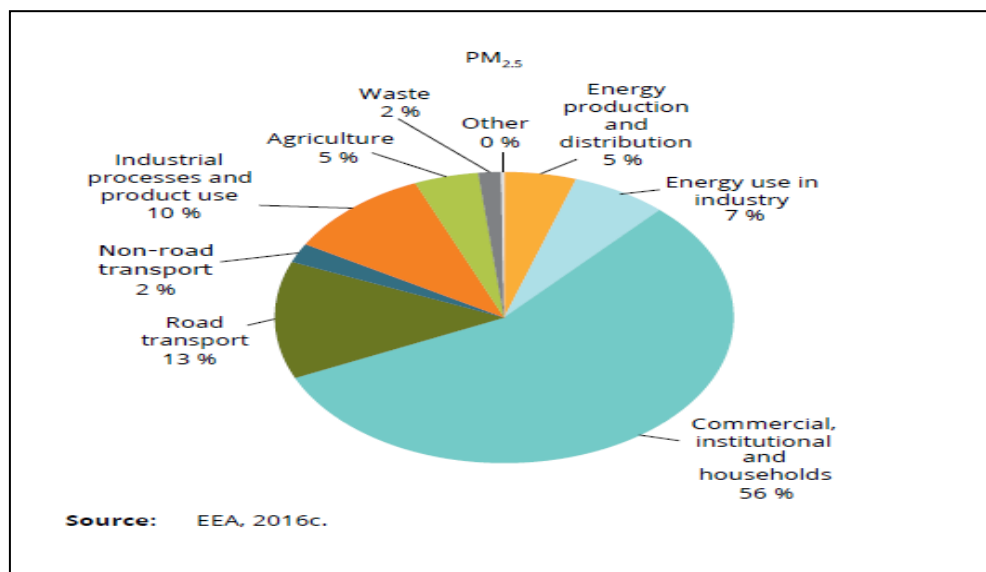
Depuis nombreuses années, l'environnement est pollué à cause de l'effet des activités humaines. Ces activités sont responsables à la formation de certains polluants et surtout les émissions qui ont un effet de serre (**Figure. I.1**). La protection de celui-ci devient la responsabilité de tout le monde. Nous cherchons alors, par exemple, à réduire les émissions polluantes et protéger notre entourage. La construction des automobiles était bien évidemment directement concernée puisque les moyens de transports sont responsables des rejets polluants (le monoxyde de carbone CO, le dioxyde de carbone CO<sub>2</sub>, les oxydes d'azote NO<sub>x</sub> et les particules de suie). Les figures (**I.2 et I.3**) montrent bien que le secteur de transport participe de façon remarquable à la production des oxydes d'azote et des particules de suies. Dans ce chapitre, on donne un aperçu général sur la formation des rejets d'un moteur à combustion interne, leurs effets et les techniques possibles pour la réduction.



**Figure. I.1:** Émissions de gaz à effet de serre par gaz et par secteurs pour l'Europe des 2011, [1].



**Figure. I.2:** Répartition des émissions de NOx par secteurs pour les pays membres de l'EEA<sup>1</sup>, 2015, [2].



**Figure. I.3:** Répartition des émissions de particules par secteurs pour l'Europe, 2016, [3].

Il y a une relation entre l'accroissement du parc automobile mondial et l'augmentation des émissions polluantes. Cette raison est suffisante pour comprendre alors l'importance de l'existence des normes anti-pollution. Depuis la fin des années 90 les constructeurs automobiles sont soumis à des normes anti-pollution limitant

<sup>1</sup> European Environment Agency

les émissions de certains polluants : il s'agit, en particulier, du monoxyde de carbone (CO), des oxydes d'azote (NO et NO<sub>2</sub>, notés NO<sub>x</sub>), les hydrocarbures imbrûlés (HC) et les particules de suies. Le CO, les HC et les suies sont le résultat d'une combustion incomplète alors que les oxydes d'azote sont issus de la réaction entre l'oxygène et l'azote de l'air portés à haute température.

## I.2 FORMATION DES EMISSION POLLUANTES

Malgré des progrès significatifs en matière de limitation des rejets de polluants par les automobiles, du fait de la réglementation et des avancées technologiques, il est subsisté une préoccupation sur l'émission de certains polluants, comme les oxydes d'azote et les particules de suies, en raison de l'accroissement constant des trafics de voyageurs et de marchandises.

La combustion est définie comme l'évolution irréversible d'un mélange réactif vers son état d'équilibre [4]. Cette évolution est un ensemble de réactions chimiques (collisions moléculaires efficaces) décrivant au final l'oxydation d'un combustible (hydrocarbure) par un comburant (dioxygène de l'air). Pourtant, cette description simpliste ne permet pas d'expliquer la formation des polluants. Seule une analyse approfondie du mécanisme réactionnel détaillé peut donner une conception approfondie sur la formation des espèces polluantes.

### I.2.1 Formation des oxydes d'azotes

Au cours de toute réaction de combustion à température élevées, les deux principaux constituants de l'air, l'azote et l'oxygène, peuvent se combiner pour former de petites quantités d'oxydes d'azote. Le monoxyde d'azote (NO) et le dioxyde d'azote (NO<sub>2</sub>) sont regroupés sous le nom NO<sub>x</sub>. **La figure. I.7** montre que les oxydes d'azote forment à haute température (>2200 °K) et à une valeur de richesse proche de 2.

#### I.2.1.1 Effet sur la santé

Concernant les effets sanitaires du NO<sub>2</sub>, les données toxicologiques montrent que le NO<sub>2</sub> induit des effets toxiques sur le système respiratoire, en particulier pour les populations sensibles (asthmatiques notamment). Ces effets sont décrits dans des études expérimentales à la suite d'expositions à des concentrations en NO<sub>2</sub>

supérieures aux valeurs guides. Généralement, le NO<sub>2</sub> présente une toxicité quatre fois plus importante que celle du monoxyde d'azote NO. On peut citer quelques dangers proviennent de la formation du NO<sub>2</sub> telle que : les troubles respiratoires, des perturbations du système de défenses antioxydant et induire une hyper réactivité bronchique. Actuellement, on considère qu'il n'y a pas de risques cancérogènes liés à la formation du NO<sub>2</sub>.

Le monoxyde d'azote NO devient très dangereux sur la santé lorsqu'il forme en très fortes doses. Il est cependant connu pour avoir un impact sur la fixation de l'oxygène par l'hémoglobine à partir de 15 ppm [5].

### **I.2.1.2 Effet sur l'environnement**

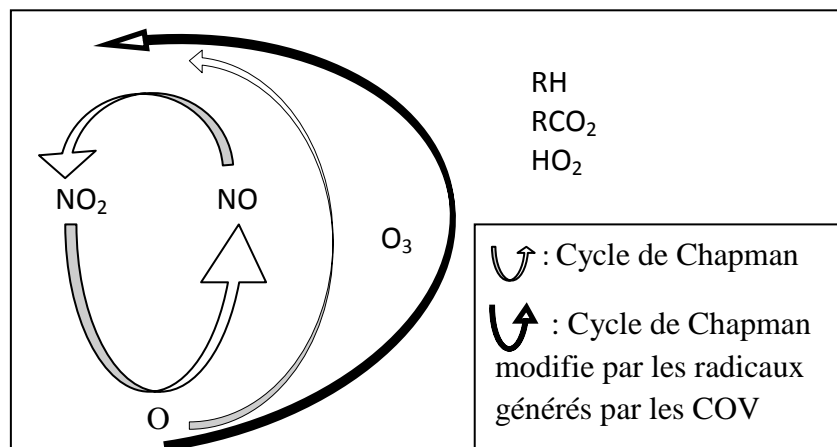
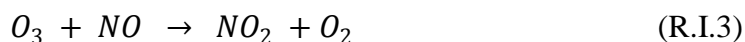
Les composés azotés sont responsables à la formation des acides, ou leurs sels, que l'on trouve notamment dans les nuages et les précipitations. Les pluies acides sont les résultats de la formation des oxydes d'azotes qui présentent une acidité très élevée. Ces pluies acides provoquent l'acidification des lacs et la déforestation. L'acidification favorise la mise en solution de métaux toxiques pour la faune aquatique et la santé de l'homme et elle peut entraîner l'appauvrissement des sols en éléments nécessaires à la nutrition des végétaux.

### **I.2.1.3 Impact sur le changement climatique**

Les oxydes d'azote participent à l'augmentation de l'effet de serre d'une façon directe ou indirecte. La pollution engendrée par les activités humaines augmente les concentrations de gaz à effet de serre. Ces gaz à effet de serre augmentent le réchauffement de la planète terrestre et qui entraînent la fonte des glaciers et une élévation remarquable du niveau moyen des mers.

Les composés azotés jouent aussi un rôle en ce qui concerne l'équilibre atmosphérique [6]. Le monoxyde d'azote participe à la formation d'ozone (O<sub>3</sub>) et à la destruction de la couche d'ozone stratosphérique. Le dioxyde d'azote se dissocie produisant du NO et de l'oxygène atomique O. cet atome réagit avec l'oxygène moléculaire O<sub>2</sub> pour former de l'ozone O<sub>3</sub>. On obtient ainsi un ensemble de réactions constituant un équilibre dynamique entre NO<sub>2</sub>, NO et O<sub>3</sub>, appelé Cycle de Chapman (**Figure .I.4**).





**Figure. I.4** : Mécanismes simplifiés de production de l'ozone [6].

#### I.2.1.4 Mécanismes de formation des oxydes d'azote

Les mécanismes de formation des NO<sub>x</sub> durant la décomposition d'hydrocarbures sont complexes et certaines voies de formation sont encore mal comprises [7, 8]. Lors de la combustion des hydrocarbures, l'oxyde d'azote NO est formé par trois mécanismes principaux les suivants :

- Le mécanisme de Zeldovich formant du "NO Thermique".
- Le mécanisme formant du "Fuel NO".
- Le mécanisme de Fenimore formant du "NO Précoce".

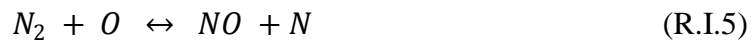
##### I.2.1.4.1 Le mécanisme du NO-thermique

Le mécanisme de formation du NO thermique a été décrit pour la première fois par Zeldovich en 1946 [9]. Zeldovich met en jeu un mécanisme radicalaire, qui sera généralement adopté plus tard par tous les chercheurs. La vitesse de production de NO par cette voie devient significative à haute température et en présence d'oxygène (donc pour des mélanges pauvres ou stœchiométriques).

La formation du monoxyde d'azote thermique nécessite la présence d'un radical O. La dissociation de l'oxygène de l'air pour une certaine température est donnée par la réaction suivante:



Le radical O peut ensuite réagir avec l'azote de l'air. Le mécanisme radicalaire décrit par Zeldovich se compose des deux réactions réversibles suivantes :



Au cours des années 70, ce mécanisme est complété par la réaction réversible suivante :



Toutes ces réactions sont réversibles et leur sens peut changer en fonction des conditions de température et de pressions partielles locales au point considéré. Ces réactions ne sont pas influencées par la teneur en azote du combustible; elles se produisent même pour un combustible exempt d'azote par exemple (le gaz naturel).

#### I.2.1.4.2 Le mécanisme du NO-combustible

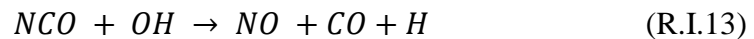
Le mécanisme du NO-combustible (ou fuel-NO) a été proposé par Fenimore et Jones en 1961 [10], ce mécanisme est initié par une étape de pyrolyse des composés azotés menant à la formation de l'acide cyanhydrique HCN. Il considère ensuite la formation des espèces intermédiaires cyanurées (CN, NCO,...) et azotés (NH) par des réactions entre (HCN) et l'oxygène atomique (O):



Le CN conduit à la formation des NCO via les réactions suivantes:



En milieu oxydant le NCO produit le monoxyde d'azote et le monoxyde de carbone via les réactions:



La conversion de l'azote du combustible en NO est dépend de la température et ainsi que de la présence des espèces (OH, O et O<sub>2</sub>) dans le milieu réactionnel.

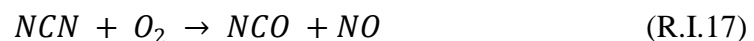
#### I.2.1.4.3 Le mécanisme du NO-précoce

Le mécanisme du NO-précoce (ou prompt-NO) a été initialement proposé par Fenimore en 1971 [11]. Les radicaux CH<sub>i</sub> (i=1,2,3....) sont responsable à la formation du NO-précoce. Dans une première étape, l'azote de l'air réagit avec les radicaux C-H.

Moskaleva (2000) [12], Smith (2003) [13], A.El Bakali [14], M, J, Bradley, (2008) [15], Lamouroux. (2008) [16], ont montre que la formation du NO-précoce est initié à partir de la réaction suivante :



L'espèce NCN formé se convertit en HCN, NCO et NO via les réactions :



Les radicaux N formés subissent :

Soit une oxydation :



Soit reconduisent à l'azote moléculaire en réagissant notamment sur NO :



Le mécanisme est complété par les réactions avec HCN :



Généralement, la quantité de NO formé à partir du mécanisme NO-précoce est très faible devant la quantité de NO produite du mécanisme NO-thermique (Le NO prompt ne représente donc qu'une faible proportion des NO émis). Dans les cas où il y a des zones très riches en combustible, la quantité formée du NO deviendra significative.

En plus de sa, il y a d'autres mécanismes sont responsables à la formation des NO tel que : le mécanisme de formation du NO à partir du protoxyde d'azote ( $N_2O$ ), appelé aussi mécanisme «  $N_2O$ -intermédiaire » et le mécanisme de formation du NO via NNH.

#### I.2.1.4.4 Mécanisme de formation du NO à partir de $N_2O$

Le mécanisme du NO à partir du  $N_2O$  est appelé aussi mécanisme du  $N_2O$ -intermédiaire. En 1966, Olszewski [17] montrait que la rupture de la triple liaison  $N_2$  peut s'effectuer selon la relation suivante :



Malte et Pratt (1974) proposaient le mécanisme suivant de formation du NO à partir de  $N_2O$  :



Cette voie de formation peut devenir importante à haute pression en présence d'excès d'oxygène. La formation de NO à partir du protoxyde d'azote intervient dans des zones de suréquilibre d'espèces atomiques O et H et à forte pression. Les concentrations en H sont suffisamment élevées pour réduire N<sub>2</sub>O en N<sub>2</sub> selon la réaction suivant :



#### I.2.1.4.5 Mécanisme de formation du NO à partir de NNH

Dans les gaz brûlés de flammes riches, l'addition d'un atome d'hydrogène suivie d'une attaque de l'oxygène atomique sur l'espèce NNH conduit à la formation de NO :



La réaction (R.I.28) est très rapide, la concentration en NNH est donc contrôlée thermodynamiquement. D'après des simulations sur des mélanges méthane-air, Haworth [18] conclue que la voie NNH joue un rôle complémentaire dans la plupart des conditions de combustion.

#### I.2.1.4.6 Formation du NO<sub>2</sub>

La formation du dioxyde d'azote (NO<sub>2</sub>) est liée à la réaction suivante [19] :



Le radical hydroperoxyde HO<sub>2</sub> est formé principalement dans les zones de fort gradient de température, c'est-à-dire dans le front de flamme. Il réagit avec le NO précédemment formé pour créer le NO<sub>2</sub>.

#### I.2.1.4.7 Formation du N<sub>2</sub>O

Le mécanisme réactionnel responsable à la formation du protoxyde d'azote N<sub>2</sub>O est le suivant :





La formation de  $N_2O$  est liée à une réaction tri-moléculaire (**R.I.32**) très sensible à la pression et à la quantité d'oxygène atomique.

## I.2.2 Mécanismes de formation des particules de suies

Les particules Diesel se composent d'un matériau carboné (la suie : noyau de carbone), engendré lors de la combustion, sur lequel sont adsorbées des espèces organiques diverses, constituées de molécules condensées lors des étapes suivant la combustion. La formation de ces particules de suies est un phénomène très complexe de conversion des molécules de carburant hydrocarboné en agglomérats contenant plusieurs milliers d'atomes de carbone. La connaissance des phénomènes qui contrôlent l'apparition de ces agglomérats est encore en études, cependant les principales étapes de formation des particules de suies sont connues. L'expérience, la thermodynamique et la cinétique confirment que la formation de suie passe par les HAP [20,21]. C'est pour cela on parle brièvement des HAP.

### I.2.2.1 Formation du premier cycle aromatique

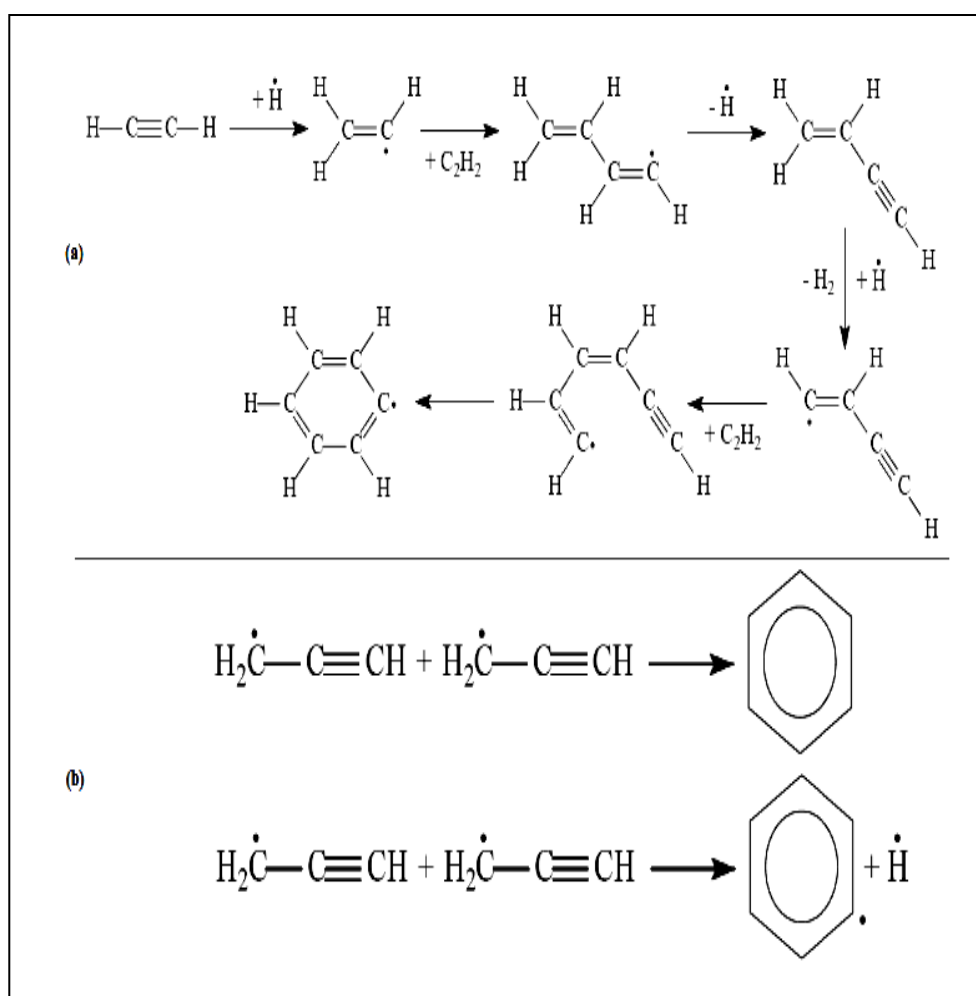
Les premières particules de suies sont formées à partir d'Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP). Les structures saturées présentes dans les carburants peuvent, aux hautes températures régnant dans les flammes, donner lieu à des réactions de déshydrogénation conduisant à la formation de radicaux vinyles qui eux-mêmes pourront se transformer en acétylène, après déshydrogénation. Selon le schéma de Frenklach [22], l'addition de molécules d'acétylène pour former des chaînes acétyléniques à 6 atomes de carbone aboutissent à la cyclisation pour former le radical phényle qui se stabilise ensuite en benzène par addition d'hydrogène (**Figure. I.5.a**). La première voie de formation du noyau benzénique ( $C_6H_6$ ) est proposée par Cole [23] et Frenklach [22,24] sous le mécanisme réactionnel suivant:



Miller et Melius [25] pensent que ces voies ne sont pas suffisantes pour expliquer les quantités de benzène trouvées expérimentalement, c'est pour cela on a une deuxième voie sera ajoutée pour la formation du noyau benzénique. Cette voie est basée sur la recombinaison de deux radicaux propargyle ( $C_3H_3$ ) [25] :

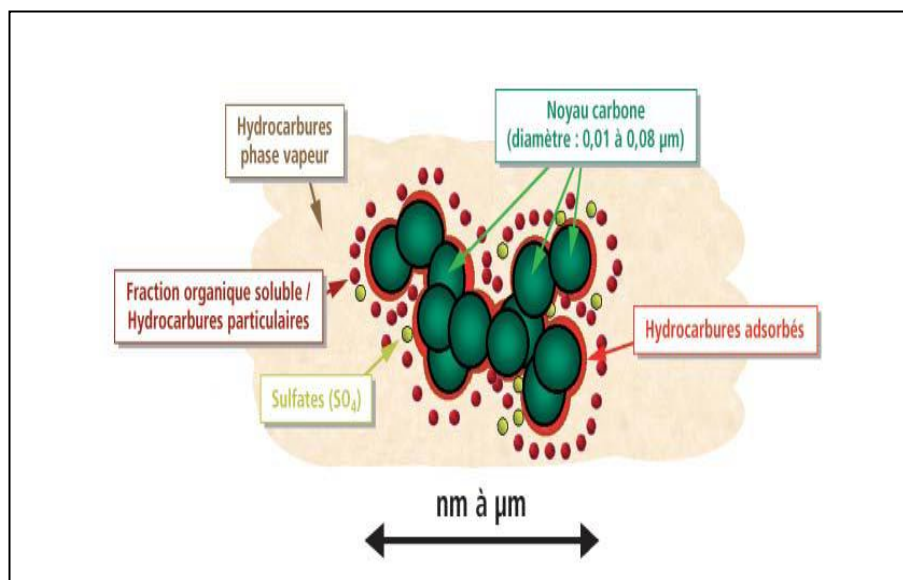


Stein [26] a, quant à lui, présenté la voie de formation par combinaison de deux radicaux propargyles ( $C_3H_3$ ) comme prépondérante de formation du benzène dans la majorité des cas (**Figure. I.5.b**).



**Figure. I.5** : Schéma de Frenklach et de Stein décrivant la formation du benzène [22].

Finalement, la formation du benzène dépend fortement des conditions expérimentales et en particulier de la pression et de la température. Ainsi il est difficile d'identifier clairement une voie conduisant à la formation du benzène, il est donc nécessaire de tenir compte de toutes les voies dans les mécanismes réactionnels.



**Figure. I.6** : Structure élémentaire d'une particule de combustion automobile.

Source ADEME<sup>2</sup> [27].

En moteur Diesel, la formation des particules de suies est un grand problème. Elles sont des produits complexes, sa formation a besoin des températures très élevée (>1400 °K) et un manque local d'oxygène, donc elles résultent de la combustion incomplète des hydrocarbures. La particule de suie se forme dans la chambre de combustion dans des zones localement trop riches en carburant, du fait du principe de fonctionnement du moteur Diesel. En effet, pour ce moteur, la combustion consiste en l'auto-inflammation, sous l'effet de la compression.

Deux autres processus de formation identifiés font suite à cette première phase :

- formation de suies à partir du carburant au sein des gaz brûlés.
- oxydation de la suie formée, après mélange dans des zones riches en oxygène.

---

<sup>2</sup> L'Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie.

Les molécules carboniques du combustible sont oxydées pour former l'acétylène et les aromatiques polycycliques. Au premier temps, les particules formées sont très petits, elles sont subies plusieurs étapes jusqu'à la formation d'une particule de suie [28, 29].

Ces émissions de particules à l'échappement d'un moteur Diesel sont composées de deux parties les suivantes:

- La partie soluble appelée SOF (Soluble Organic Fraction) est assemblée les hydrocarbures lourds et les composés aromatiques.

- La partie insoluble ou UnSOF (Unsoluble Organic Fraction) est constituée de grains de suies véritables.

Dans un moteur Diesel, l'évolution des particules de suies de la pyrolyse du carburant jusqu'à la libération dans l'atmosphère se déroule en quatre étapes :

a) Une première phase de création d'espèces intermédiaires formant ce que n'appellent les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP). Ce processus comprend les deux étapes suivantes:

- Formation des premiers noyaux aromatiques.

- Développement bidimensionnel des noyaux pour créer des structures "polycycliques".

b) Formation des premiers nucléés qui résultent de la croissance tridimensionnelle des structures aromatiques.

c) Croissance des suies par :

- Croissance de la surface.

- Coagulation.

- Agglomération.

d) Réduction des suies par oxydation.

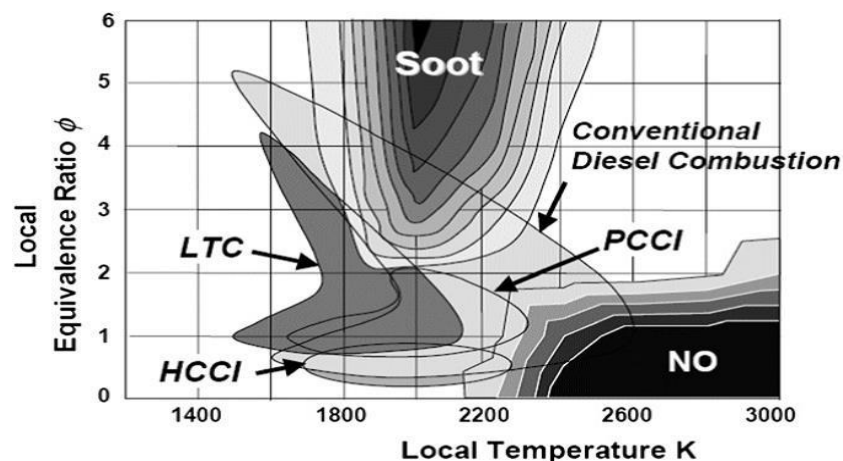
L'étude de la formation des suies est très complexe car beaucoup de mécanismes de différentes natures se déroulent de manière simultanée au cours du processus de combustion. La combustion dans un moteur Diesel produit des quantités très importantes des suies. De ce fait, on trouve plusieurs études qui présentent chacune une revue sur les mécanismes de formation des suies ainsi que les modèles associés [30, 31, 32,33].

### I.2.2.2 Les particules et leurs effets sur la santé

De nombreuses études épidémiologiques réalisées dans la dernière décennie, à la fois aux Etats-Unis et en Europe, ont montré que l'exposition aux fines particules (diamètre  $< 2,5 \mu\text{m}$ ) augmente les taux de mortalité due aux maladies du cœur et des poumons [27]. Les particules dont le diamètre est compris entre 3 et  $10 \mu\text{m}$  peuvent se déposer au niveau de l'arbre respiratoire trachéo-bronchique et provoquer à terme des irritations de la muqueuse respiratoire ou des allergies respiratoires.

### I.2.3 La relation existée entre la formation des NOx et des particules de suie

La figure.7 présente la formation des particules de suies et des NOx en fonction de la température et de la richesse calculée par Golovitchev [34]. La plage des températures de la formation des particules de suies est située entre 1650 et 2300 K et l'oxydation de ces particules est située aux zones pauvres. La production des particules des NOx est remarquable aux zones pauvres et aux hautes températures qu'il résulte un problème particules/NOx voir la figure.



**Figure. I.7** : Les régions de formation des particules de suies et des NOx en fonction de la température et ainsi de la richesse [34].

### I.2.4 Formation du CO

Le monoxyde de carbone CO est un gaz inodore, incolore et cependant très toxique pour les mammifères. Il peut être mortel pour l'homme s'il est absorbé en grande quantité. Son affinité pour l'ion fer de l'hémoglobine, principal transporteur d'oxygène dans le sang, est 230 fois supérieure à celle du dioxygène O<sub>2</sub>. En se combinant à l'hémoglobine, il forme un complexe de carboxyhémoglobine qui remplace l'oxyhémoglobine. La capacité de transport de l'oxygène nécessaire aux tissus est ainsi inhibée et affecte en premier lieu le système nerveux central et le cœur.

Les émissions de CO sont formées au cœur de la flamme avec d'autres produits intermédiaires de la combustion. La plupart du CO formé est convertie en CO<sub>2</sub> si les températures locales sont suffisantes (supérieures à 1400 K environ) pour du gazole [35]. Ainsi la présence de CO à l'ouverture des soupapes d'échappement démontre l'existence d'un processus d'oxydation incomplet. Les émissions de CO augmentent ainsi en se rapprochant de la stœchiométrie du fait d'une diminution de l'oxygène, ce qui explique pourquoi les émissions de CO sont souvent importantes pour les moteurs à essence qui fonctionnent proche de la stœchiométrie.

L'oxydation partielle des combustibles composés de chaînes carbonées (hydrocarbures C<sub>n</sub>H<sub>m</sub>), le CO est formé lors de la phase secondaire de la combustion. Lorsque les constituants intermédiaires (H<sub>2</sub>, O, H et OH) sont créés par réactions en chaîne, un défaut en atome d'oxygène (combustion riche) favorise sa formation et celle d'H<sub>2</sub>O. Dans un second temps, son oxydation en CO<sub>2</sub> intervient. On obtient les réactions suivantes :



La première réaction est très exothermique et produit l'essentiel de la chaleur dans une zone où abondent OH et O. La réaction de terminaison de ce système d'oxydation du CO est une réaction tri- moléculaire (lente) qui s'écrit comme suit :



Il est à noter que CO est le seul précurseur du CO<sub>2</sub>, produit final de combustion d'un hydrocarbure. Ainsi, toute perturbation venant consommer O, H ou OH limite l'efficacité de combustion et entraîne l'émission toxique de CO.

### **I.2.5 Les hydrocarbures imbrûlés**

Les hydrocarbures imbrûlés sont formés par deux cas. Le premier cas, à cause d'une combustion incomplète, spécialement dans le cas d'une combustion en mélange riche. Le deuxième cas une formation sur les parois et dans les crevasses de la chambre de combustion (Heywood, 1988).

## **I.3 LA REDUCTION DES NO<sub>x</sub> ET DES PARTICULES.**

### **I.3.1 La réduction des NO<sub>x</sub>**

Le moteur Diesel a un rendement très utile mais il rejette une grande quantité des NO<sub>x</sub> et une quantité remarquable des particules de suie. A cet effet, on va voir les techniques essentielles utilisées pour la réduction de ces deux formes de polluants.

Dans le cas des oxydes d'azote, les méthodes les plus couramment utilisées sont deux (les méthodes primaires et les méthodes secondaires) :

- Les méthodes primaires s'appuient sur le contrôle de la richesse et sur le champ de la température. Une réduction significative des NO<sub>x</sub>, voisine de 50%, peut être obtenue par ces méthodes. L'effort de recherche des motoristes pour l'amélioration de la combustion dans les moteurs a principalement porté sur différentes axes, par exemple :

- Réduction de l'avance à l'injection ce qui permet d'avoir une réduction des températures maximales dans la chambre, ce qui implique une diminution des NO<sub>x</sub>.

- Réduction des rapports volumétriques des moteurs toujours pour réduire les températures, ce qui engendre la réduction de la formation des oxydes d'azote.

- Refroidissement de l'air de suralimentation qui agit également sur toutes les valeurs de températures atteintes au cours du cycle.

- Injection de gaz d'échappement à l'admission (EGR) par un circuit dérivé piloté par le boîtier de contrôle moteur. C'est la solution la plus répandue depuis des années, elle permet de ralentir la combustion par injection d'un gaz contenant peu d'oxygène et remplaçant l'air ce qui fait chuter les températures. S'ajoute à cet effet sur la vitesse de réaction un très fort  $C_p$  (chaleur massique) du  $CO_2$  (4 fois plus grand que celui de l'air) contenu dans les gaz d'échappement qui constitue un "piège" à chaleur au cours de la combustion.

- L'apparition des nouveaux modes de combustion : à l'image des nouveaux modes d'injection décrits précédemment, la tendance actuelle du développement des moteurs est à la combustion en mélange pauvre homogène, que le carburant d'alimentation soit de l'essence ou du gazole. Ainsi une alternative prometteuse à la combustion en moteur Diesel est le moteur à allumage par compression de charge homogène (HCCI) appelé également moteur CAI pour les applications développées à partir des moteurs essences. Cette technologie s'appuie sur le mode de fonctionnement d'un moteur Diesel mais pour lequel la charge avant auto-inflammation serait totalement homogène permettant un contrôle chimique de l'auto-inflammation, la température à l'intérieur du cylindre étant contrôlée par recirculation des gaz d'échappement. Ce mode de combustion utilisant des mélanges pauvres a pour avantage de diminuer la consommation en carburant des moteurs essences et, grâce à l'homogénéité chimique et thermique de la charge, de limiter les émissions des  $NO_x$  et de particules des moteurs Diesel.

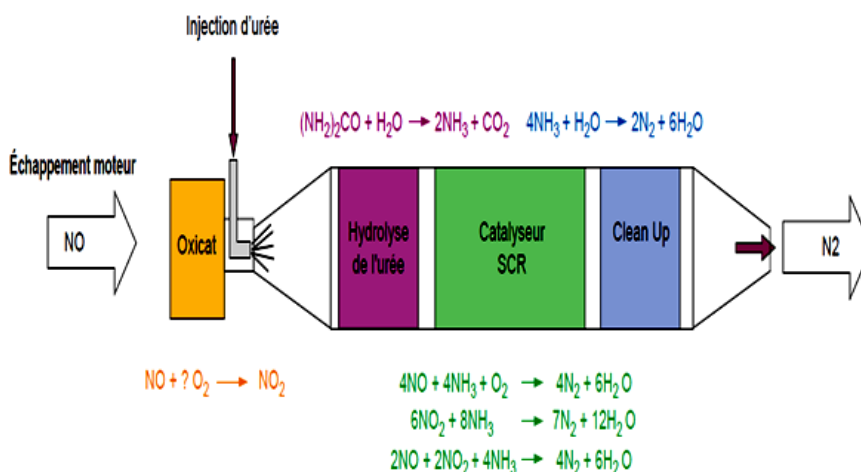
- Les méthodes secondaires sont utilisées si les méthodes primaires ne donnent pas des résultats suffisants pour respecter les normes anti-polluantes. Ces méthodes font intervenir des processus de conversion chimique des polluants, par voie catalytique ou non :

### **I.3.2 Les systèmes de post-traitement des $NO_x$**

Pour les véhicules légers, deux systèmes sont étudiés par les constructeurs:

- La SCR (Selective Catalytic Reduction) où la réduction des NOx est assurée par une réaction avec de l'ammoniac embarqué sous forme d'urée. Généralement, elle consiste en l'injection d'un agent réducteur, ordinairement de l'urée pour éliminer tous les NOx, **Figure I-8 [36]**.

- Le piège à NOx qui combine un système de captage des NOx et un catalyseur trois voies traitant le CO, les HC et les NOx (les NOx et le CO formant du N<sub>2</sub> et du CO<sub>2</sub>). Il y a aussi les pièges à NOx et la catalyse quatre voies qui sont fonctionnés actuellement comme une catalyse 3 voies en y rajoutant deux composants (baryum et rhodium) pour absorber les NOx.



**Figure. I.8** : Schéma d'un système SCR [36].

Une autre technologie appelée SNCR (Sélective Non Catalytique) est un moyen intéressant de réduire les NOx car il réalise à haute température, elle ne besoin pas de catalyseur. Il s'agit d'introduire des produits promoteurs de radicaux NH<sub>i</sub> qui interviennent dans le schéma de destruction des NOx. L'ammoniac NH<sub>3</sub>, l'urée (NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>C=O et l'acide cyanurique (HOCN)<sub>3</sub> sont les composés essentielles utilisées dans cette méthode. Plus détaillé sur le mécanisme réactionnel qu'il explique tout les phénomènes lié à la (SNCR) est existé dans ce référence [37].

### **I.3.3 La réduction des émissions de particules**

#### **I.3.3.1 Réduction des émissions de particules par les filtres à particules**

Les suies qui n'ont pas pu être brûlées dans la chambre de combustion peuvent être détruites par un filtre à particules. Il permet de réduire la quasi-totalité des particules nocives et des fumées noires des moteurs diesel. Le principe est de bloquer avec un filtre les particules dans l'échappement. Celui-ci agit que sur les particules qui sont captables à la température où les gaz d'échappement les traversent. Il faudra prévoir les modes de fonctionnement suivants [38] :

- Filtration et combustion quasi simultanée des particules lorsque la température des gaz d'échappement le permet.
- Rétention et accumulation des particules de suies dans le filtre lorsque la température des gaz d'échappement est trop faible.
- Régénération du filtre avant que les pertes de charge dues à l'accumulation de suies deviennent inacceptables.

On distingue deux types de filtre à particules :

##### **I.3.3.1.1 Filtres à particules fermés**

Les filtres "fermés" sont généralisés sur les véhicules Diesel neufs depuis janvier 2011. Ils permettent d'éliminer au moins 95 % en masse et 99,7 % en nombre des particules de plus de 23 nm (0,023 micromètres donc 100 fois plus petites que les particules PM2.5) [39] émises par les moteurs Diesel, y compris la carbone suie. Les véhicules Diesel équipés émettent donc un niveau de particules équivalent à celui des émissions issues des moteurs à essence. Pour les particules de moins de 23 nm, l'efficacité des filtres à particules reste mal connue, mais les premiers résultats tendraient à montrer une filtration jusqu'à 7 nm (0,007 micromètres).

##### **I.3.3.1.2 Filtres à particules ouverts**

Les filtres à particules dits « ouverts » n'éliminent que 30 % à 50 % des émissions de particules. Par conséquent, ils ne permettent pas de respecter la réglementation applicable aux véhicules neufs lourds ou légers [39].

### **I.3.3.2 Réduction des émissions de particules par les catalyseurs d'oxydation**

Les catalyseurs d'oxydation permettent de transformer en aval des soupapes d'échappement les hydrocarbures imbrûlés HC en produits moins toxiques tels que le dioxyde de carbone (CO<sub>2</sub>) et l'eau (H<sub>2</sub>O). Contrairement aux filtres à particules, les catalyseurs d'oxydation ne posent pas le problème de colmatage par accumulation d'un produit solide retenu.

## **I.4 CONCLUSION**

L'apparition des moteur HCCI (**voir chapitre II**) garde un rendement équivalant au rendement du moteur Diesel et réduire les émissions des NOx et des particules de suie. Dans ces moteurs, la réduction des émissions polluantes n'étaient pas parfaite, à ce raison, il y a plusieurs techniques utilisées pour améliorer ce type de combustion, l'une de ces techniques est l'utilisation des EGR pour réduire les émissions des NOx et ainsi les particules de suie. Dans le chapitre suivant, on donne une généralité globale sur la combustion en mode HCCI.



**CHAPITRE II :**  
**Les moteurs à combustion  
interne et la technologie HCCI**

---

## CHAPITRE II :

### Les moteurs à combustion interne et la technologie HCCI

II.1	Introduction .....	34
II.2	Les moteurs thermiques et la technologie HCCI .....	34
II.2.1	Généralités sur les moteurs à combustion interne .....	34
II.2.1.1	Les moteurs diesel .....	35
II.2.1.1.1	Les moteurs à injection directe .....	36
II.2.1.1.2	Les moteurs à injection indirecte .....	36
II.2.1.1.3	Formation des polluants dans les moteurs Diesel .....	37
II.2.2	Les moteurs à allumage commandé (moteurs essence) .....	38
II.2.2	La combustion HCCI .....	40
II.3	Principe de fonctionnement de la combustion HCCI .....	41
II.3.1	Généralités sur l'oxydation des hydrocarbures.....	41
II.3.1.1	Domaine de basse température .....	42
II.3.1.2	Coefficient négatif de température CNT .....	42
II.3.1.3	Domaine de haute température .....	43
II.3.2	Comparaison entre le moteur HCCI et le moteur Diesel .....	44
II.3.3	Déroulement de la combustion HCCI .....	45
II.3.4	Les avantages et les inconvénients du moteur HCCI .....	46
II.3.5	Recherches bibliographiques .....	48
II.3.6	Paramètres moteur influençant la combustion HCCI .....	50
II.3.6.1	Influence de la richesse .....	50
II.3.6.1.1	Influence sur le délai d'initiation .....	50
II.3.6.1.2	Influence sur le déroulement de la combustion et le dégagement de la chaleur d'initiation .....	50
II.3.6.2	Influence du régime moteur .....	51
II.3.6.2.1	Influence sur l'initiation de la combustion .....	51
II.3.6.2.2	Influence sur le dégagement d'énergie et la durée de combustion .....	52
II.3.6.3	Influence de la température d'admission .....	52
II.3.6.3.1	Influence sur l'initiation de la combustion .....	52
II.3.6.3.2	Influence sur le dégagement d'énergie et le déroulement de la combustion .....	53
II.3.6.4	Influence de la pression .....	53
II.4	Conclusion .....	54

## II.1 INTRODUCTION

L'objectif de ce chapitre est de présenter des connaissances générales sur les moteurs conventionnels et en particulier sur le nouveau concept dite mode HCCI (Homogenous Charge Compression Ignition).

D'un point de vue historique, la combustion HCCI existe depuis la fin des années 1970. Onishi [40], présente un mode homogène en 1979 et il l'appliquait à un moteur deux temps. L'application sur un moteur à quatre temps est faite en 1983, par Najt [41].

Quelle que soit la stratégie d'injection employée en mode HCCI, la consommation du carburant est faible comparables à celles rencontrées sur le mode Diesel conventionnelle.

Plusieurs recherches et beaucoup des études sont faites sur la combustion à charge homogène (homogeneous charge compression ignition). Ce mode de combustion est un nouveau type de combustion appliqué au moteur à combustion interne.

## II.2 LES MOTEURS THERMIQUES ACTUELS ET LA TECHNOLOGIE HCCI

### II.2.1 Généralités sur les moteurs à combustion interne

Le but d'un moteur à combustion interne est de convertir l'énergie chimique contenue dans le combustible, en énergie mécanique nécessaire au déplacement d'un véhicule. La transformation de l'énergie chimique du combustible en travail mécanique résulte de la réalisation périodique dans le cylindre du moteur d'une série d'évolutions dont l'ensemble, qui se répète périodiquement dans le cylindre du moteur, porte le nom du cycle de fonctionnement du moteur. La première technologie des moteurs à combustion interne a imaginée par Beau de Rochas en 1862 et mise en œuvre par Etienne Lenoir en 1883 pour le moteur essence et en 1896 pour le moteur Diesel, tous deux caractérisés par un régime de combustion spécifique.

Le cycle d'un moteur est l'ensemble des opérations à la fin desquelles ses éléments mobiles retrouvent leurs positions initiales. Ces opérations comprennent :

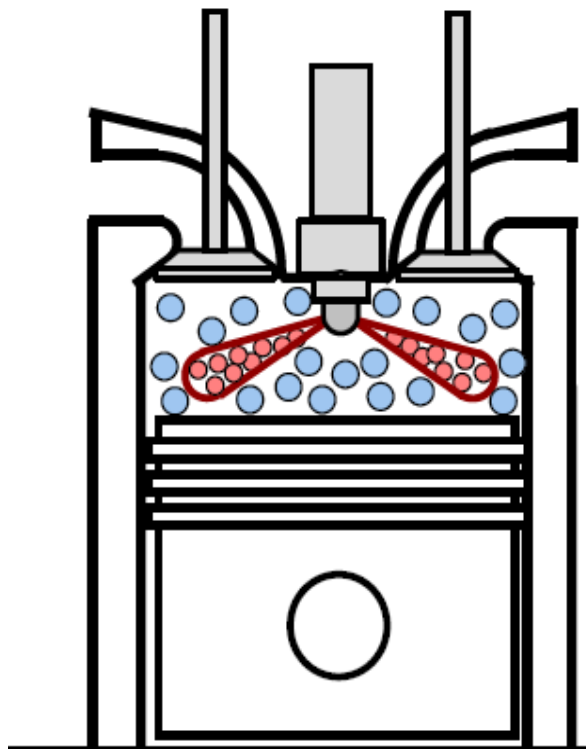
- L'admission.

- Sa compression.
- Son inflammation.
- La détente des gaz brûlés et leur expulsion.

Un cycle d'un moteur à combustion interne n'est vraiment pas un cycle en système fermé parce qu'à chaque commencement et fin du cycle, on introduit et on retire de la matière du système.

### II.2.1.1 Les moteurs diesel

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 (**figure II.1**) [42].



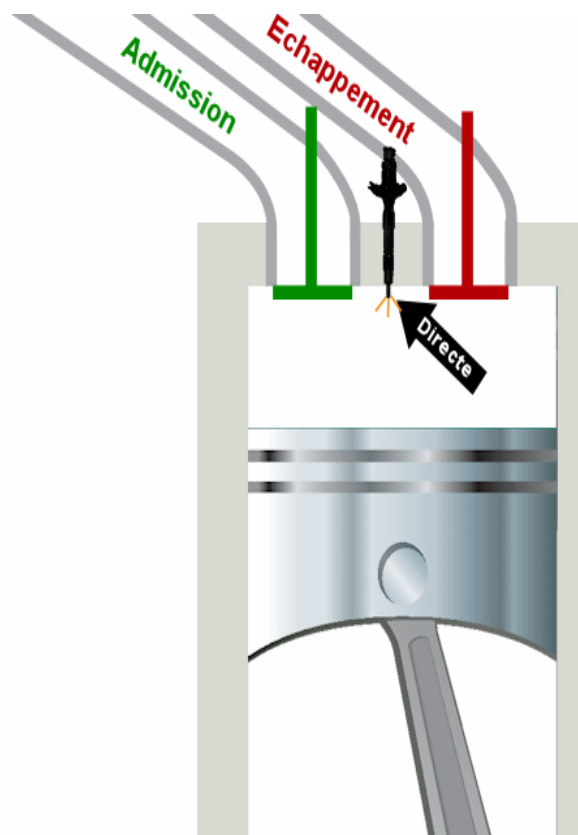
**Figure II.1** : Schéma d'un moteur diesel [42].

Selon la forme de la chambre de combustion, on distingue deux types de moteur diesel :

- les moteurs à injection directe.
- les moteurs à injection indirecte.

### II.2.1.1.1 Les moteurs à injection directe

Le carburant est pulvérisé directement dans la chambre principale de combustion par les injecteurs (**figure II.2**) [43]. La chambre de combustion est constituée d'une cavité située dans la tête du piston. Son rendement est supérieur à celui des moteurs à injection indirecte. La durée de combustion est plus courte dans un moteur à injection directe. Le taux de compression est de l'ordre de 14/1 à 17/1 et la température de la chambre de combustion avoisine de 200 - 220°C. La pression d'injection varie de 180 à 400 bars. Ils sont montés sur les tracteurs agricoles et sur certains engins routiers.

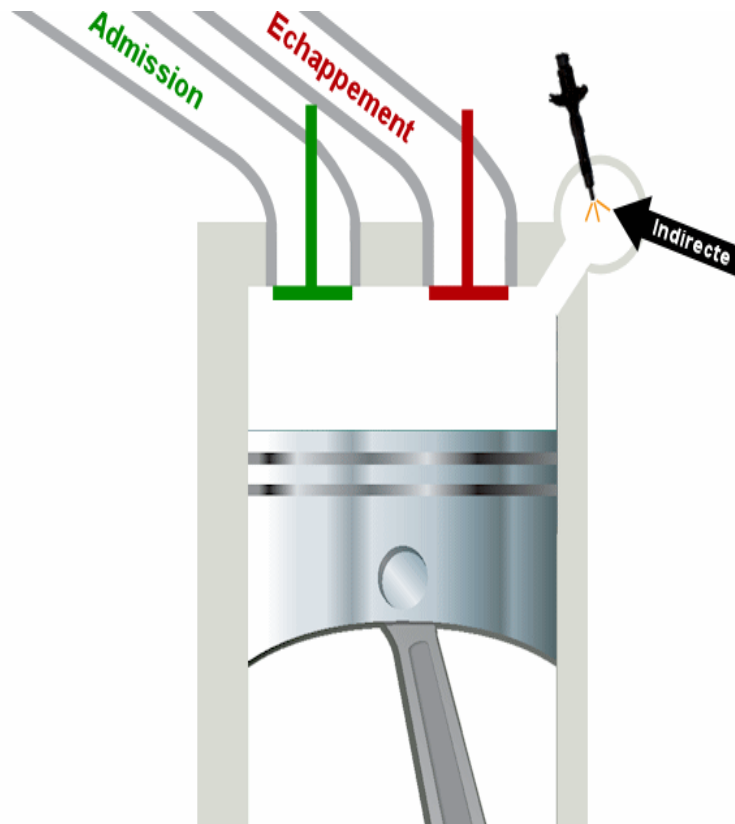


**Figure II.2 :** Moteur diesel à injection directe [43].

### II.2.1.1.2 Les moteurs à injection indirecte

La combustion se déroule dans deux volumes séparés (**figure II.3**) [43] : une première chambre relativement petite qui reçoit l'injection du carburant et où s'amorce la combustion, et une chambre principale dans laquelle elle s'achève. La température de la chambre de combustion atteint rapidement 500 - 600°C. Ils sont utilisés dans les véhicules automobiles, dans certains gros moteurs industriels et une très grande gamme de petits moteurs industriels.

Ces moteurs sont minoritaires sur le marché car leur consommation de carburant est très élevée par rapport à celle des moteurs à injection directe.

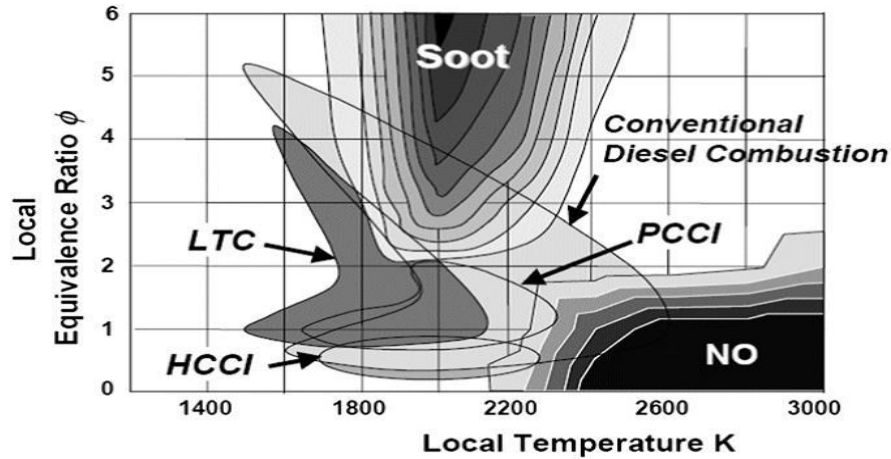


**Figure II.3 :** Moteur diesel à injection indirecte [43].

#### II.2.1.1.3 Formation des polluants dans les moteurs Diesel

Le fonctionnement en mode hétérogène de la combustion Diesel conventionnelle est responsable de la formation des émissions de NO<sub>x</sub> et de particules. La chambre de combustion contient en effet des zones autour de la stœchiométrie à fortes températures conduisant à la formation des NO<sub>x</sub>, ainsi que des zones à forte richesse, responsables de la formation des particules (**Figure II.4**) [34].

- Température élevée + présence de zones à richesse  $\sim 0.9$   $\Rightarrow$  formation de NO<sub>x</sub>.
- Présence de zones à richesse forte  $\Rightarrow$  formation de suies



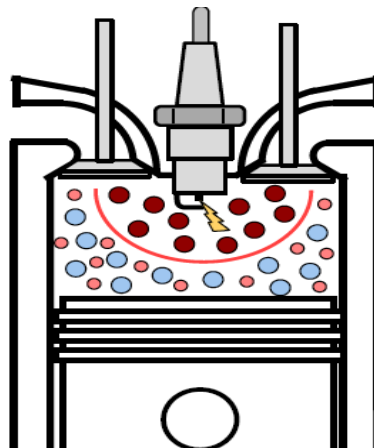
**Figure. II.4 :** Les régions de formation des particules de suies et des NOx en fonction de la température et ainsi de la richesse [34].

Les émissions de HC et de CO sont quant à elles limitées car les températures rencontrées sont élevées, conduisant à une combustion quasi-complète.

- Peu de dépôts et de piégeage + excès d'air  $\Rightarrow$  peu de HC.
- Excès d'air = post-oxydation forte de CO  $\Rightarrow$  peu de CO).

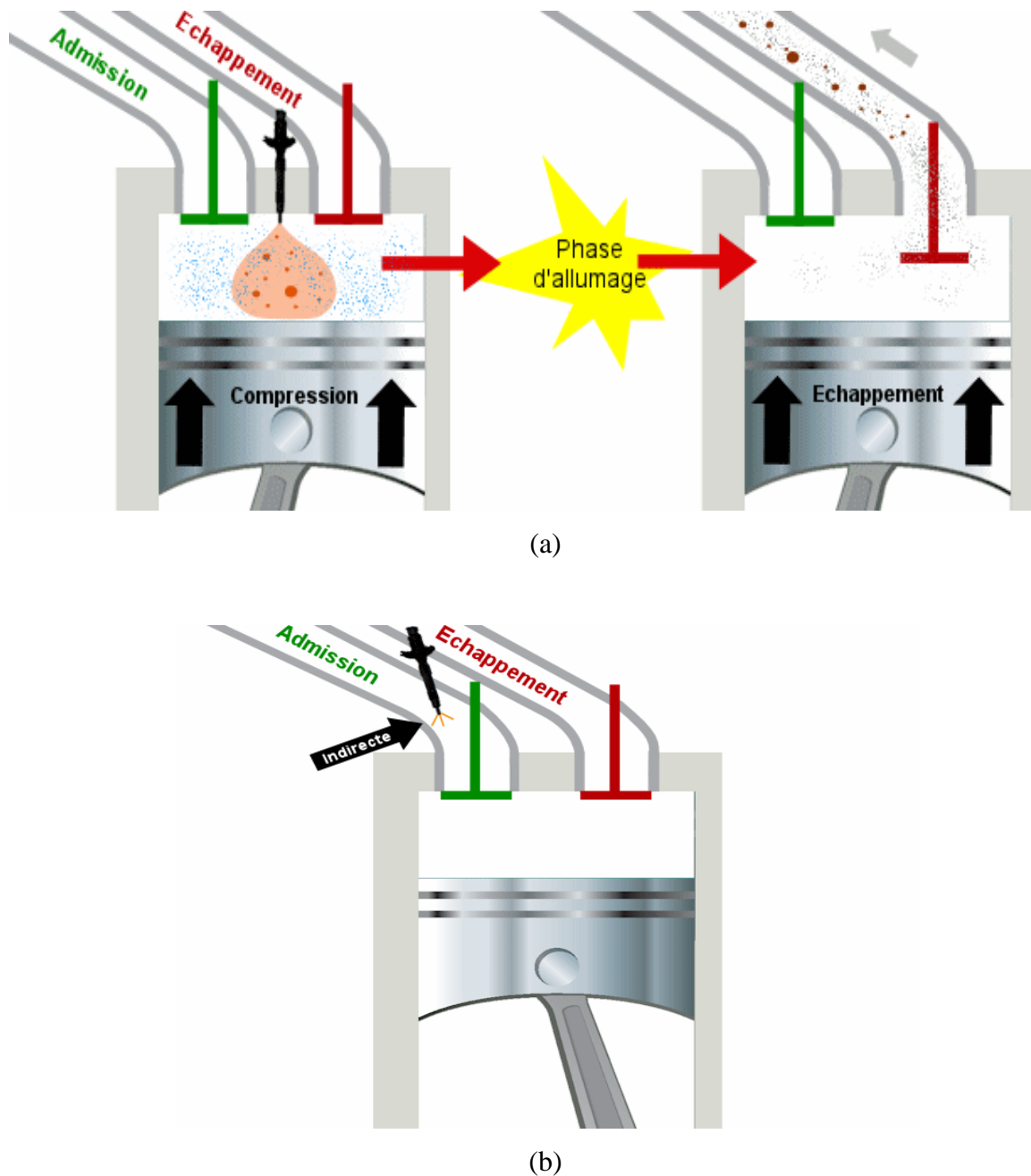
### II.2.2 Les moteurs à allumage commandé (moteurs essence)

Le fonctionnement d'un moteur à allumage commandé est un peu différent de celui du moteur Diesel. L'allumage du mélange air-carburant est réalisé grâce à une étincelle électrique qui provoque l'inflammation par dépôt d'énergie localisé.



**Figure II.3 :** Moteur à allumage commandé (moteurs essence) [42].

Pour le moteur à allumage commandé deux injections sont possibles. L'injection peut se faire de manière directe (**figure II.5.a**) [43], dans ce cas le carburant est directement introduit dans la chambre de combustion. Elle peut aussi être réalisée de manière indirecte (**figure II.5.b**) [43], l'air et le carburant sont alors pré-mélangés avant d'entrer dans la chambre de combustion principale.



**Figure II.5** : Moteur à allumage commandé (moteur essence) [43]

(a) Injection directe (b) injection indirecte

Bien que le fonctionnement des moteurs à allumage commandé repose sur un processus de combustion homogène proche de la stœchiométrie, ces derniers génèrent un certain nombre de polluants. On résume les principaux polluants :

➤ Monoxyde de carbone

- Formation issue d'une oxydation incomplète dans les zones riches (si mélange hétérogène) ou due à la réaction de dissociation du  $\text{CO}_2$  à haute température.

- Oxydation de CO lente due aux effets de détente.

➤ Hydrocarbures imbrûlés (HC)

- Formation par dépôts de carburant, piégeage dans les interstices (segmentation, crevasses) ou par adsorption dans le film d'huile.

- Oxydation lente des HC dans la phase de détente.

➤ Oxydes d'azotes ( $\text{NO}_x$ )

- Voie principalement NO-thermique, favorisée par les niveaux de température importants des gaz brûlés ( $>2500\text{K}$ ).

### II.2.3 La combustion HCCI

D'un point de vue historique, le premier mode de combustion Diesel homogène étudié est la combustion Homogeneous Charge Compression Ignition HCCI. Ce procédé de combustion est aujourd'hui devenu un sujet de grand intérêt pour les chercheurs dans les domaines automobile et de la combustion [44, 45]. Plusieurs abréviations est existées dans littérature, à savoir, HCCI, ATAC, PCCI, PREDIC, CAI, et NADI [40, 41, 46, 47, 48, 49]. Bien que les normes anti-pollution en Europe aient été mises en place à partir du début des années 1990, la combustion HCCI existe depuis la fin des années 1970.

L'apparition et la diversité des normes anti-pollution ont renforcé l'intérêt porté par ce type de combustion, le nombre de publications relatives à la combustion HCCI ayant été multiplié par 10 en 10 ans entre 1990 et 2000 [50].

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 pré-mélangée 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.

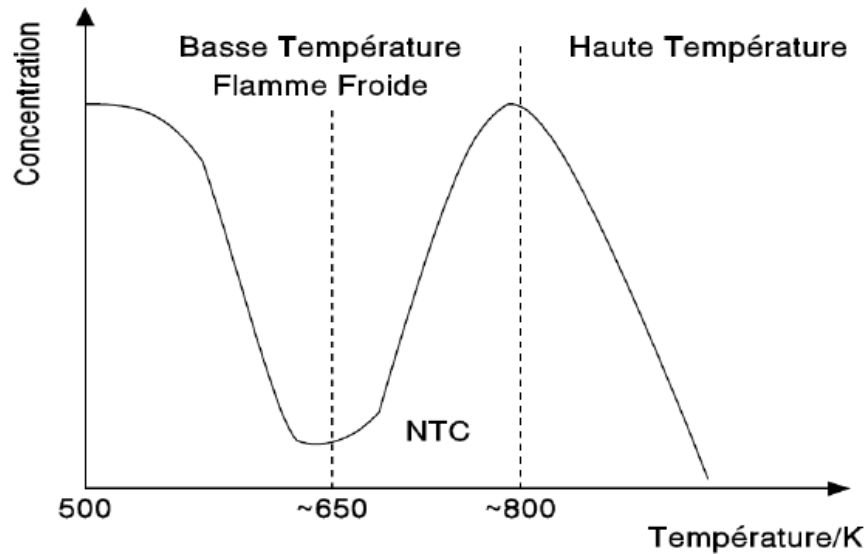
Une solution possible pour améliorer le rendement et diminuer les émissions des moteurs à combustion interne consisterait à combiner les meilleures caractéristiques du moteur essence avec celles du moteur Diesel. Autrement dit, un mode de combustion qui aurait un potentiel de rendement thermique comme le moteur Diesel et des émissions de suies équivalentes à celles des moteurs essence tout en gardant de faibles émissions de NOx à l'aide d'une combustion à plus faible 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 est l'un des solutions intéressantes pour atteindre ces objectifs, malgré les problèmes techniques de mise en place et de contrôle qui limitent aujourd'hui son implantation industrielle.

## II.3 PRINCIPE DE FONCTIONNEMENT DE LA COMBUSTION HCCI

### II.3.1 Généralités sur l'oxydation des hydrocarbures

Selon la température, la combustion HCCI se déroule en trois temps. Il existe principalement trois régimes de température dans la cinétique d'oxydation des hydrocarbures : la première phase est une combustion lente, que l'on nomme la "flamme froide", elle caractérise par une lente réactivité et une faible exothermicité. Cette phase est suivie d'une zone où la vitesse de réaction diminue lorsque la température augmente, c'est la zone dite de NTC (Negative Temperature Coefficient). Enfin, le dernier régime est celui communément appelé la phase de combustion principale (ou "flamme principale", ou "flamme chaude"). Dans cette zone la vitesse d'oxydation est beaucoup plus rapide et les réactions de rupture de liaisons y prédominent. Les trois régimes d'oxydation sont présentés sur **la Figure II.6 [51]**.



**Figure II.6 :** Différents régimes d'oxydation observée en fonction de la température [51].

### II.3.1.1 Domaine de faible température

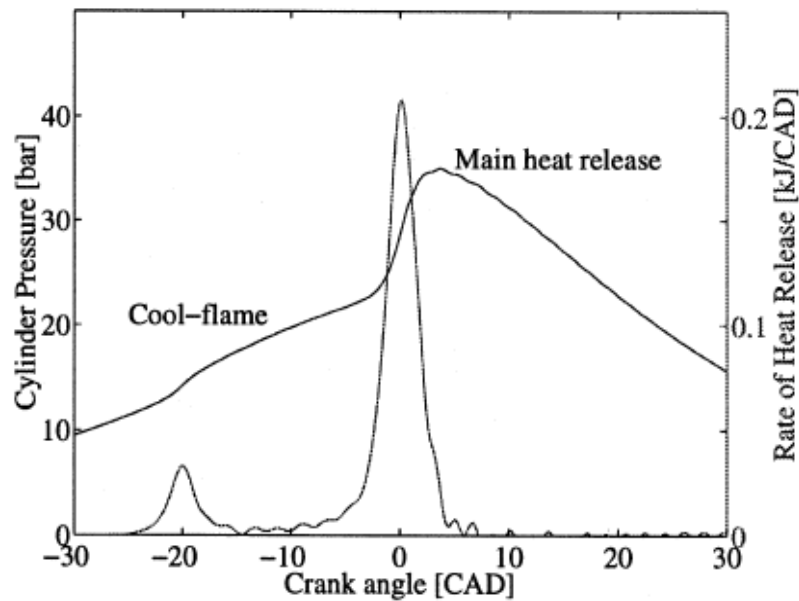
Ce domaine de faible température est caractérisé par une lente réactivité. Le mécanisme d'oxydation se déroule initialement par une réaction d'oxydation entre les molécules d'oxygène présentes dans le milieu réactionnel et le réactif hydrocarboné, RH.

Donc ce domaine est caractérisé par l'apparition d'une « flamme froide » correspondant à une augmentation de la réactivité de l'hydrocarbure RH entre 550 et 650 °K. Cette augmentation est initiée par les radicaux hydroxyles, OH- ces radicaux sont très réactives, qui accélèrent la réactivité globale. Cependant, on observe une diminution de la réactivité entre 650 et 800 °K. Cette zone de transition faible température/haute température correspond au coefficient négatif de température (CNT).

### II.3.1.2 Coefficient négatif de température (CNT)

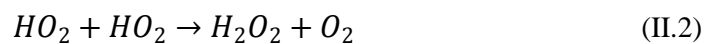
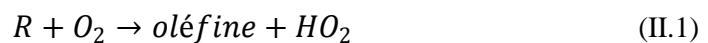
Les domaines de température de la combustion HCCI sont donnés à titre indicatif pour le gazole et dépendent du carburant, de la richesse, du mélange et de la pression [52].

**La Figure II.7**, issue des travaux de Hultqvist [51] montre une évolution typique du taux de dégagement d'énergie pour une combustion HCCI. Le carburant utilisé dans ces travaux est le PRF 35 (mélange de n-heptane et d'iso-octane).



**Figure II.7:** Courbe de dégagement d'énergie en mode HCCI, PRF 35, d'après [51].

Dans cette figure on remarque bien les trois zones de la combustion en mode HCCI. Dans la zone CNT, nous observons une diminution de la réactivité. Cette baisse de réactivité a plusieurs explications. En effet, lorsque la température augmente, les réactions essentielles vont provoquer un déplacement de l'équilibre vers les réactifs (de la droite vers la gauche), ce qui va entraîner une diminution importante de la formation des radicaux OH et une augmentation de celle des radicaux alkyles. Les réactions importantes, dans ce domaine (CNT) sont alors :



L'accumulation des radicaux  $HO_2$ , nombreux et bien moins réactifs que les radicaux OH, entraînent donc une baisse de réactivité significative.

### II.3.1.3 Domaine de haute température

Dans ce domaine et juste après la zone de coefficient négatif de température, les réactions en chaînes ramifiées reprennent le dessus sur les réactions en chaînes droites. Le mécanisme de haute température va être initié par la décomposition du peroxyde d'hydrogène en radicaux hydroxyles, très réactifs, faisant augmenter ainsi la réactivité. Les radicaux  $H_2O_2$  vont se décomposer en deux radicaux OH beaucoup plus réactifs suivant la réaction (II.3).



A plus haute température, la décomposition des radicaux alkyles devient plus rapide que leur réaction avec l'oxygène  $O_2$ . Ces radicaux alkyles vont se décomposer alors en alcènes et petits radicaux, notamment H et  $CH_3$ . Les radicaux méthyles sont consommés par des réactions de terminaison. Les radicaux H formés vont réagir avec des molécules d'oxygène pour produire des radicaux OH et O selon la réaction suivante :



Cette réaction est la plus importante réaction de ramification dans la zone de haute température. Elle est responsable de l'emballement du système. Les alcènes vont se dégrader et/ou s'oxyder jusqu'à la formation de monoxyde de carbone. Le monoxyde de carbone sera ensuite oxydé en dioxyde de carbone  $CO_2$  majoritairement par le radical OH selon la réaction:

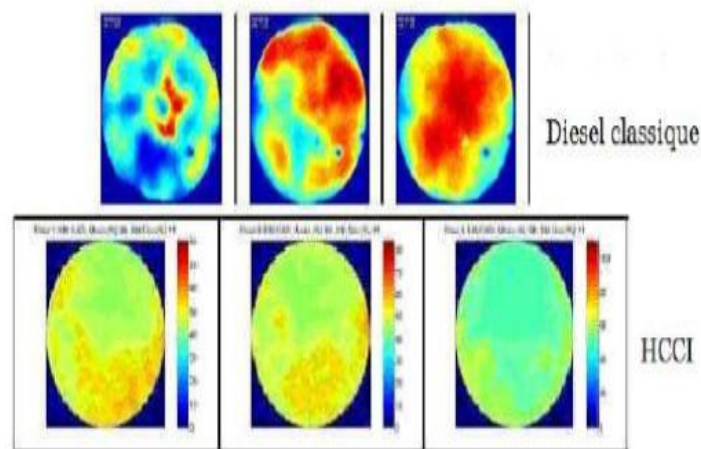


Finalement on résume que le système va subir une nouvelle augmentation de la réactivité avec une vitesse d'oxydation beaucoup plus rapide que dans la zone de faible température. Ce domaine est donc caractérisé par une forte réactivité.

### II.3.2 Comparaison entre le moteur HCCI et le moteur Diesel

Par rapport aux moteurs Diesel, les moteurs HCCI émettent beaucoup moins de  $NO_x$  et de particules de suies. La réduction est en générale d'un ordre de grandeur. La charge en mode HCCI peut être diluée par des gaz d'échappement EGR, ou par stratification.

**La Figure II.8** montre une comparaison entre la progression de la flamme en moteur Diesel classique et en moteur HCCI [53,54]. Cette figure montre que la combustion HCCI est très homogène dans l'espace par rapport à la combustion Diesel où la flamme est localement concentrée. La durée de combustion est beaucoup plus courte. Pour faire fonctionner le moteur en mode HCCI, peu de modifications du moteur Diesel sont nécessaires.



**Figure II.8:** progression de la flamme : comparaison entre moteur Diesel et HCCI [53, 54].

Le mode HCCI est un procédé de combustion qui a un effet important sur la réduction des NOx et des particules de suies et garde un niveau de rendement thermique équivalent à ceux des moteurs Diesel conventionnels [55,56].

### II.3.3 Déroulement de la combustion HCCI

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) (**Figure II.9**). **La Figure II.10** montre un schéma de principe d'une chambre de combustion de moteur alternatif où une charge homogène et pauvre est introduite pendant l'admission au lieu de l'air pur dans un système conventionnel. La charge initiée en plusieurs points de la chambre pendant la compression.

A la différence de la combustion Diesel conventionnelle, la combustion HCCI est dans ce cas une combustion totalement pré-mélangée mais en absence de propagation de flamme. Contrairement à la combustion dans le moteur à allumage commandé, où la charge est aussi pré-mélangée mais où il y a propagation d'une flamme, dans cette configuration, l'allumage s'effectue par la compression du mélange homogène. La combustion a lieu plutôt sur l'ensemble du volume de la chambre dans un intervalle de temps très court. Le résultat est une combustion essentiellement contrôlée par la cinétique chimique à la différence des moteurs à

allumage commandé et Diesel où la synchronisation de l'allumage peut être contrôlée électriquement ou mécaniquement.

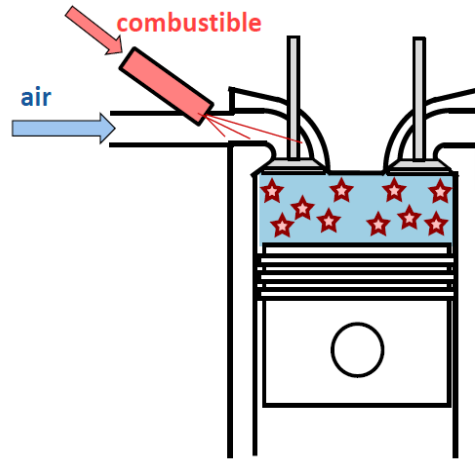


Figure II.9 : Schéma d'un moteur HCCI [42]

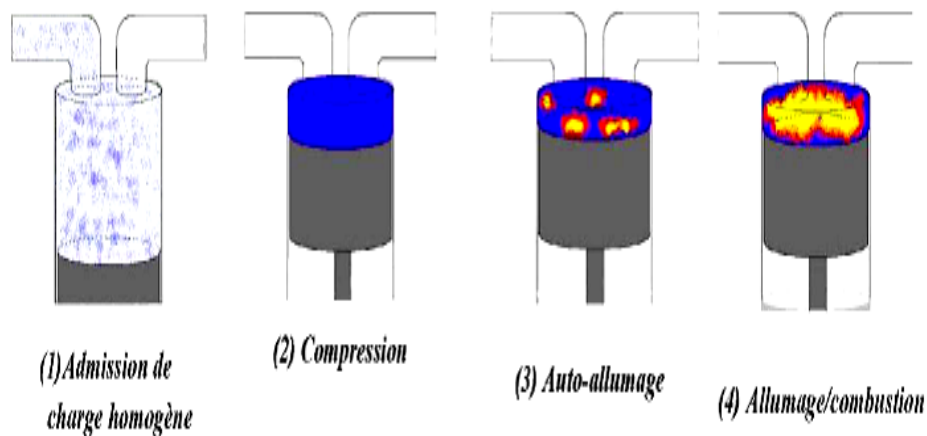


Figure II.10: Principe du mode HCCI [57].

### II.3.4 Les avantages et les inconvénients du moteur HCCI

Le mode de combustion HCCI présente plusieurs avantages comparables à deux autres modes de combustion conventionnels. Par rapport aux moteurs à allumage commandé, les moteurs HCCI sont plus efficaces avec des rendements presque équivalents à ceux des moteurs Diesel. Cette amélioration résulte principalement des trois facteurs suivants :

- Taux de compression très élevé (utilisation d'un taux de compression similaire à ceux des moteurs Diesel).
- Durée de combustion plus courte, car la combustion s'initie simultanément en plusieurs points dans la chambre de combustion (pas de propagation de la flamme à travers la chambre de combustion).
- Peu de pertes de charge pendant l'admission, car l'air est soufflé contrairement aux moteurs à allumage commandé où le mélange d'air et de carburant est admis.

Les moteurs HCCI fonctionnent en mélange pauvre ce qui implique une diminution de la consommation du carburant et ainsi de réduire les émissions de CO<sub>2</sub>.

En mode HCCI on utilise un mélange (air/carburant) homogène ce qui résulte d'une flamme sans front. Cette flamme engendre une baisse des hautes températures ce qui implique une baisse significatif des émissions de NO<sub>x</sub> et des particules.

Un autre avantage très intéressant du mode HCCI est sa ductilité par rapport aux carburants utilisés. Outre les carburants du type Diesel classique, la combustion HCCI est possible avec des carburants comme le gaz naturel, le GPL et l'essence ou encore les carburants oxygénés pour permettre une amélioration de l'allumage.

Malgré le moteur HCCI a beaucoup des avantages. Ce mode à une combustion n'est pas parfaitement complet. Donc il comprend des inconvénients. On les résume dans les points suivants :

- La combustion HCCI est indirectement contrôlée par la cinétique chimique de l'oxydation du carburant. Or ces réactions débutent bien avant l'auto-inflammation principale du carburant, ce qui rend leur contrôle difficile.
- Les températures de combustion moins élevées que celles rencontrées dans les moteurs à allumage commandés ou dans les moteurs Diesel usuels ce qui implique une formation des émissions de HC et CO non négligeables.

➤ L'homogénéité du mélange implique que la combustion principale entraîne de forts gradients de pression ce qui résulte un bruit important dans le moteur.

### II.3.5 Contrôle du moteur HCCI

Le moteur HCCI garde un rendement acceptable (égale au rendement d'un moteur Diesel classique) et réduit les émissions des NOx et des particules mais le contrôle de ce type de moteur est très difficile. Il y a des techniques pour contrôler ce mode de combustion, l'un de ces techniques est faire fonctionner le moteur HCCI avec l'utilisation des EGR. A ces causes et ainsi notre bute de ce mémoire, on cite quelques recherches bibliographiques concernant l'effet des EGR sur le mode de combustion HCCI.

Morimoto étudiait en général l'effet de la recirculation des gaz d'échappement sur la combustion du gaz naturel dans un moteur HCCI. Il trouvait que cette expérience montrait un bon point sur l'étude de la combustion du gaz naturel et ainsi sur l'impact des EGR sur le déroulement de la combustion en mode HCCI [58].

Ricklin étudiait l'effet de l'addition des NOx sur l'auto inflammation du gaz naturel sous les conditions du mode HCCI. IL résultait que l'addition des petites quantités des NOx a un effet très important (contrôle de l'initiation du gaz naturel en combustion HCCI) pour différentes degrés vilebrequin [59].

Venkateswarlu et Murth utilisaient un moteur diesel monocylindre fonctionnant avec du biodiesel dans deux cas [60] :

- Le moteur était fonctionné sans l'utilisation des EGR.
- Le moteur était fonctionné avec l'utilisation des EGR.

Ils ont montré que les émissions des oxydes d'azote (NOx) étaient réduites à cause de l'utilisation des EGR et elles ont été réduites de 5-25% avec branchement d'un EGR HOT sur le circuit d'échappement. Cette étude a montré qu'il y a une réduction suffisante des émissions de NO, CO, HC avec un taux de recirculation des gaz d'échappement 15% [60].

Pascal GIANSETTI a montré que la formation des NOx dépend de la température des gaz mais également de la composition du mélange. L'utilisation des mélanges pauvres

engendre une formation très faible des émissions de NO<sub>x</sub>. Il a aussi remarqué que l'augmentation du taux d'EGR engendre une diminution des NO<sub>x</sub>. Il additionna aussi que l'abaissement de la température dans la chambre de combustion est fonction de la température et de la quantité des EGR introduites. L'augmentation des gaz d'échappement recirculés engendre une combustion incomplète produisant des quantités trop élevées des espèces polluantes [61].

Sorensen a montré qu'il y a une relation entre le taux de recirculation des gaz d'échappement et la quantité formée des espèces NO. Il a trouvé qu'un taux de 30% des EGR permet de réduire 90% de la quantité du NO [62].

Pradeep V, a montré que l'utilisation des taux des EGR a des limites inférieures (jusqu'à 10%, le taux d'EGR est insuffisant pour réduire les émissions des NO<sub>x</sub>) et des limites supérieures (à partir de 20%, il réduit les performances du moteur) [63].

Au regard des différentes analyses effectuées, nous pouvons dire que la plupart des scientifiques montraient pour un taux de recirculation de 15%, la diminution des émissions sera acceptable, quelque soit le carburant utilisé [63, 64, 65].

Les chercheurs Ming Zheng, Graham T. Reader et J. Gary Hawley ont remarqué qu'un taux très élevé des EGR génère une instabilité du moteur ce qui engendre une augmentation des émissions de carbone et de pertes de puissance [65].

Dans le cas de la combustion HCCI, le carburant se produit de façon très précoce dans la chambre de combustion. Cette introduction du carburant conduit à une relative homogénéité du mélange carburant/comburant au moment de la combustion et donc à une combustion essentiellement pré-mélangée. Ce type de combustion est caractérisé par une basse de formation des particules des NO<sub>x</sub>.

Ce mode de combustion est principalement contrôlé par la cinétique chimique [66, 67, 68]. La combustion est initiée localement, lorsque les conditions thermodynamiques et de mélange nécessaires sont atteintes suite à la compression des gaz.

D'un point de vue théorique, si on a un mélange homogène, le carburant s'enflamme simultanément dans tous les points de la chambre de combustion: il s'agit alors d'une

inflammation en masse. Pourtant, il est très difficile d'obtenir un mélange parfaitement homogène ce qui engendre des hétérogénéités, que ce soit en température ou en richesse.

La combustion se fait plutôt en plusieurs étapes. Il ne s'agit pas d'une propagation de flamme mais plutôt d'une auto inflammation successive : les différentes zones s'allument les unes après les autres [69].

### **II.3.6 Paramètres moteur influençant la combustion HCCI**

Dans le cas de la combustion HCCI, l'introduction du carburant dans la chambre de combustion se produit de manière très précoce. Ceci conduit à une relative homogénéité du mélange entre le carburant et le comburant au moment de la combustion et donc à une combustion essentiellement pré-mélangée. Les paramètres de contrôle du moteur vont avoir un rôle très important dans le calage de la combustion. Il est nécessaire d'étudier l'effet de la richesse, de la pression d'admission, du régime et de la température d'admission sur le contrôle de la combustion HCCI.

#### **II.3.6.1 Influence de la richesse**

##### **II.3.6.1.1 Influence sur le délai d'initiation**

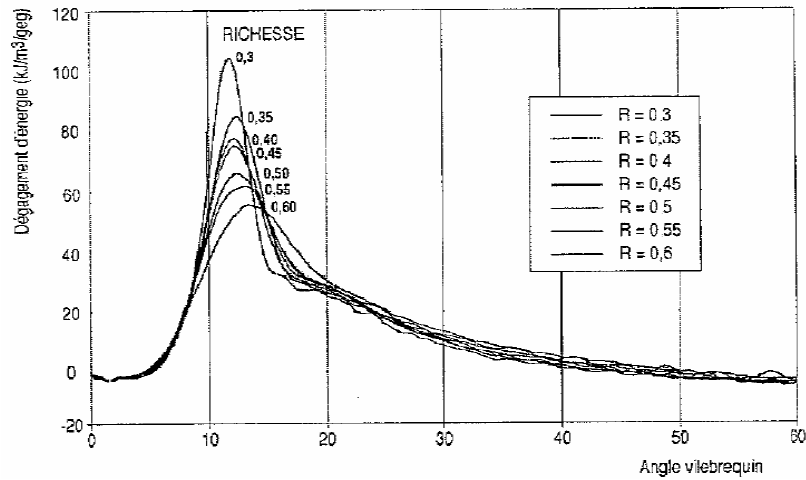
En mélange pauvre, l'augmentation de la richesse entraîne une diminution du délai d'auto-inflammation, ce qui implique une diminution de la durée de combustion, d'où dans le cas du mode HCCI une combustion rapide et violente.

Certains auteurs montrent que l'augmentation de la richesse n'influence pas l'initiation de la combustion [70, 71] et d'autres montrent que l'augmentation de la richesse peut avoir un effet sur l'initiation de la flamme froide ou de la flamme chaude [72,73].

##### **II.3.6.1.2 Influence sur le déroulement de la combustion et le dégagement de la chaleur d'initiation**

En première approche, plus la richesse est grande, plus le pic de dégagement de chaleur est important et plus la durée de combustion est courte [71]. Des essais sur un moteur avec EGR sont réalisés par Renault. Les résultats montraient que l'augmentation de la richesse entraîne une diminution du pic de dégagement de chaleur ainsi qu'une augmentation de la durée de combustion (**Figure II.11**). Ces résultats montrent que l'augmentation du taux

d'EGR entraîne un dégagement d'énergie plus faible et une combustion plus lente par l'abaissement de l'oxygène.

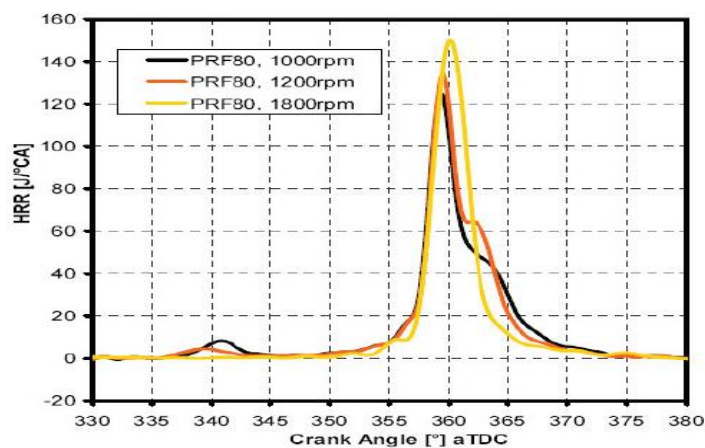


**Figure II.11** : Influence de la richesse sur le dégagement de chaleur (document Renault)

### II.3.6.2 Influence du régime moteur

#### II.3.6.2.1 Influence sur l'initiation de la combustion

Beaucoup des travaux sont fait sur cette axe et ils trouvaient que plus le régime moteur est élevé, plus l'initiation de la combustion est retardée. Cependant, dans le cas où le pic de dégagement d'énergie concorde le PMH, l'initiation de la flamme froide se fera d' autant plus tôt, que le régime est élevé (**Figure II.12**) [73].



**Figure II.12** : Influence du régime moteur sur le dégagement d'énergie avec une combustion calée au PMH, expériences, PRF 80 [73].

### II.3.6.2 Influence sur le dégagement d'énergie et la durée de combustion

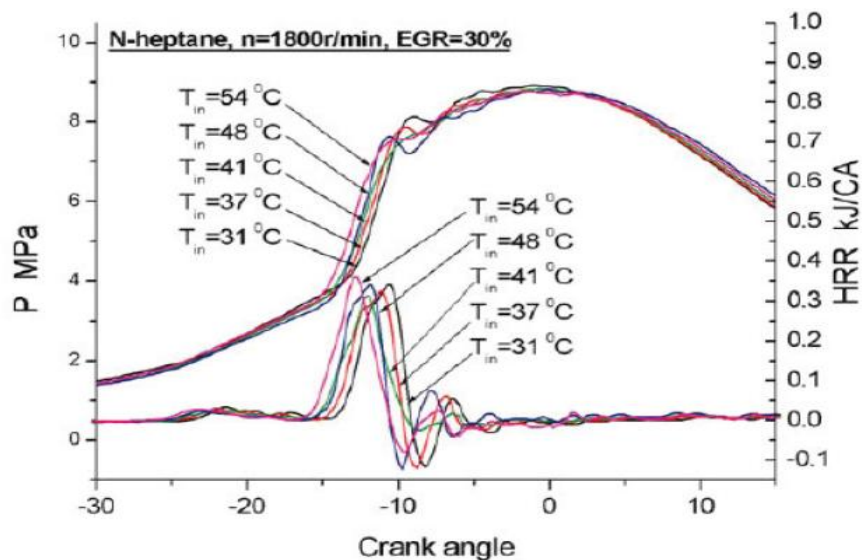
Il est intéressant de noter que quel que soit le régime moteur, la durée totale (en temps) de combustion reste constante puisque la cinétique chimique reste la même quel que soit le régime. La durée de combustion (en degrés vilebrequin) est liée au régime moteur : plus la vitesse de rotation du moteur est élevée plus la durée de combustion est longue (**Figure II.12**).

### II.3.6.3 Influence de la température d'admission

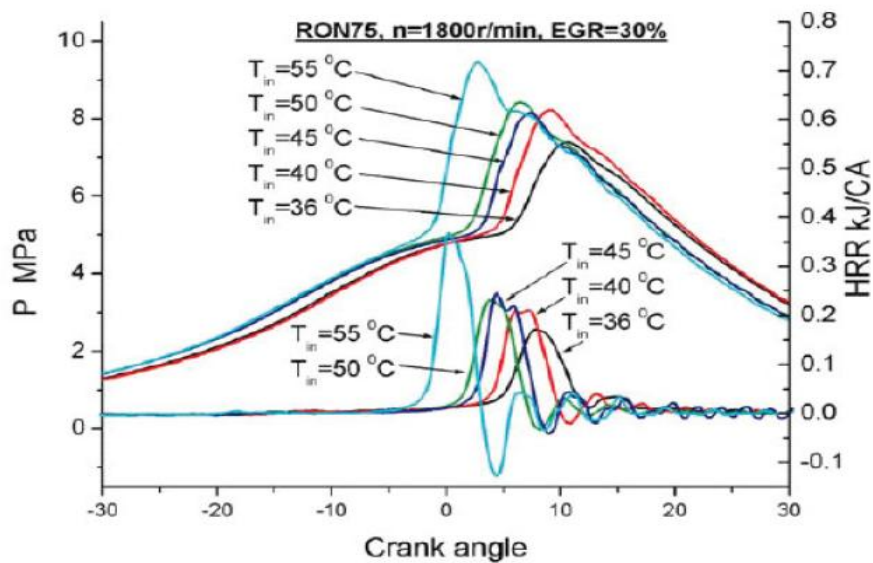
Les gaz EGR sont très chauds. Il doit réguler leur température avant de l'introduction dans la chambre de combustion.

#### II.3.6.3.1 Influence sur l'initiation de la combustion

La température est un paramètre nécessaire pour la cinétique d'oxydation des hydrocarbures c'est pour cela, l'effet de la température d'admission en mode HCCI joue un rôle prédominant sur l'initiation de cette combustion. Plusieurs études ont été réalisées sur l'impact de la température d'admission sur l'initiation de la combustion HCCI. Il a été montré que l'augmentation de la température d'admission engendre une réduction du délai d'auto-inflammation (**Figures II.13 et II.14**) [74].



**Figure II.13** : Influence de la température d'admission sur la pression cylindre et le dégagement de chaleur, par expérience, n-heptane [74].



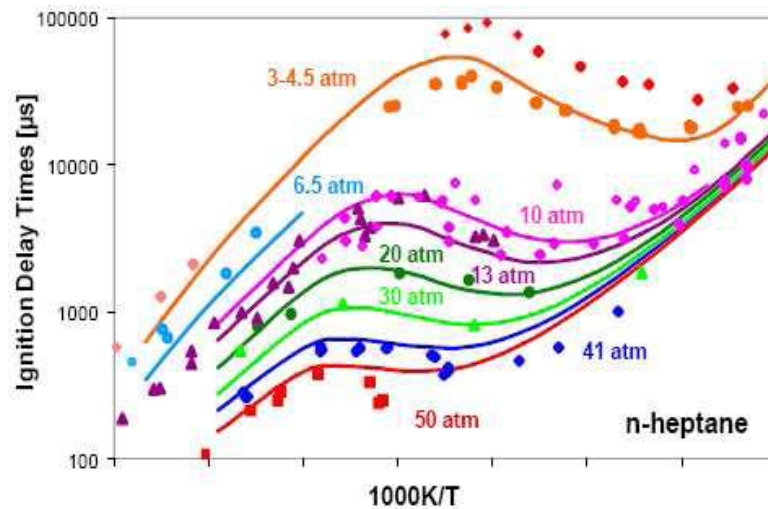
**Figure II.14** : Influence de la température d'admission sur la pression cylindre et le dégagement de chaleur, par expérience, RON75 [74].

### II.3.6.3.2 Influence sur le dégagement d'énergie et le déroulement de la combustion

La variation de la température d'admission va entraîner une variation de la pression cylindre en cours de la combustion (**Figures II.12 et II.13**). Plus la température d'admission est élevée, plus le pic de dégagement d'énergie est élevé et plus la durée de combustion est courte (**Figures II.12 et II.13**).

### II.3.6.4 Influence de la pression

La pression régnant dans le cylindre a un impact important sur le déroulement de la combustion. En effet, une augmentation de celle-ci entraîne un dégagement d'énergie plus élevé durant la flamme froide [75,76], sur une durée plus longue [75,76]. De même, la plus fortes pressions favorise la formation et la décomposition du peroxyde d'hydrogène  $\text{H}_2\text{O}_2$ , qui est responsable à l'apparition de la combustion principale. Par conséquent, le délai entre la flamme froide et la combustion principale est plus court: la zone de NTC est ainsi réduite [76,77]. Plus la pression est importante, plus la flamme froide est longue. Cette flamme se prolonge jusqu'à des températures plus élevées (**Figure II.14**) [77].



**Figure II.14** : Évolution des délais d'inflammation en fonction de la température pour différentes pressions, n-heptane,  $\phi = 1$ , d'après [77].

## II.4 CONCLUSION

Dans ce chapitre on a vu les différents types de moteur à combustion interne et on a conclu que le moteur HCCI est une solution très importante pour plusieurs raisons :

- Le coté environnemental : réduction des émissions polluantes tels que les NOx et les particules de suie.
- Le coté économique : le moteur HCCI fonctionne en mélange pauvre ce qui implique une réduction de la consommation du combustible.
- Le coté technologique : le moteur HCCI a un rendement équivalent au rendement d'un moteur diesel classique.

Le contrôle de ce mode est très difficile mais l'utilisation de la recirculation des gaz d'échappement EGR est une technique intéressante pour résoudre ce problème et elle montrait son utilité dans ce domaine de combustion. A cet effet, on étudiera dans le chapitre suivant la chimie des EGR.



**CHAPITRE III :**  
**La recirculation des gaz**  
**d'échappement**

---

## CHAPITRE III :

### La recirculation des gaz d'échappement

III.1 Introduction .....	55
III.2 La recirculation des gaz d'échappement .....	55
III.2.1 Historique. ....	55
III.2.2 Les différents types de vanne EGR .....	55
III.2.3 Le principe des EGR .....	56
III.2.4 Les différents types des EGR .....	57
III.2.5 Les effets des EGR .....	57
III.2.6 Les EGR et les émissions polluantes .....	58
III.2.7 Les avantages des EGR .....	59
III.2.8 Les inconvénients des EGR .....	59
III.2.9 Description du dispositif et envisageable défaillance .....	59
III.2.10 Le taux de recirculation des gaz d'échappement .....	61
III.2.11 Les carburants .....	61
III.2.12 Formule du taux d'EGR .....	62
III.3 La composition des gaz brûlés recyclés .....	63
III.3.1 Impact des espèces inertes : CO <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> et H <sub>2</sub> O .....	63
III.3.2 Impact du CO sur la combustion .....	63
III.3.3 Impact des NO <sub>x</sub> sur la combustion .....	65
III.3.3.1 Régime des basses températures .....	65
III.3.3.2 Régime des températures intermédiaires NTC .....	66
III.3.3.3 Régime des hautes températures .....	66
III.3.4 Impact de la présence de NO <sub>2</sub> sur la combustion en moteur .....	67
III.3.5 Impact du formaldéhyde CH <sub>2</sub> O .....	68
III.3.5.1 Mécanisme d'oxydation du CH <sub>2</sub> O .....	68
III.4.6 Impact des hydrocarbures imbrûlés .....	69
III.5 Conclusion .....	71

### **III.1 INTRODUCTION**

Le recyclage des gaz d'échappement (EGR) est une méthode fiable et efficace pour la réduction des émissions nocives : Grâce à l'apport de gaz d'échappement, le taux d'oxygène dans le mélange air-carburant est abaissé et la température de combustion baisse dans les cylindres. Du fait que l'oxyde d'azote NO<sub>x</sub> nocif est principalement développé à hautes températures et à fortes pressions, la concentration en NO<sub>x</sub> expulsée dans l'air peut être réduite jusqu'à 50% [78]. Par ailleurs, la composition de particules de suie est réduite d'environ 10% sur les moteurs Diesel [78]. Le recyclage des gaz d'échappement n'est actionné qu'à certains points de fonctionnement. Dans ce chapitre on présente une généralité sur la recirculation des gaz d'échappement EGR.

### **III.2 LA RECIRCULATION DES GAZ D'ECHAPPEMENT**

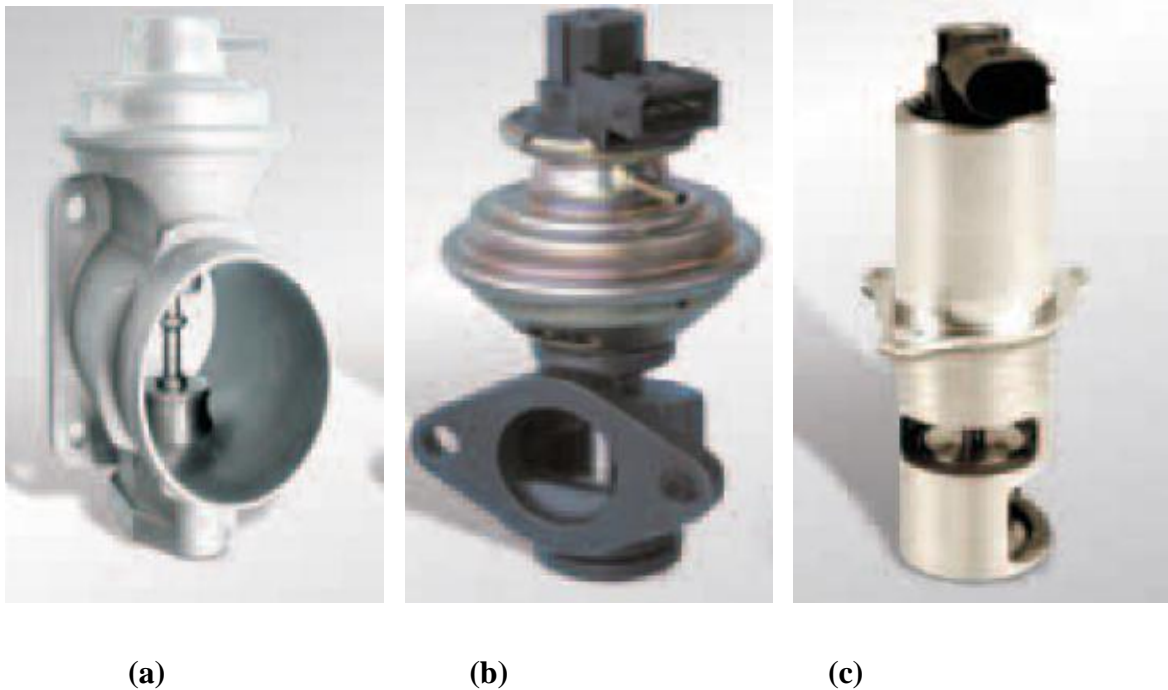
#### **III.2.1 Historique.**

Au début des années 1970, le monde a compris l'impact nocif de certains gaz issus des différents secteurs d'activités, sur l'environnement et ainsi que sur la santé des humains. Plusieurs techniques sont utilisées pour lutter contre ces émissions polluantes. L'utilisation de la recirculation des gaz d'échappements est l'un de ces techniques qui est utilisée à l'industrie de l'automobile et des moteurs à combustion interne. A ce moment naît alors le système EGR : Exhaust Gas Recirculation. Le principe de fonctionnement de cette technique est de faire circuler une partie des gaz d'échappement issus du moteur, jusqu'à l'admission de ce moteur. Le principal élément de ce système, est une vanne, qui régule la recirculation des différents gaz, et qui s'appelle la vanne EGR.

#### **III.2.2 Les différents types de vanne EGR**

La vanne de recyclage des gaz EGR est montée sur le collecteur d'échappement ou sur le système d'admission, ou encore elle est disposée dans une conduite d'échappement thermorésistante reliant le collecteur d'échappement avec le système d'aspiration. En raison de leur taux de refoulement important, les vannes EGR de moteurs Diesel possèdent de grands diamètres d'ouverture à titre de comparaison avec les vannes utilisées en moteurs essence. On distingue plusieurs modèles de vanne EGR, et on cite quelques types de vanne EGR de moteur Diesel existés dans les littératures.

- Les vannes EGR pneumatiques sont actionnées par le vide créé par des vannes électromagnétiques (**figure III.1.a**).
- Les vannes EGR pneumatiques avec détecteur de position (**figure III.1.b**).
- Les vannes EGR électriques ou électromotrices sont actionnées directement par la centrale de commande et n'ont plus besoin de vide ni d'électrovanne (**figure III.1.c**).



**Figure III.1. :** Les vannes EGR d'un moteur Diesel [78] :

- (a) vanne EGR pneumatique. - (b) vanne EGR pneumatique avec détecteur de position. - (c) vanne EGR à double valve électrique.

### III.2.3 Le principe des EGR

Les moteurs Diesel fonctionnent en mélange pauvre, c'est-à-dire contenant une grande quantité d'air pour une faible dose de gasoil. Ce point, associé à la température élevée qui règne dans les chambres de combustion du moteur, conduit à l'apparition d'oxydes d'azote (NO<sub>x</sub>). En réinjectant une partie des gaz d'échappement dans l'air frais que le circuit

d'admission fournit au moteur, l'EGR réduit leur formation. En effet, cette recirculation des gaz d'échappement ralentit la combustion du mélange et absorbe une partie des calories. De plus, elle réduit la concentration en oxygène du mélange. Ces deux points convergent pour réduire la formation de NOx. Cependant, celle-ci se paie par un accroissement du taux de particules que dégage la combustion. Il faut donc ajuster précisément la quantité de gaz recyclé afin de trouver le meilleur compromis entre réduction des NOx et formation de particules. Un réglage délicat puisqu'il est fonction du régime moteur, de sa charge et de la température.

La recirculation des gaz d'échappement, est un système qui permet d'injecter certains gaz issus de la combustion du carburant dans la chambre de combustion des moteurs (HCCI dans notre cas) au niveau de l'admission. La vanne EGR régle alors un taux de gaz d'échappement, pour la rentrer à l'admission. L'ouverture et la fermeture de la vanne est réalisée dès que les différentes conditions sont réunies (stabilisation du moteur...).

#### III.2.4 Les différents types des EGR

Les types d'EGR sont divisés principalement en deux groupes: l'EGR à chaud (Hot EGR), et l'EGR avec refroidissement (cold EGR).

➤ L'EGR à chaud sont moins coûteux, plus facile à mettre en œuvre, et de permettre d'étudier l'influence de la température des gaz sur l'engin [63].

➤ Avec refroidissement, il y a l'avantage de réduire la densité des gaz recyclés, et ainsi de réduire la formation de NOx, mais les gaz deviennent alors corrosifs. Il existe des difficultés de mise en place du système de refroidissement, et surtout, il est très difficile de pouvoir normalement refroidir ces gaz à charge complète [63, 79].

#### III.2.5 Les effets des EGR

L'utilisation de l'EGR peut être étudié sous plusieurs angles, mais il existe trois principaux effets : **l'effet thermique, l'effet chimique, l'effet de dilution.**

**L'effet thermique** se résume en l'augmentation de la chaleur entrante, causée par la forte chaleur spécifique des CO<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O, par rapport à celles des O<sub>2</sub> et N<sub>2</sub> [79].

La dissociation de la vapeur d'eau et du CO<sub>2</sub> recirculés pendant la combustion constitue, **l'effet chimique [79, 80]**.

**L'effet dilutif**, est produit par la diminution de la concentration en O<sub>2</sub> à l'entrée, ce qui a pour conséquence de ralentir la vitesse de mélange entre le carburant et l'oxygène **[79, 80]**.

### III.2.6 Les EGR et les émissions polluantes

Actuellement, le besoin à un moteur à combustion interne très performant est croissant. Les performances des moteurs doivent être suffisamment élevées sans dépasser les limites des normes anti polluant.

Les émissions polluantes d'oxydes d'azote (NOx) dépendent essentiellement de la composition du mélange des gaz introduits dans les cylindres d'un moteur à combustion interne. Pour réduire les émissions d'oxydes d'azote, le mélange doit être composé de gaz neutres qui n'influence pas directement sur la combustion, mais qui a un effet de dilution de l'air frais introduit dans les cylindres. Cette dilution de l'air frais par les gaz neutres permet de réduire les émissions d'oxydes d'azote.

L'introduction des gaz neutres dans la chambre de combustion d'un moteur à combustion interne existait en plusieurs formes.

Une solution consiste à recycler une partie des gaz brûlés, qui restent dans le cylindre lors de la fin de la phase d'échappement, pour la prochaine phase d'admission. Cette recirculation qui permet le mélange d'une partie des gaz brûlés avec les gaz introduits lors de l'admission s'appelle recirculation interne GBR.

Une autre solution consiste à utiliser une boucle de recirculation partielle des gaz d'échappement. Cette boucle dite EGR est une boucle de recirculation externe au moteur et elle est utilisée pour obtenir ces objectifs :

➤ remplacer une partie de l'air frais entrant dans le moteur par des gaz d'échappement pour diminuer la concentration en oxygène. Cette diminution d'oxygène engendre une diminution de la température dans le cylindre du moteur à la fin de la phase de combustion ce qui implique une réduction des NOx, et ainsi des particules de suies.

➤ augmenter la capacité calorifique du mélange par la présence de dioxyde de carbone et de la vapeur d'eau contenu dans les gaz d'échappement ; ainsi la température de combustion sera plus faible pour une énergie équivalente.

Cependant, les gaz d'échappement étant plus chauds que l'air frais, ce qui conduit à une augmentation néfaste de la température à l'admission entraînant une diminution de la performance du moteur. Le choix de la valeur du taux d'EGR est doit être précisé pour diminuer les émissions de NO<sub>x</sub> désirée et de garder les meilleurs performances du moteur. Le taux d'EGR choisi doit être adapté à chaque condition de charge et de régime de rotation du moteur afin de réduire les oxydes d'azote, les émissions de particules et la perte de rendement du moteur.

Une fraction des gaz d'échappement est introduite dans le collecteur d'admission du moteur dans le but de diminuer les émissions polluantes. Ces gaz d'échappement sont recyclés à fort taux afin qu'une combustion homogène Diesel soit possible. Ces gaz d'échappement sont utilisés aussi pour contrôler la combustion HCCI à cet effet plusieurs études sont menées pour comprendre l'influence de ces gaz sur les mécanismes de combustion.

### **III.2.7 Les avantages des EGR**

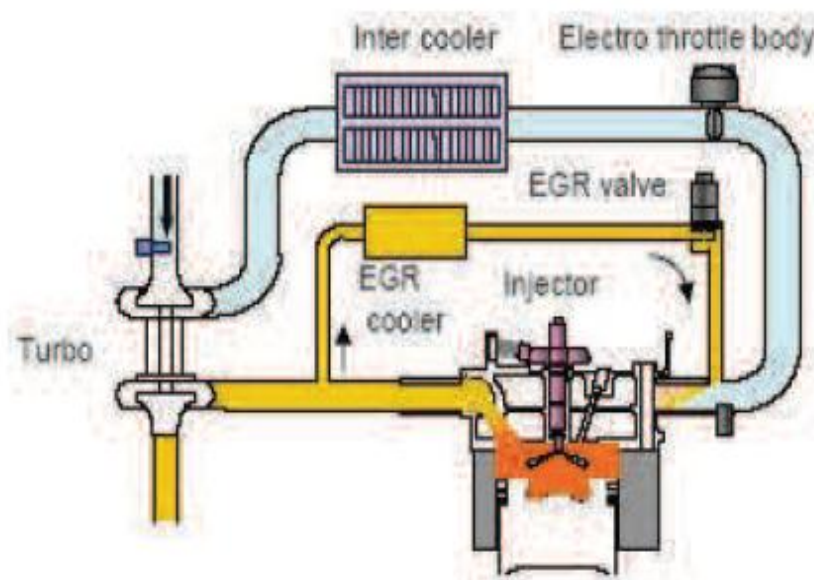
Le système EGR est un système anti-pollution installé par les constructeurs pour satisfaire, à moindre coût, les normes européennes. Ce dispositif, adopté depuis longtemps sur la majorité des moteurs Diesel, a pour effet de ralentir la combustion du mélange et d'absorber une partie des calories, ce qui diminue la température de combustion. L'introduction des EGR à l'admission du moteur limite la présence d'oxygène dans le cylindre. Ces deux effets entraînent une diminution des oxydes d'azote NO<sub>x</sub>.

### **III.2.8 Les inconvénients des EGR**

L'EGR augmente la production des particules de suies. Il faut par conséquent trouver un compromis entre la diminution des oxydes d'azote et l'augmentation de particules. Pour résoudre ce problème, les gaz recerclés sont par conséquent refroidis. Le fait d'abaisser la température des gaz réinjectés diminue la production de particules pour le même taux d'EGR.

### III.2.9 Description du dispositif et envisageable défaillance

Le dispositif de dépollution par recirculation des gaz d'échappement est généralement constitué d'un échangeur thermique conçu pour refroidir les gaz brûlés et d'une vanne, nommée couramment vanne EGR, qui vient régler le débit de gaz brûlé vers le collecteur d'admission (**Figure III.2**) [81]. Cette vanne est pilotée par le calculateur de contrôle moteur. Les causes de panne la plus fréquentes sur les systèmes EGR sont des vannes collées. Les gaz d'échappement recyclés contiennent des particules de suie en plus des émissions nocives gazeuses, en particulier sur les véhicules Diesel. S'il y a de l'huile dans l'air d'aspiration, la vanne se colle et, à un certain moment, elle ne peut plus résister. La vanne EGR ne peut plus s'ouvrir et reste en position ouverte. Le moteur a alors des ratés, son ralenti est irrégulier ou il manque de puissance.



**Figure III.2** : Principe de fonctionnement de la vanne EGR [81].

La panne la plus courante de ce type de dispositif est l'encrassement de la vanne, ce qui entraîne son blocage en position ouverte, et par suite, une perte de puissance, des défauts d'accélération, et dans certains cas des fumées et des ratés moteur. La figure ci-dessous représente un schéma de deux vannes EGR. Ce schéma montre un certain défaut de la vanne EGR (**Figure III.3**).



**Figure III.3 :** Encrassement d'une vanne EGR [78].

### **III.2.10 Le taux de recirculation des gaz d'échappement**

Lors de la recirculation des gaz d'échappement, il est important de connaître le taux de recirculation des s'il est trop élevé, il risque d'endommager le moteur, et s'il est trop bas, le système EGR n'aura aucun effet.

Au regard des différentes analyses effectuées, nous pouvons dire que la plupart des scientifiques optent pour un taux de recirculation de 15%, qui d'après eux est l'optimum, quelque soit le carburant utilisé [82, 83].

### **III.2.11 Les carburants**

Au travers de l'étude du système EGR, de nombreux chercheurs ont expérimenté divers carburants, pour alimenter les moteurs. Le gasoil a beaucoup été utilisé [79, 84] souvent, il a été mélangé avec du gaz [83].

L'utilisation des mélanges contenant du gasoil, est plus rependue, mais tous ces carburants purs ou mélanges donnent des résultats assez encourageants combinés à l'EGR pour la réduction des NOx, ce qui empêche de dire exactement lequel est plus avantageux en termes de réduction de la pollution.

### III.2.12 Formule du taux d'EGR

Le tableau ci-dessous rassemble quelques formules concernant le taux de recirculation.

**Tableau III.1** : Formules du taux d'EGR

Formule	Abréviations	Auteurs
$\%EGR = \frac{m_e}{m_a + m_e + m_f} \times 100$	$m_e$ : débit massique EGR $m_a$ : débit massique air $m_f$ : débit massique fuel	MING Zheng. [85]
$\%EGR = \frac{megr}{mair + mfuel} \times 100$	m ; débit massique	H.E.SELEH [83]
$\%EGR = \frac{megr}{ment.tot} \times 100$	M : débit massique	Frédéric SWARTLING [86]
$\%EGR = \frac{Xco2int}{Xco2extr} \times 100$	$X_{CO_2int}$ : concentration entrant $X_{CO_2extr}$ : concentration sortant	Alain MAIBOON [79]
$\%EGR = \frac{intake[CO_2]}{exhaust[CO_2]}$	$[CO_2]$ : concentration du $CO_2$	M.ZHENG. [87]
$\%EGR = \frac{Megr}{Mi} \times 100$	$M_i$ : masse totale du mélange à l'entrée	ARGAWALD. [82]
$\%EGR = \frac{[CO_2]int - [CO_2]air}{[CO_2]int.} \times 100$	$[CO_2]_{air}$ : concentration du $CO_2$ dans l'air.	W.YING [88]
$\%EGR = \frac{Mair\ sans - Mair\ avec}{Mair\ sans} \times 100$	$M_{air\ sans}$ : masse d'air sans EGR $M_{air\ avec}$ : masse d'air avec EGR	V.PRADEEP [63]
$\%EGR = \frac{[CO_2]int - [CO_2]atm}{[CO_2]ext - [CO_2]atm} \times 100$	$[CO_2]_{atm}$ : concentration $CO_2$ de l'atmosphère	D.ARMAS [89]

### III.3 LA COMPOSITION DES GAZ BRÛLÉS RECYCLE.

La combustion dans les moteurs est incomplète qui résulte d'un mélange de  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ , les hydrocarbures imbrûlés, et d'autres produits d'oxydation incomplète.

Une étude approfondie est faite sur certaines espèces ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{NO}$  et quelques hydrocarbures imbrûlés légers pour voir leur réactivité au contact d'un mélange air-carburant.

#### III.3.1 Impact des espèces inertes : $\text{CO}_2$ , $\text{N}_2$ et $\text{H}_2\text{O}$

$\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2$  et la vapeur d'eau sont généralement considéré comme des espèces inertes qui ne participent à aucune réaction chimique. Ils ont un effet de diluant sur la cinétique d'oxydation des hydrocarbures donc ils ont un impact sur la cinétique globale du mécanisme d'oxydation.

L'impact du  $\text{CO}_2$  et de la vapeur d'eau sur l'oxydation des hydrocarbures est remarquable grâce à leurs  $C_p$  très supérieur au  $C_p$  de l'air ambiant. La présence de  $\text{CO}_2$  et de  $\text{H}_2\text{O}$  dans les gaz brûlés impose donc une augmentation du  $C_p$  global par rapport un mélange des mêmes réactifs.

$\text{CO}_2$  et la vapeur d'eau retardent l'initiation, diminuent le pic de dégagement de chaleur et donc allonge la durée de la combustion [87 ; 90 ; 91].

Le Cong a fait une expérience au moyen d'un réacteur auto-agité pour voir l'effet du  $\text{CO}_2$  et du  $\text{H}_2\text{O}$  sur l'oxydation du mélange  $\text{CH}_4/\text{H}_2$ . Il constate que la présence de ces deux constituants joue un rôle d'un inhibiteur [92].

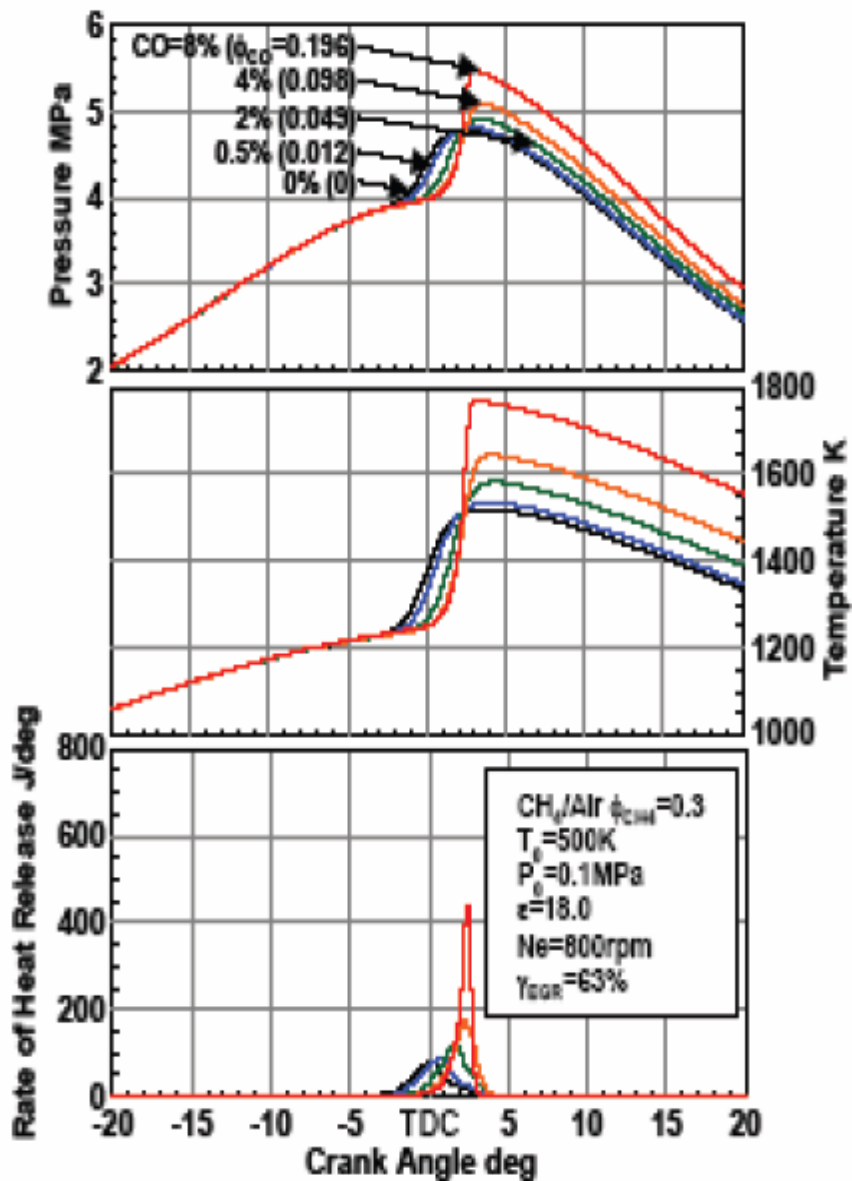
#### III.3.2 Impact du CO sur la combustion

G. Moréac montre qu'il n'y a aucun effet de l'ajout des particules de CO sur l'oxydation du n-heptane, de l'isooctane, du méthanol et du toluène [93].

Subramanian étudiait numériquement l'impact des ajouts du CO sur l'oxydation du n-heptane et trouvait qu'il y a un impact très complexe en fonction de la température [94].

Machrafi réalisait une simulation pour un PRF40 et il trouvait que l'absence de l'influence de l'ajout du CO est le résultat de la formation d'un radical moins réactif ( $H\dot{O}_2$ ). Ce radical est formé à la présence du CO [95].

Sato a montré qu'il y a un effet de l'ajout du CO sur l'oxydation du méthane en mode HCCI. Il a conclu que l'ajout du CO entraîne une augmentation du délai d'auto-inflammation, ainsi que des pics de pression, de température et de dégagement de chaleur plus marqués (voir la **Figure III.4**) [96].



**Figure III.4** : Pression, température et dégagement de chaleur pour des taux variable de CO initial, simulation, CH<sub>4</sub> [96].

Les études expérimentales de shudo [97] montraient l'influence du CO sur la combustion HCCI avec DME et elles montraient que plus les teneurs ajoutés du CO sont élevées, plus le délai d'auto-inflammation est élevé, plus la durée de combustion est raccourcie, et plus les pics de pression et de température sont élevés.

### III.3.3 Impact des NOx sur la combustion

Les oxydes d'azote sont des composés qui réagissent de façon remarquable dans le cas d'oxydation des hydrocarbures. Des quantités faibles de ces constituants ont un impact très important sur l'oxydation de différents combustibles. Pour le moteur HCCI, les oxydes d'azote et les particules de suies sont majoritaires dans les gaz d'échappement, c'est pour ce la on concentre sur l'étude de l'impact des NOx sur la combustion. Divers auteurs ont pu observer des effets accélérateurs ou inhibiteurs sur l'oxydation des différents combustibles (Moréac. [98], Dubreuil.2006 [99] et Glaude.2005 [100]).

On sait que la combustion en mode HCCI passe par trois régimes de température (région de basse température, région intermédiaire dite NTC et région des hautes températures). Donc, on va faire une étude sur l'effet des NOx sur la combustion dans chaque régime.

#### III.3.3.1 Régime des basses températures

Plusieurs études ont été effectuées sur l'oxydation des hydrocarbures en présence du NO, à basse température. Ces études montraient que de faibles quantités du NO peuvent avoir un effet accélérateur sur l'oxydation des hydrocarbures, tels que le n-heptane par exemple (le n-heptane est le combustible qu'on a utilisé dans notre étude). Par contre, pour des ajoutes à forte concentration des NO l'effet dans ce cas là est inhibiteur. Deux réactions soient possibles, un inhibiteur (la réaction III.1 ou la réaction III.2 suivie par la réaction III.3) et un promoteur (soit la réaction III.2 suivie par la réaction III.4 ou la réaction III.5).



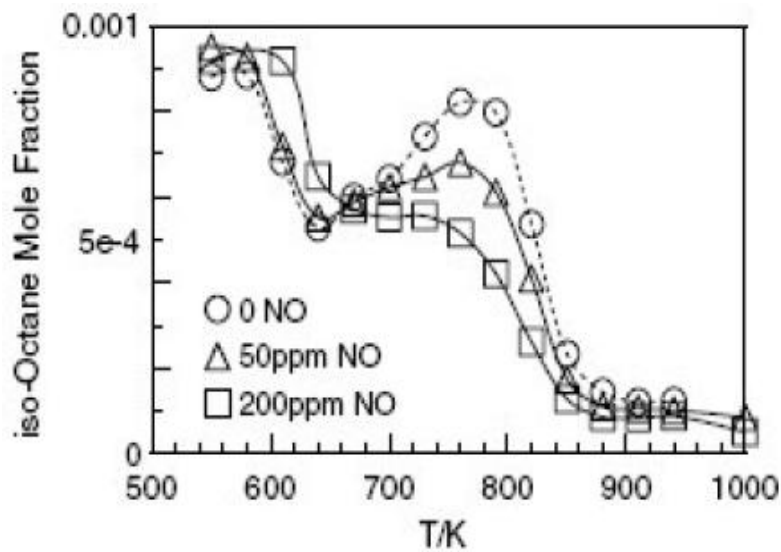


### III.3.3.2 Régime des températures intermédiaires NTC

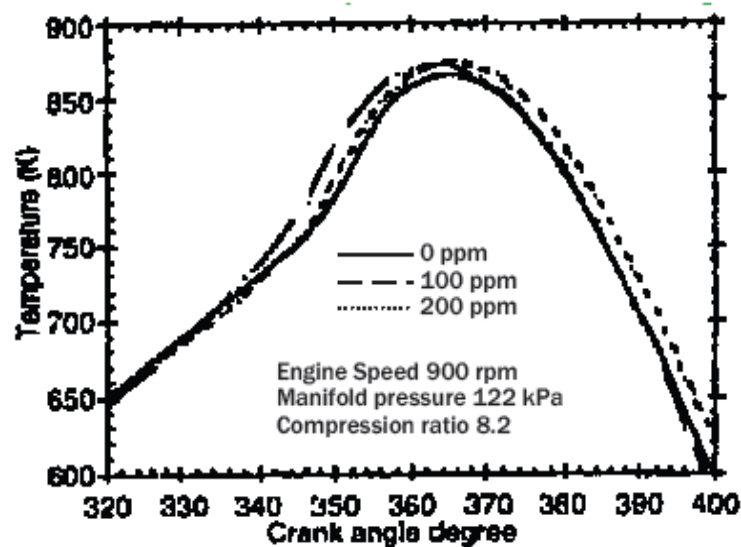
Dans le domaine des températures intermédiaires, on remarque que l'augmentation de la température dans cette zone va provoquer une diminution de la réactivité. Cette diminution de la réactivité est expliquée par la réaction III.5, où le déplacement de l'équilibre de cette réaction est vers les réactifs (de la droite vers la gauche), ce qui va entraîner une diminution importante de la formation des radicaux OH et une augmentation de celle des radicaux HO<sub>2</sub>. L'accumulation des radicaux HO<sub>2</sub>, nombreux et bien moins réactifs que les radicaux OH, entraînent donc une baisse de réactivité. La présence du NO et la baisse de l'oxygène va entraîner une oxydation des radicaux HO<sub>2</sub> en OH, radical beaucoup plus réactif, ce qui pourra permettre une accélération de l'oxydation des hydrocarbures en présence du NO.

### III.3.3.3 Régime des hautes températures

Les figures III.5 [101] et III.6 [102] montrent l'impact de la présence du NO à haute température. La figure III.5 présente l'impact de la présence du NO selon sa concentration sur l'oxydation de l'isooctane. Ces expériences sont faites en réacteur auto-agité pour un mélange d'isooctane/n-heptane et elles montraient que la présence du NO a un effet promoteur. Cet effet est expliqué par la réduction de la zone NTC et la rapidité de l'oxydation des hydrocarbures en présence du NO dans le domaine des hautes températures. **La figure III.6** présente l'impact de l'addition du NO sur la température du cylindre d'un moteur fonctionne en PRF87. Cette expérience montre que l'influence du NO sur la combustion des hydrocarbures dans les moteurs entraîne une diminution du délai d'auto-inflammation dans le cas d'une faible concentration ajoutée, mais dans le cas d'une forte concentration ajoutée, le délai d'auto-inflammation n'était pas changé [102].



**Figure III.5 :** Impact de la présence de NO selon sa concentration sur l'oxydation de l'isooctane, expériences en réacteur auto-agité, mélange isooctane et n-heptane [101].

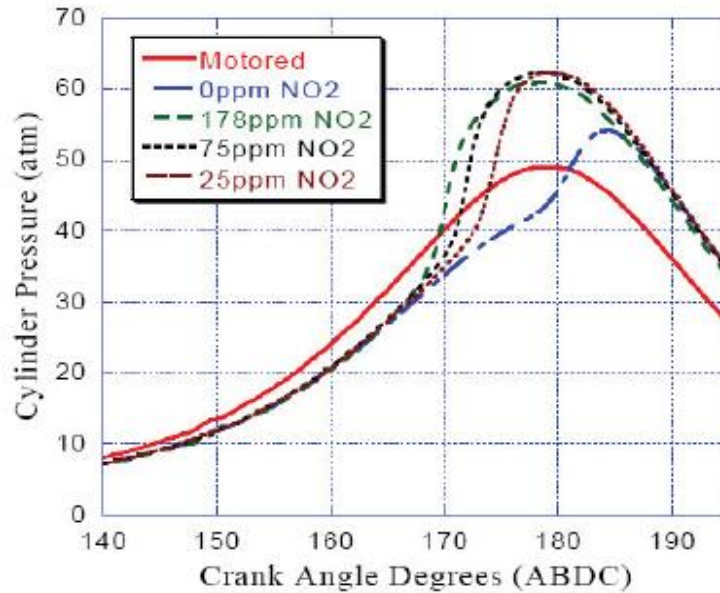


**Figure III.6 :** Effet de l'addition de NO sur la température cylindre, expériences, PRF87 [102].

### III.3.4 Impact de la présence de NO<sub>2</sub> sur la combustion en moteur

On a déjà vu dans le chapitre I que la formation des NO<sub>2</sub> est négligeable à l'échappement, ces pour ce la, très peu d'études ont été réalisées sur l'effet de la présence du NO<sub>2</sub> sur l'oxydation des hydrocarbures dans les moteurs.

Ricklin a montré que la présence de  $\text{NO}_2$  a un effet de diminuer le délai d'auto-inflammation [103] (Figure.III.7).



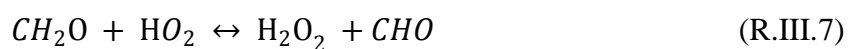
**Figure III.6** : Influence de l'addition de  $\text{NO}_x$  sur la pression cylindre, expériences, gaz naturel [103].

### III.3.5 Impact du formaldéhyde $\text{CH}_2\text{O}$

Des aldéhydes sont présents dans les gaz d'échappement d'un moteur à combustion interne. Ces aldéhydes sont les résultats d'une combustion incomplète dans les moteurs. Le formaldéhyde est l'aldéhyde principalement émis par les moteurs automobiles.

#### III.3.5.1 Mécanisme d'oxydation du $\text{CH}_2\text{O}$

Le formaldéhyde a un effet promoteur, puisqu'il est capable de produire rapidement des radicaux H et  $\text{HO}_2$  via la production des radicaux CHO, selon le mécanisme réactionnel suivant :





La figure III.7 [104] présente les expériences du Konno. Ces expériences montraient que le formaldéhyde entraîne une diminution du dégagement de la chaleur et une augmentation du délai d'auto-inflammation pendant la flamme froide. Par contre, il diminue la durée de combustion et augmente le dégagement de la chaleur lors de la flamme principale (flamme chaude).

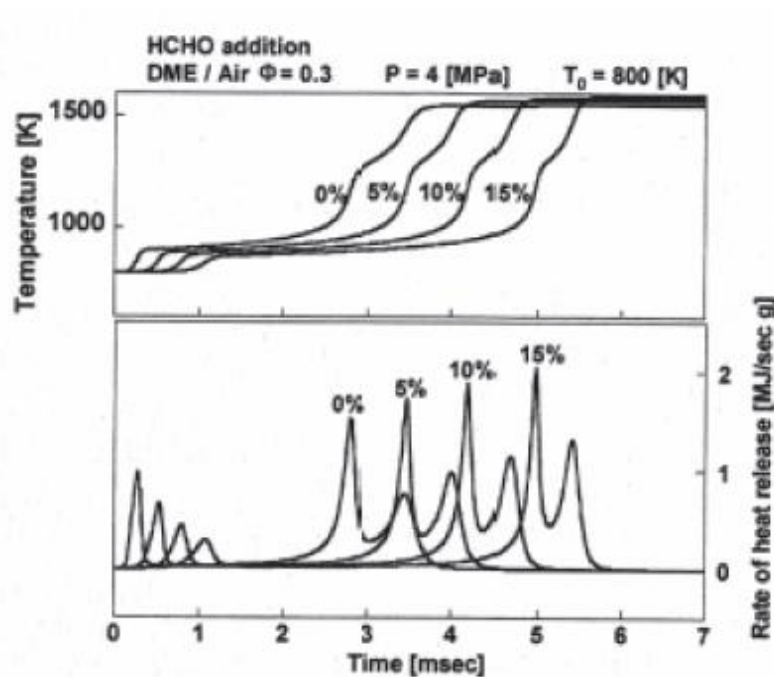
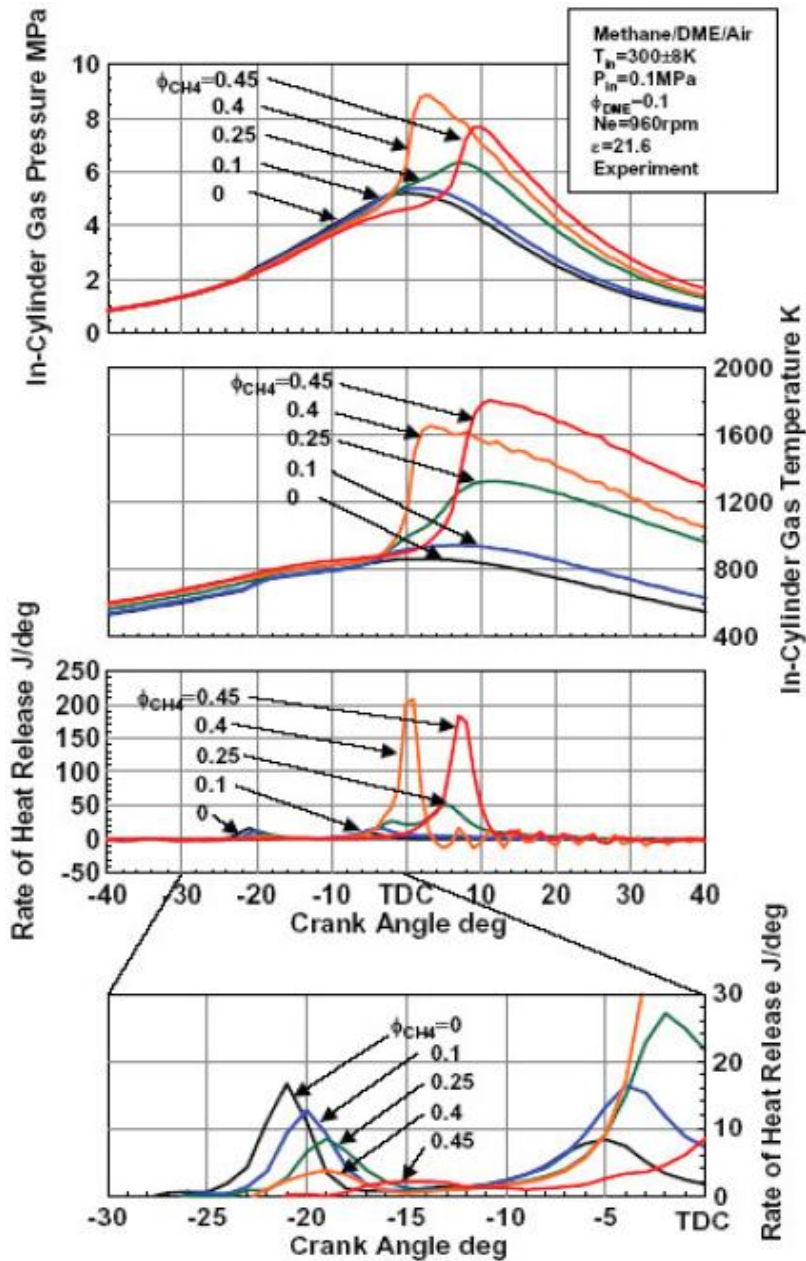


Figure III.7 : Température et dégagement de la chaleur avec différents taux de formaldéhyde, expériences [104].

#### III.4.6 Impact des hydrocarbures imbrûlés

Les études de l'impact des hydrocarbures imbrûlés sur la combustion sont limitées. Ces hydrocarbures imbrûlés, souvent de type paraffines linéaires, peuvent avoir, dans certains cas, une réactivité plus élevée que les hydrocarbures entrant dans la composition des carburants ce qui pourrait permettre une accélération des réactions d'oxydation du mélange. Les constituants des hydrocarbures imbrûlés sont nombreux dans les gaz d'échappement, mais on base seulement sur l'impact du méthane puisqu'il ya beaucoup de recherches bibliographiques étudiant l'effet du  $CH_4$  sur la combustion tels que les travaux du Sato [96] et Dubreuil [99].



**Figure III.8 :** Température et dégagement de la chaleur avec différents taux de formaldéhyde, expériences [96].

Sato [96] a montré que l'ajout du méthane a un effet inhibiteur sur une combustion avec DME. La présence du méthane engendre une augmentation du délai d'auto-inflammation, mais aussi une augmentation du pic de pression et de la température dans le cylindre, ainsi qu'un dégagement de chaleur plus élevée du fait de la diminution de la flamme froide qui devient inexistante à forte injection du méthane (Figure III.8 [96]).

Dubreuil [96] a montré que l'effet de l'ajout du méthane est quasi inexistant sur les différents carburants testés. Ce résultat du fait que la réactivité du méthane est très faible face à la réactivité du n-heptane, de l'isooctane et du toluène.

### **III.5 CONCLUSION**

Les gaz brûlés sont caractérisés par une forte présence d'espèces habituellement considérés comme des diluants, tels que  $N_2$ ,  $H_2O$  et  $CO_2$ . Les recherches bibliographiques montraient que l'impact de ces espèces sur l'oxydation des hydrocarbures ne se limite pas toujours à uniquement un effet de dilution, mais les espèces  $H_2O$  et  $CO_2$  ont un impact cinétique sur la combustion. Peu d'études ont été effectuées sur l'effet de la présence du  $CO$  sur la cinétique d'oxydation des hydrocarbures. Par contre, beaucoup d'études ont été effectuées sur l'impact de la présence du  $NO$  lors de l'oxydation des hydrocarbures même en faibles concentrations.



# CHAPITRE IV :

## Simulation et modélisation

---

## CHAPITRE IV :

### Simulation et modélisation

IV.1 Introduction .....	72
IV.2 Variables de la thermochimie .....	72
IV.3 Les équations de conservation .....	74
IV.3.1 Equation de conservation de masse et d'espèces .....	75
IV.3.2 Equation de la quantité de mouvement .....	75
IV.3.3 Equation de la conservation d'énergie .....	76
IV.4 Cinétique chimique .....	77
IV.5 Facteurs stœchiométriques .....	78
IV.6 Modélisation (simulation) .....	79
IV.6.1 Les outils de calcul .....	80
IV.6.1.1 Le logiciel CHEMKIN .....	80
IV.6.1.2 Le mécanisme réactionnel .....	81
IV.6.1.3 Les données thermodynamiques .....	82
IV.6.1.4 Le réacteur auto-agité PSR .....	84
IV.6.1.5 Le moteur HCCI .....	84
IV.7 Conclusion .....	84

## IV.1 INTRODUCTION

Ces dernières années, la simulation numérique et essentiellement la CFD (Computational Fluid Dynamics) est devenue un outil primordial dans le procédé de conception des applications efficaces économiquement et écologiquement [105,106 et 107]. Les ressources de calcul ont évolué d'une manière exponentielle dans le temps. Actuellement, la simulation numérique de la combustion promet des résultats rapides et peu coûteux pour guider le procédé de la conception. Les applications techniques basées sur la combustion font intervenir la simulation numérique pour prédire les champs dynamiques de l'écoulement, les quantités de chaleur dégagées et les gaz produits. Ces informations sont très intéressantes pour l'optimisation de ces applications. Dans ce chapitre on présente les équations essentielles qui décrivent le phénomène de la combustion et le code de calcul qu'on a utilisé lors de cette étude.

La combustion fait intervenir plusieurs espèces qui réagissent à travers plusieurs réactions élémentaires (mécanismes réactionnels). Ces espèces sont caractérisées par leurs fractions massiques  $Y_k$  pour  $k=1$  à  $N$  où  $N$  est le nombre total d'espèces dans le mélange réactif.

Les fractions massiques  $Y_k$  sont définies par la relation suivante:

$$Y_k = \frac{m_k}{m} \quad (1)$$

Où  $m_k$  est la masse de l'espèce  $k$  présente dans un volume donné  $V$  et  $m$  la masse totale du gaz dans le volume  $V$ .

## IV.2 Variables de la thermochimie

Pour un mélange de  $N$  gaz parfaits, la pression totale est égale à la somme des pressions partielles  $P_k$ .

$$P = \sum_{k=1}^N P_k \quad \text{où} \quad P_k = \rho_k \frac{R}{W_k} T \quad (2)$$

Où  $T$  est la température et  $R$  la constante des gaz parfaits,  $\rho_k = \rho Y_k$  et  $W_k$  sont respectivement la densité et la masse moléculaire de l'espèce  $k$ .

Puisque la densité pour un gaz multi espèces est donnée par :

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k \quad (3)$$

L'équation d'état est écrite sous la forme :

$$P = \rho \frac{R}{W} T \quad (4)$$

Où  $W$  est la masse moléculaire moyenne du mélange donné par:

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (5)$$

L'enthalpie  $h_k$  de l'espèce  $k$  est donnée par :

$$h_k = h_{s,k} + \Delta h_{f,k}^0 = \underbrace{\int_{T_0}^T C_{p,k} dT}_{\text{Sensible}} + \underbrace{\Delta h_{f,k}^0}_{\text{Chimique}} \quad (6)$$

L'enthalpie sensible  $h_{s,k}$  est produite par la réaction chimique, elle est nulle à  $T=T_0$ . L'enthalpie chimique ou de formation  $\Delta h_{f,k}^0$  représente l'enthalpie nécessaire pour former un kilogramme de l'espèce  $k$ .

$C_{p,k}$ , est la chaleur spécifique à pression constante de l'espèce  $k$ , est donnée pour un gaz parfait [108] diatomique par :

$$C_{p,k} = 2.5 \frac{R}{W_k} \quad (7)$$

L'enthalpie du mélange est obtenue en faisant la somme sur toutes les espèces :

$$h = \sum_{k=1}^N h_k Y_k = \int_{T_0}^T C_p dT + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 Y_k \quad (8)$$

Où la chaleur spécifique à pression constante du mélange  $C_p$  est donnée par ;

$$C_p = \sum_{k=1}^N C_{p,k} Y_k \quad (9)$$

L'énergie interne  $e = h - (p/\rho)$  est donnée par :

$$e = \int_{T_0}^T C_p dT - RT_0/W + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 Y_k = \sum_{k=1}^N e_k Y_k \quad (10)$$

Où la chaleur spécifique à volume constant du mélange  $C_v$  est donnée par :

$$C_v = C_p - r \quad (11)$$

Avec  $r$  la constante du gaz

$$r = \frac{R}{W} = R \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (12)$$

La constante universelle des gaz parfaits est désignée  $R=8.3143 \text{ J}/(\text{mol K})$ . La masse moléculaire moyenne du mélange est  $W$ , celle de chaque espèce  $k$  est  $W_k$  et le nombre total des espèces est  $N$ .

### IV.3 Les équations de conservation

On peut trouver le développement des équations de conservation pour les fluides compressibles, multi-espèces et réactifs, dans les livres classiques sur les références suivants [109, 110 et 111].

### IV.3.1 Equations de conservation de masse et d'espèces

L'équation de conservation de la masse totale pour un écoulement réactif est similaire à celle d'un écoulement inerte car la combustion ne génère pas de masse.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (13)$$

L'équation de conservation de masse pour l'espèce  $k$  s'écrit:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_{k,i}) Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (14)$$

Avec  $V_{k,i}$  la composante  $i$  de la vitesse de diffusion  $V_k$  de l'espèce  $k$  et  $\dot{\omega}_k$  est le taux de production de l'espèce  $k$ .

Généralement, la vitesse de diffusion est donnée par la loi de Fick [112] sous la forme suivant:

$$V_{k,i} = -D_k \frac{1}{Y_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \quad \text{pour } k = 1, \dots, N_{k-1} \quad (15)$$

Où  $D_k$  est le coefficient de diffusion de l'espèce  $k$  dans le mélange.

L'équation de conservation de l'espèce  $k$  devient:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad \text{pour } k = 1, \dots, N_k \quad (16)$$

Dans cette équation, la diffusion de masse due aux gradients de température est négligée.

### IV.3.2 Equations de la quantité de mouvement

L'équation de la quantité de mouvement se trouve inchangée par la réaction chimique, elle s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial T} \rho u_j + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i u_j = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j} \quad (17)$$

Où  $f_{k,j}$  est la force de volume agissant sur l'espèce  $k$  dans la direction  $j$  et  $\tau_{ij}$  est le tenseur visqueux, donné par :

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (18)$$

Le tenseur  $\sigma_{ij}$  combine la pression et le tenseur visqueux sous la forme suivante:

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p \delta_{ij} = -p \delta_{ij} - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (19)$$

Où  $\mu$  est la viscosité dynamique et  $\sigma_{ij}$  est le symbole de Kronecker.

### IV.3.3 Equations de la conservation d'énergie

C'est l'équation la plus affectée par la combustion, elle peut être écrite sous plusieurs formes, une des plus utilisées est celle de l'enthalpie sensible [112]:

$$\frac{\partial \rho h_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_s) = \dot{\omega}_T + \dot{Q} + \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k} \right) \quad (20)$$

Le flux d'énergie  $\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}$  est le terme de diffusion de chaleur exprimé par la loi de Fourier.

Un second terme  $\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k}$  associe la diffusion de différentes espèces avec des enthalpies différentes. Le terme  $\dot{Q}$  représente la source de chaleur due par

exemple à un laser où un arc électrique. Le terme  $\dot{\omega}_T$  est le dégagement de chaleur dû à la combustion, il est donné par :

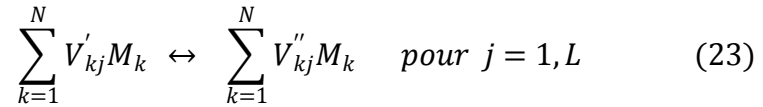
$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^{\dot{N}} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \quad (21)$$

Le système d'équations de Navier-stokes pour un écoulement réactif est fermé par l'équation d'état pour un gaz parfait.

$$P = \rho r T \quad (22)$$

#### IV.4 Cinétique chimique

On considère un système chimique (mécanisme réactionnel) de  $N$  espèces qui réagissent à travers  $L$  réactions [113] :



Où  $M_k$  est le symbole chimique de l'espèce  $k$ ,  $V'_{kj}$  et  $V''_{kj}$  sont les coefficients stœchiométriques molaires de l'espèce  $k$  dans la réaction  $j$ .

Le taux de réaction massique global  $\dot{\omega}_k$  est la somme des taux  $\dot{\omega}_{kj}$  produit par les  $L$  réactions :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^L \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^L V_{kj} Q_j \quad \text{avec } Q_j = \frac{\dot{\omega}_{kj}}{W_k V_{kj}} \quad (24)$$

Où  $V_{kj} = V''_{kj} - V'_{kj}$  et  $Q_j$  est le taux de progression de la réaction  $j$ , il est donné par:

$$Q_j = K_{fj} \prod_{k=1}^{\sim} \left( \frac{\rho Y_k}{M_k} \right)^{v_f^j} - K_{fb} \prod_{k=1}^N \left( \frac{\rho Y_k}{M_k} \right)^{v_b^j} \quad (25)$$

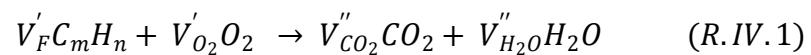
Avec  $K_{fj}$  et  $K_{bj}$  sont les taux direct et inverse de la réaction  $j$ .  $\frac{\rho Y_k}{M_k}$  est la concentration molaire de l'espèce  $k$ . Ces taux constituent un problème central dans la modélisation de la combustion. Ils sont toujours modélisés en utilisant la loi empirique d'Arrhenius:

$$K_{fj} = A_{fj} T^n \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right) = A_{fj} T^{\alpha_j} \exp\left(-\frac{T_{\alpha_j}}{T}\right) \quad (26)$$

La connaissance de taux d'avancement individuel  $Q_j$  de chaque réaction nécessite la connaissance de la constante  $A_{fj}$ , l'exposant de la température  $n$  et la température d'activation  $T_{\alpha_j}$  (ou l'énergie d'activation  $E_j = RT_{\alpha_j}$ ). Avant d'identifier ces constantes, un autre défi est l'identification des espèces et des réactions à inclure dans le mécanisme réactionnel.

#### IV.5 Facteurs stœchiométriques

En combustion, il est pratique de relier les fractions massiques des réactifs à celles des produits par rapport à une condition stœchiométrique. Cette condition est définie comme étant l'état dans lequel tout le combustible et le comburant sont consommés et les produits sont dans leur état le plus stable. Considérons l'équation représentative de la combustion d'un hydrocarbure [113] :



Les coefficients stœchiométriques sont définis par :

$$V'_F = 1, \quad V'_{O_2} = m + \frac{n}{4}, \quad V''_{CO_2} = m, \quad V''_{H_2O} = \frac{n}{2}$$

On définit le rapport stœchiométrique de masse  $s$  qui présente la masse minimale d'oxydant par unité de masse du combustible nécessaire pour une combustion complète :

$$s = \left(\frac{Y_0}{Y_F}\right) \quad (27)$$

On définit aussi le facteur d'excès d'air  $\lambda$  par le rapport suivant :

$$\lambda = \left(\frac{Y_F}{Y_0}\right)_{st} / \left(\frac{Y_F}{Y_0}\right) = \frac{1}{s} \frac{Y_0}{Y_F} \quad (28)$$

Un autre paramètre fréquent correspondant à la réciproque du coefficient d'excès d'air est la richesse  $\varphi$  définie par :

$$\varphi = \frac{1}{\lambda} = \left(\frac{Y_F}{Y_0}\right) / \left(\frac{Y_F}{Y_0}\right)_{st} \quad (29)$$

$\lambda$  et  $\varphi$  sont limités par zéro et l'infini, ils peuvent classer le mélange réactif en trois catégories :

- Mélange pauvre:  $0 < \varphi < 1$  ou  $1 < \lambda < \infty$
- Mélange stœchiométrique:  $\varphi = 1$  ou  $\lambda = 1$
- Mélange riche:  $1 < \varphi < \infty$  ou  $0 < \lambda < 1$

## IV.6 Modélisation (simulation)

Dans cette partie nous présenterons les outils CHEMKIN utilisés pour la simulation.

### IV.6.1 Les outils de calcul

#### IV.6.1.1 Le logiciel CHEMKIN

La modélisation permet d'avoir une meilleure compréhension de la chimie de combustion des carburants, des mécanismes réactionnels mis en jeu et de traiter les émissions polluantes rejetées par la combustion d'un moteur à combustion interne type HCCI. Elle permet aussi la validation des résultats menés expérimentalement

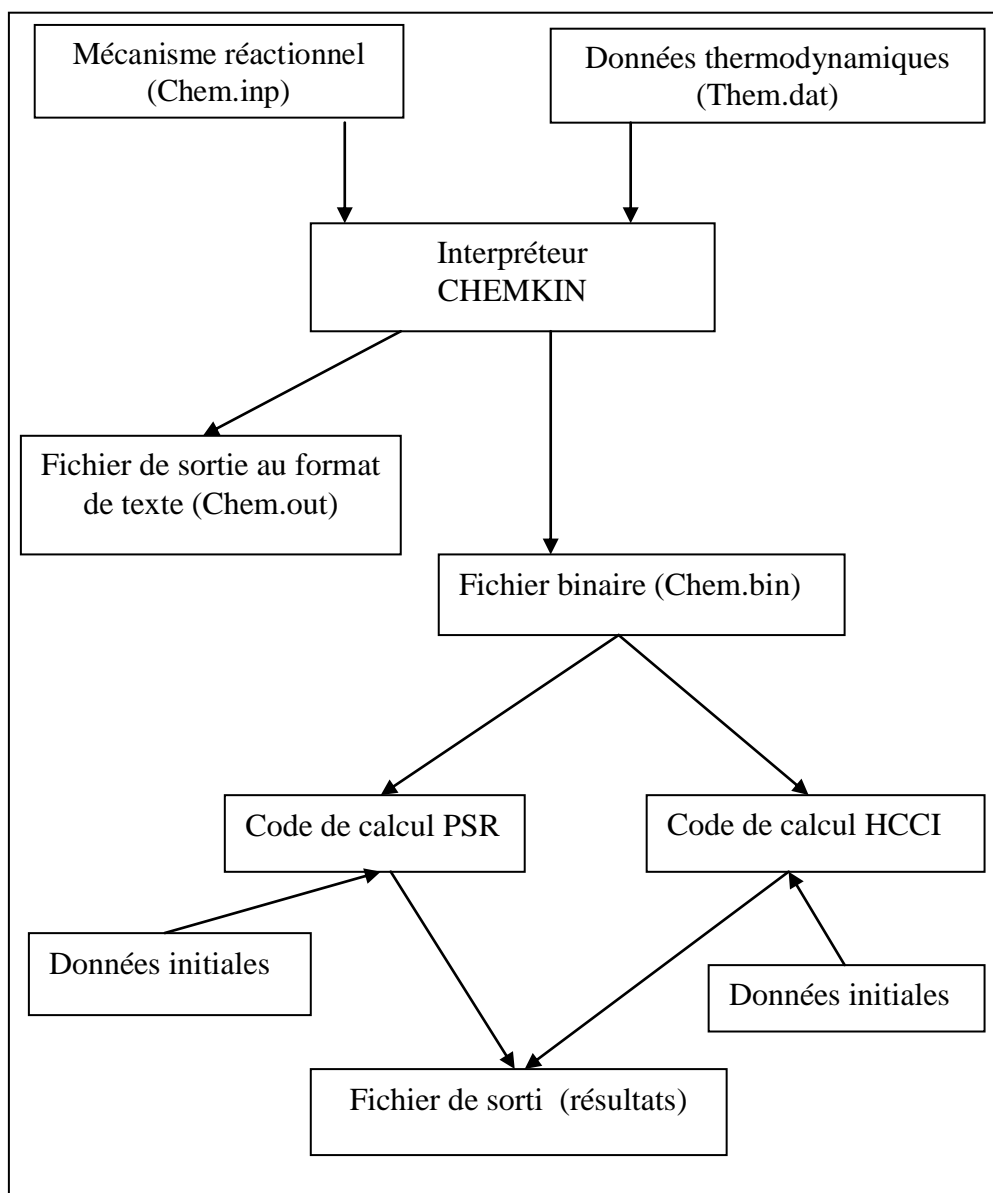
(dans notre cas en réacteur-auto agité et dans un moteur HCCI), et à la limitation des expériences qui sont généralement coûteuses.

Nous avons utilisé le package CHEMKIN pour modéliser la combustion HCCI. De ce fait, la modélisation est faite à l'aide du code de calcul (le réacteur auto-agité) qui a été réalisée au moyen du programme PSR (Perfectly Stirred Reactor) [114] contenu dans la bibliothèque du logiciel CHEMKIN. Ce logiciel permet d'interpréter le mécanisme réactionnel développé à partir des mécanismes réactionnels existants dans les littératures qui se présente sous la forme de deux fichiers. Dans le premier fichier dit (chem.inp), on introduit toutes les réactions chimiques. Le deuxième fichier (therm.dat) contient les données thermodynamiques de toutes les espèces déclarées dans le mécanisme réactionnel (chem.inp).

L'interpréteur CHEMKIN lit ces deux fichiers et vérifie la balance atomique des réactions chimiques. Après un calcul qui se fait par ce logiciel, un fichier de liaison binaire est généré.

Les codes de calcul PSR et HCCI permettent de résoudre les équations de conservation de matière et d'énergie propres. Cette application de CHEMKIN va donc utiliser le fichier binaire généré par l'interpréteur pour créer des fichiers de sortie au format texte contenant les résultats de modélisation demandés par l'utilisateur (fractions molaires, vitesse de consommation et de formation, analyse de sensibilité).

**La figure IV.1** montre les différents liens entre les fichiers du logiciel CHEMKIN pour deux codes de calcul PSR et HCCI [114].



**Figure IV.1:** Structure du mode de fonctionnement du logiciel CHEMKIN pour deux codes de calcul PSR et HCCI [114].

#### IV.6.1.2 Le mécanisme réactionnel

Le mécanisme réactionnel est composé de trois parties essentielles qui contiennent toutes les informations indispensables à l'interprétation du mécanisme par le logiciel CHEMKIN. On trouve dans la première partie les différents éléments chimiques (atomes) intervenant dans le mécanisme. Dans la deuxième partie sont indiquées toutes les espèces mises en jeu dans le mécanisme réactionnel. Finalement,

La dernière partie rassemble l'ensemble des réactions chimiques décrivant les étapes de transformation des réactifs en produits.

De façon générale les réactions présentes dans le mécanisme réactionnel sont réversibles ou irréversibles. Les paramètres cinétiques de chaque réaction sont indiqués toujours après la réaction. La constante de vitesse de chaque réaction est en fonction de l'ordre global de la réaction et elle est écrite sous la forme de trois coefficients : A, n et E. Ces trois coefficients appartiennent à l'équation d'Arrhénius qui écrite sous la forme modifiée suivante [115]:

$$k = A \times T^n \times \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (30)$$

Avec :

- k : la constante de vitesse.
  - \* pour une réaction unimoléculaire: unité de k  $\equiv$  s<sup>-1</sup>.
  - \* pour une réaction bi-moléculaire: unité de k  $\equiv$  cm<sup>3</sup>.mol<sup>-1</sup>.s<sup>-1</sup>).
- A : le facteur pré-exponentiel (en s<sup>-1</sup> pour les réactions unimoléculaires).
- n : le coefficient correctif de variation du facteur pré-exponentiel avec la température.
- R : constante des gaz parfaits [cal.K<sup>-1</sup>.mol<sup>-1</sup>].
- T : température [K].
- E : énergie d'activation (cal.mol<sup>-1</sup>).

#### IV.6.1.3 Les données thermodynamique

Les données thermodynamiques des espèces présentes dans le mécanisme sont fournies sous forme de coefficients de polynômes élaborés par la NASA 'Chemical

Equilibrium Program'' [116]. On a 2 séries de 7 coefficients ( $a_{1,k}, \dots, a_{7,k}$ ) qui permettent de calculer les propriétés thermodynamiques dans deux domaines de températures différentes, entre 1000 et 5000 °K et entre 300 et 1000 °K. Les propriétés thermodynamiques (capacité calorifique, enthalpie et entropie) sont calculées à partir des équations ci-dessous [116]:

$$\frac{C_{p,k}}{R} = a_{1,k} + a_{2,k}T + a_{3,k}T^2 + a_{4,k}T^3 + a_{5,k}T^4 \quad (31)$$

$$\frac{H_k^0}{RT} = a_{1,k} + a_{2,k}\frac{T}{2} + a_{3,k}\frac{T^2}{3} + a_{4,k}\frac{T^3}{4} + a_{5,k}\frac{T^4}{5} + a_{6,k}\frac{1}{T} \quad (32)$$

$$\frac{S_k^0}{R} = a_{1,k} \ln T + a_{2,k}T + a_{3,k}\frac{T^2}{2} + a_{4,k}\frac{T^3}{3} + a_{5,k}\frac{T^4}{4} + a_{7,k} \quad (33)$$

L'équation  $G_0 = H_0 + TS_0$  permet le calcul de l'enthalpie libre  $G_0$ . D'où le calcul des constantes d'équilibre des différentes réactions du mécanisme ainsi que les constantes de vitesse des réactions inverses.

$$\Delta_r G_0 = G_{produits}^0 - G_{réactifs}^0 = -RT \ln(K_p) \quad (34)$$

$$K_c = \frac{K_{dir}}{K_{rev}} = K_p \left( \frac{P}{RT} \right)^{\sum V_{produits} - \sum V_{réactifs}} \quad (35)$$

Avec  $C_p$ : capacité calorifique à pression constante.

$H$ : enthalpie.

$S$ : entropie.

$V$ : coefficients stœchiométriques.

Le programme informatique THERGAS [117] nous a permis de calculer certaines données thermodynamiques des molécules et des radicaux libres présents en

phase gazeuse dans le mécanisme réactionnel. Ces données ont été par la suite rajoutées dans le fichier thermodynamique therm.dat.

#### **IV.6.1.4 Le réacteur auto-agité PSR**

Le réacteur auto-agité permet de travailler dans deux configurations possibles :

- à température constante et temps de passage variable.
- à temps de passage constant et température variable.

Tous nos calculs sont réalisés à temps de passage constant qui était égal à 0.7s et seules les températures du réacteur sont changées.

#### **IV.6.1.5 Le moteur HCCI**

Le code de calcul HCCI permet d'étudier le phénomène de la combustion en moteur HCCI. Premièrement, on a utilisé ce code pour voir l'effet du taux d'EGR sur le mode combustion HCCI. Seconde étape, étude l'effet de certaines espèces de l'EGR sur le déroulement de la combustion homogène, et toujours par l'utilisation du code de calcul HCCI.

### **IV.7 Conclusion**

Dans ce chapitre, on a décrit les différentes variables thermodynamiques qui participent au phénomène de combustion. On a écrit les équations de conservations pour l'écoulement réactif à savoir : l'équation de la continuité, l'équation de la quantité de mouvement, l'équation d'énergie et l'équation de la conservation des espèces.

Dans le chapitre suivant, nous examinerons d'étudier et de discuter les résultats obtenus à partir de la simulation numérique et ainsi que la comparaison avec ce qui est dans la littérature.



## CHAPITRE V : Résultats et discussions ..... 85

V.1	Introduction .....	85
V.2	Influence du taux d'EGR .....	86
V.2.1	Influence du taux d'EGR sur le déroulement du fonctionnement du moteur HCCI .....	87
V.2.1.1	Influence du taux d'EGR sur la pression cylindre .....	87
V.2.1.2	Influence du taux d'EGR sur la température .....	88
V.2.2	Influence du taux d'EGR sur la formation des émissions polluantes du moteur HCCI .....	90
V.2.2.1	Influence du taux d'EGR sur la formation des oxydes d'azote .....	90
V.2.2.1.1	Influence du taux d'EGR sur la formation du NO .....	90
V.2.2.1.2	Influence du taux d'EGR sur la formation du NO <sub>2</sub> .....	92
V.2.2.2	Influence du taux d'EGR sur la formation des hydrocarbures imbrûlés .....	93
V.2.2.3	Influence du taux d'EGR sur la formation du monoxyde de carbone ..	94
V.3	Influence de certaines espèces des EGR .....	96
V.3.1	Réacteur auto-agité .....	96
V.3.1.1	Influence de l'ajout du NO .....	96
V.3.1.2	Influence de l'ajout des hydrocarbures imbrûlés .....	99
V.3.1.2.1	Influence de l'ajout du C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> .....	99
V.3.1.3	Validation des résultats obtenus en PSR .....	101
V.3.1.3.1	Effet de l'ajout du NO sur la formation du CO .....	101
V.3.1.3.2	Effet de l'ajout du NO sur la formation du CO <sub>2</sub> .....	102
V.3.1.3.3	Effet de l'ajout du NO sur la formation du H <sub>2</sub> O .....	103
V.3.1.3.4	Effet de l'ajout du C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> sur la formation du CO .....	104
V.3.1.3.5	Effet de l'ajout du C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> sur la formation du H <sub>2</sub> O .....	105
V.3.2	Moteur HCCI .....	106
V.3.2.1	Influence de l'ajout du NO sur la combustion en mode HCCI. ....	106
V.3.2.2	Influence de l'ajout du NO Influence de l'ajout du NO sur les émissions polluantes.....	109
V.3.2.2.1	Sur les hydrocarbures imbrûlés et le monoxyde de carbone ..	109
V.3.2.3	Influence de l'ajout du C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> sur la combustion en mode HCCI .....	111
V.4	Influences de l'ajout de deux espèces simultanément .....	112
V.4.1	Influence de l'ajout du NO avec l'éthylène. ....	112
V.4.2	Influence de l'ajout du NO avec du méthanol .....	114
V.4.3	Influence de l'ajout d'éthylène avec le méthanol. ....	115
V.4.4	Comparaison des résultats .....	117

## V.1 INTRODUCTION

Dans ce chapitre on présente les résultats qu'on a obtenus à l'aide de la simulation numérique, qui été appliqué à partir de l'utilisation du logiciel CHEMKIN. Premièrement, on a étudié de façon globale l'effet du taux des EGR sur le déroulement de la combustion en mode HCCI et ainsi, leur impact sur les émissions polluantes. Deuxièmement, on a étudié de façon approfondie les effets de certains espèces rejetées par les gaz d'échappement du moteur HCCI sur l'oxydation des hydrocarbures (l'heptane dans notre cas), sur le déroulement de la combustion en moteur type HCCI et ainsi sur les émissions polluantes. Finalement, on essaye d'avoir l'impact de l'ajout de deux espèces simultanées sur les mêmes points notés précédemment.

Les résultats qu'on a obtenus sont classés en trois parties :

- L'influence du taux d'EGR sur le déroulement de la combustion dans un moteur à combustion interne type HCCI (amélioration des technologies des moteurs à combustion interne), sur la réduction de la consommation du combustible utilisé (coté économique) et sur la formation et la réduction des émissions polluantes (coté environnementale).
- L'effet de certaines espèces des gaz d'échappement sur le déroulement de la combustion et sur les émissions polluantes.
- Impacte de l'ajoute de deux espèces des gaz d'échappement simultanément (au même temps) sur le fonctionnement du moteur HCCI et aussi sur la réduction des émissions polluantes.

## V.2 Influence du taux d'EGR

Le taux d'EGR est une quantité des gaz d'échappement injectée à l'admission du moteur pour obtenir certains objectifs tels que l'amélioration de la combustion dans un moteur HCCI, la diminution de la consommation du combustible et la réduction des émissions polluantes.

On a utilisé le logiciel CHEMKIN et le code de calcul HCCI existé à la bibliothèque de ce logiciel. Les conditions initiales sont présentées dans le tableau suivant :

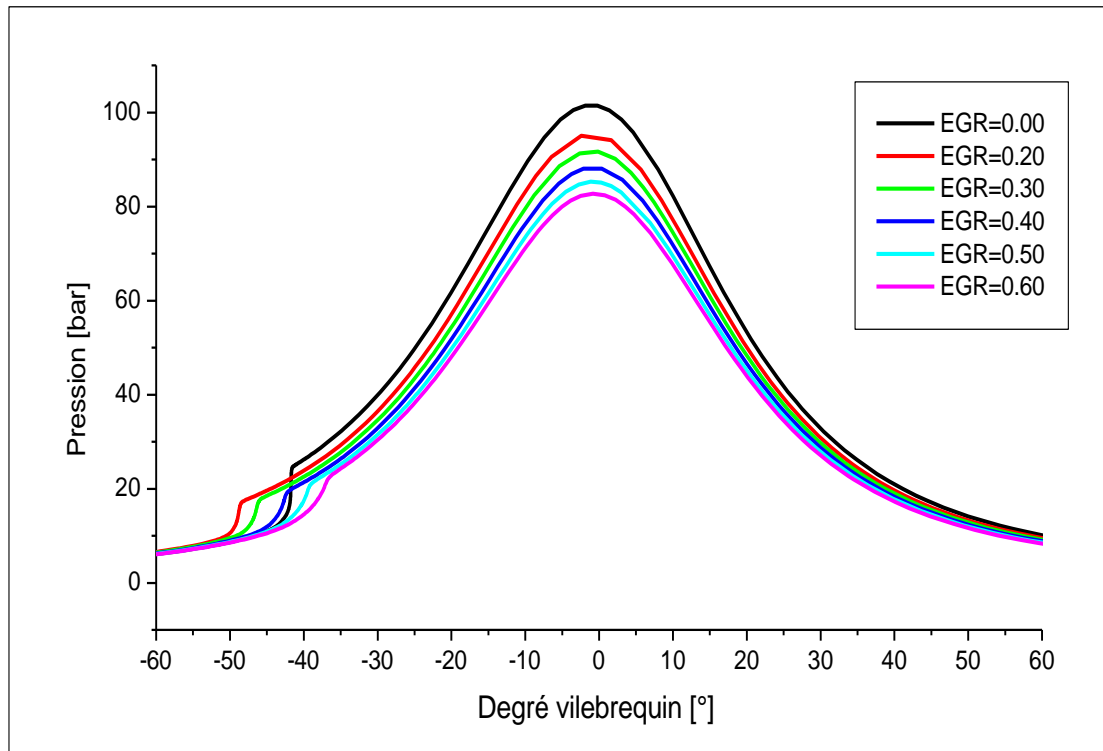
**TAB.V.1** : les paramètres et les conditions initiales utilisées dans notre moteur HCCI.

paramètres	valeurs
Taux de compression	15
Cylindrée (cm <sup>3</sup> )	416
Diamètre du piston (mm)	78,3
Course (mm)	86,4
Longueur de la bielle (mm)	158
Pression initiale (bar)	1.5
Température initiale (k°)	380

Puisque, le moteur HCCI fonctionne en mélange pauvre, on a fixé la richesse à une valeur de 0.4 et on a varié le taux d'EGR (0.00, 0.20, 0.30, 0.40, 0.50, et 0.60) pour étudier l'effet de ce dernier sur le déroulement de la combustion en mode HCCI (moteur HCCI) et ainsi sur la formation et la réduction des émissions polluantes.

## V.2.1 Influence du taux d'EGR sur le déroulement du fonctionnement du moteur HCCI

### V.2.1.1 Influence du taux d'EGR sur la pression cylindre

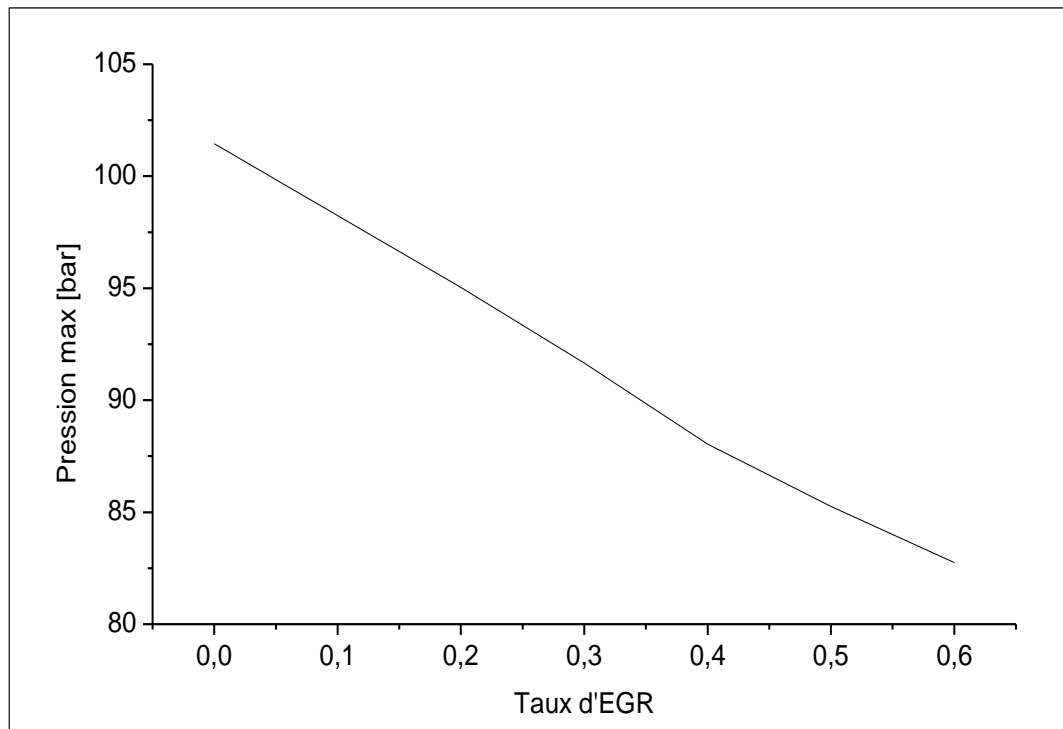


**Figure. IV.1** : Influence des EGR sur la pression cylindre.

Cette figure présente l'évolution de la pression en fonction du D.E.V. pour différents taux d'EGR ; on remarque que la pression est diminuée en fonction de l'augmentation du taux d'EGR et il existe des limites de l'accroissement du taux d'EGR (>50%). Pour des taux (<50%) l'effet des EGR est de retardé l'inflammation à cause de la dilution du mélange par les gaz inertes ( $N_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,...), par contre pour des taux supérieurs l'effet des EGR n'existe pas car la quantité du mélange carburant/comburant est insuffisante.

On remarque aussi que l'augmentation du taux d'EGR engendre un allongement de la durée de la combustion. Cet allongement est dû à la diminution de la vitesse de réaction à cause de faible concentration d'oxygène qui a été remplacé par des gaz inertes. L'augmentation du taux d'EGR engendre une diminution de la pression max (voir **figure**.

**IV.2)** ce qui implique une diminution de la température car ils sont liés par les lois des gaz. Cette diminution a un effet sur le déroulement de la combustion et ainsi sur la formation du NO (voir **figure. V.6**)

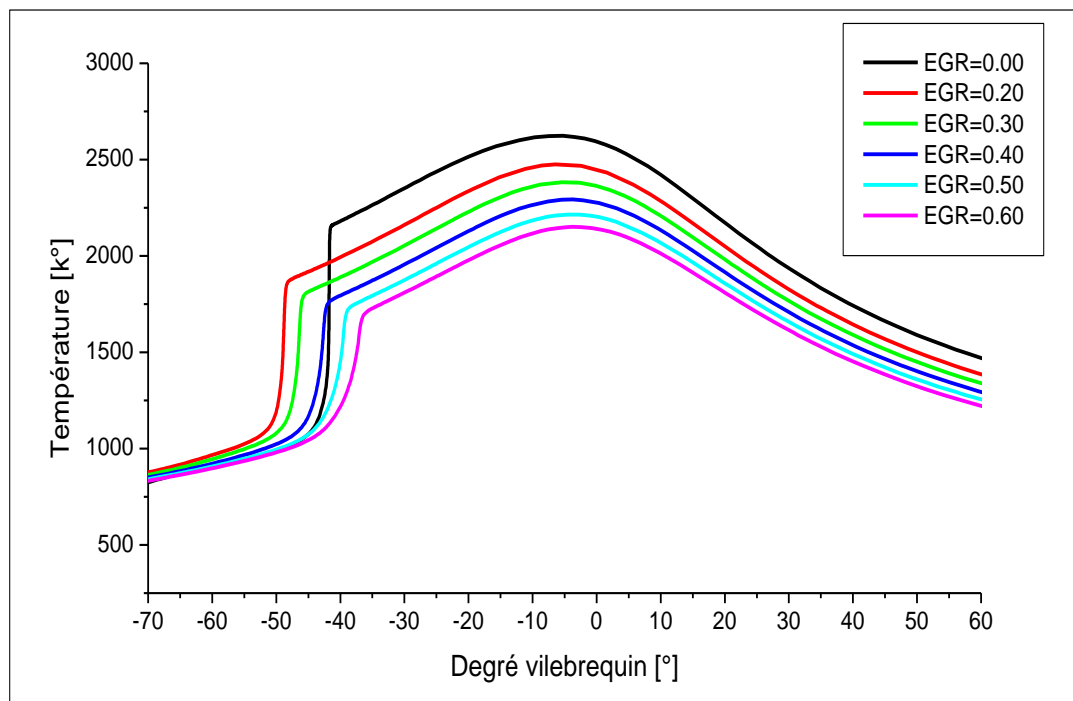


**Figure. IV.2 :** Influence du taux d'EGR sur la pression max.

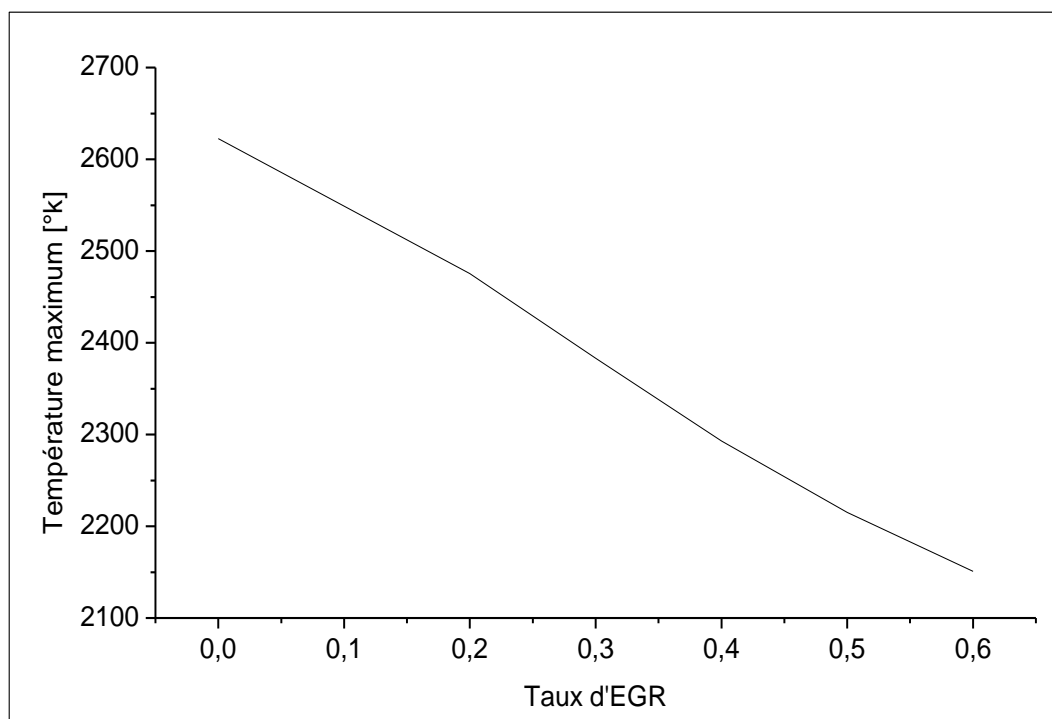
### V.2.1.2 Influence du taux d'EGR sur la température

La **Figure. V.3** présente l'évolution de la température en fonction du D.E.V. pour différents taux d'EGR ; on remarque que la température maximale diminue en fonction de l'augmentation du taux d'EGR. Cette diminution de la température maximale est due à la faible quantité d'oxygène qui a été remplacé par des gaz inertes tels que  $\text{CO}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}$  qui ont une grande quantité de chaleur spécifique ce qui implique une bonne auto-inflammation et une diminution de la formation des  $\text{NO}_x$ .

On remarque aussi qu'il y a une diminution du délai d'inflammation (dû aux vitesses de réaction) et une diminution de la durée de combustion à cause de l'augmentation du taux des EGR.



**Figure. V.3 :** Influence des EGR sur la température.



**Figure. V.4 :** Influence du taux d'EGR sur la température maximum.

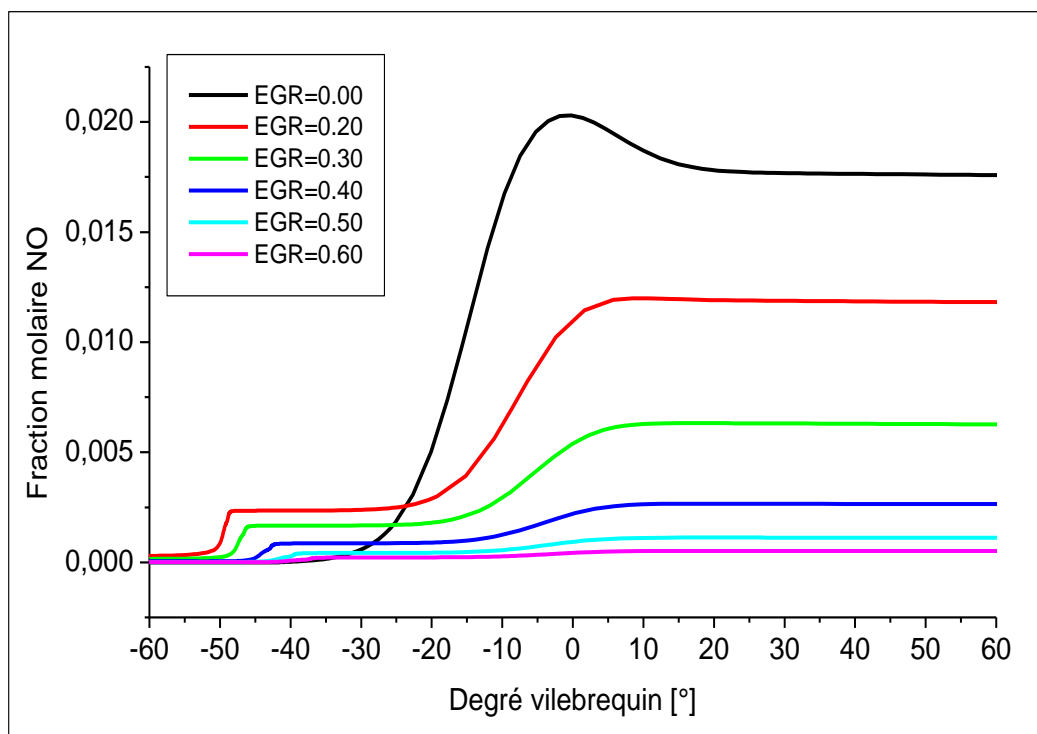
La figure précédente présente l'allure de la température maximale en fonction du taux d'EGR et on remarque que l'augmentation du taux d'EGR engendre une diminution de la température maximale (voir **figure. IV.4**) ce qui implique une diminution de la formation du NO car la formation de ce dernier est liée à la température (voir **figure. V.6**).

## V.2.2 Influence du taux d'EGR sur la formation des émissions polluantes du moteur HCCI

Dans cette partie, on utilise les mêmes conditions appliquées au moteur HCCI qu'on a déjà utilisées dans le paragraphe précédent et on étudie l'influence du taux des EGR sur la formation et la destruction des émissions polluantes.

### V.2.2.1 Influence du taux d'EGR sur la formation des oxydes d'azote

#### V.2.2.1.1 Influence du taux d'EGR sur la formation du NO



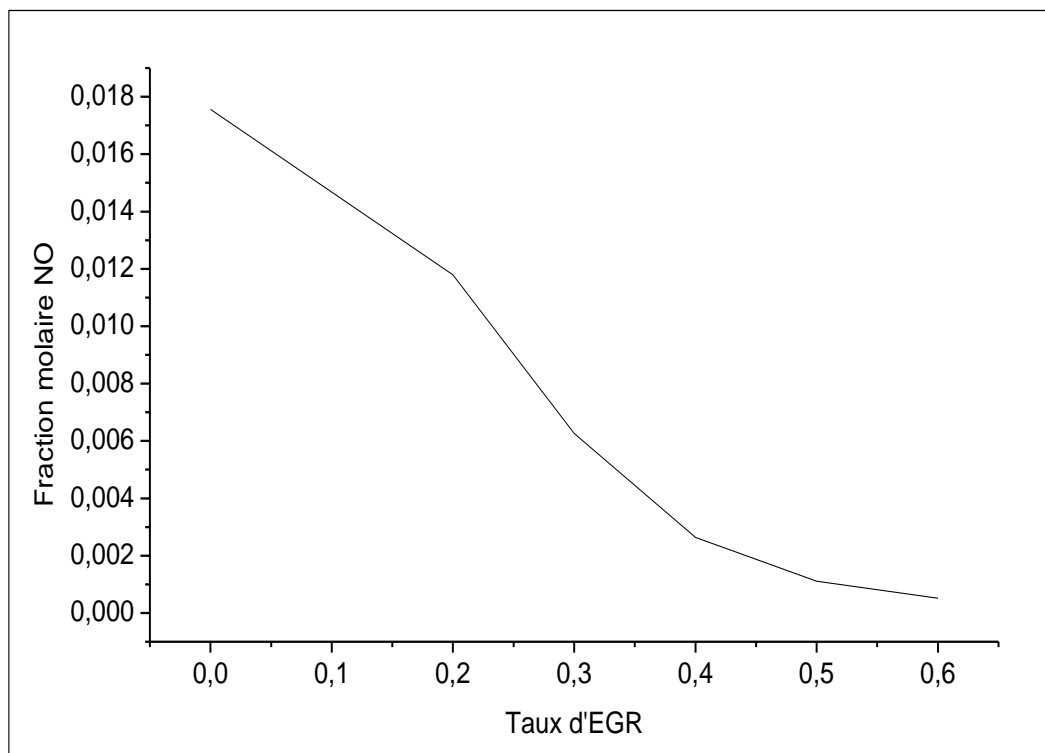
**Figure. V.5** : Influence des EGR sur la formation et la réduction des NO.

Cette figure présente l'évolution du monoxyde d'azote en fonction du D.E.V. pour différents taux d'EGR ; on remarque que l'augmentation du taux des EGR engendre une diminution de la formation du NO à la fin de combustion.

On peut deviser la formation des NO en trois étapes les suivantes :

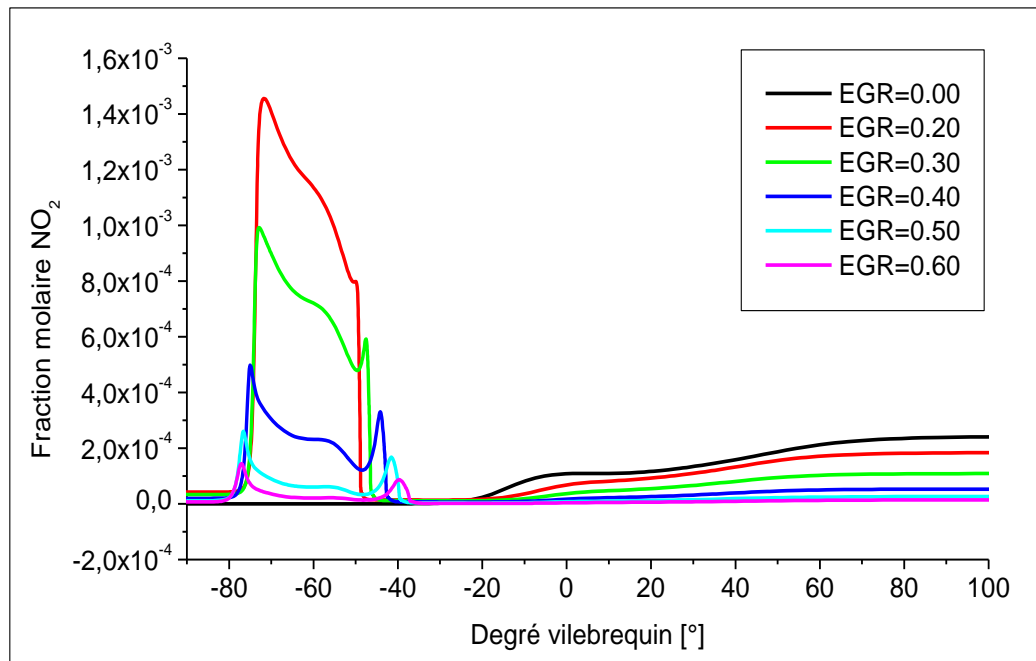
- Formation lente des NO à cause d'une flamme froide (mode HCCI).
- Les NO formés gardent une quantité fixe pendant cette zone intermédiaire, cette stabilisation est due aux effets d'une baisse réactivité dans cette région.
- Formation rapide du monoxyde d'azote à cause des effets d'augmentation de la température.

De ce fait, on déduit que l'utilisation des EGR en mode HCCI a un effet important de réduire les émissions du NO (voir **figure. V.6**). Le choix du taux d'EGR est soumis a des conditions pour réduire les émissions polluants et ainsi qu'un bon déroulement de la combustion HCC.



**Figure. V.6 :** Influence du taux d'EGR sur la formation et la réduction des NO.

### V.2.2.1.2 Influence du taux d'EGR sur la formation du NO<sub>2</sub>



**Figure. V.7 :** Influence des EGR sur la formation et la réduction des NO<sub>2</sub>.

Cette figure présente l'évolution du dioxyde d'azote en fonction du D.E.V. pour différents taux d'EGR ; on remarque que l'augmentation du taux des EGR engendre une diminution de la formation du NO<sub>2</sub> à la fin de combustion. Après (-50 D.V.E), on a une augmentation de la formation du NO<sub>2</sub> en fonction de la température mais cette augmentation sera diminuée rapidement, ces variations de la formation du NO<sub>2</sub> sont dues à la réaction suivante et dans les deux sens.

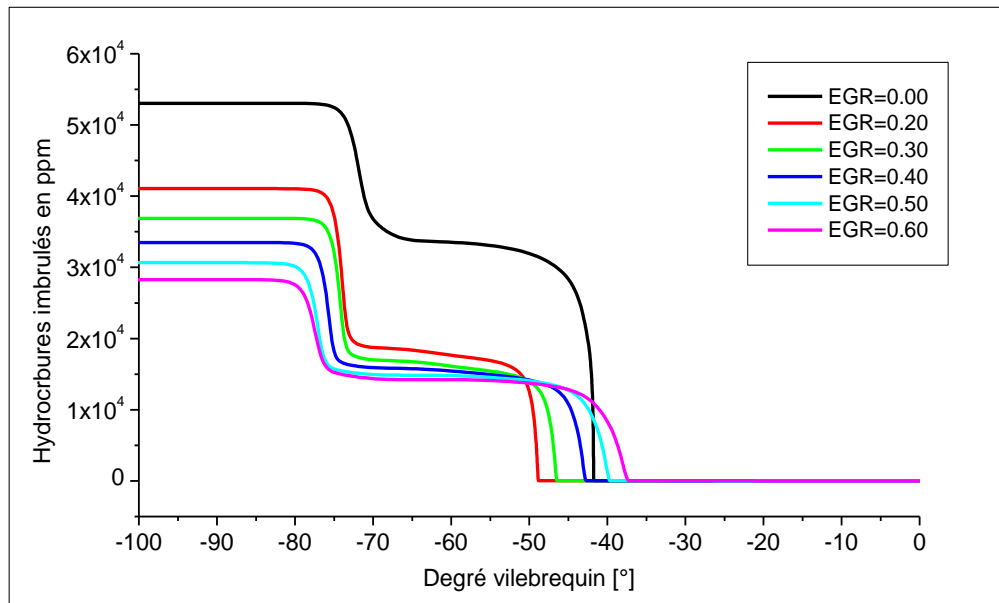


À la fin de la combustion, des valeurs faibles de NO<sub>2</sub> sont formées. Ces résultats sont confirmés par la recherche bibliographique qui indique que la formation de dioxyde d'azote est négligeable à l'échappement du moteur.

Finalement, l'effet d'ajout des EGR à l'admission du moteur sur la formation de NO<sub>2</sub> (un constituant très dangereux pour la santé humaine) est positif puisqu'il réduit ce type d'émission polluante. Le monoxyde d'azote NO devient très dangereux pour la santé

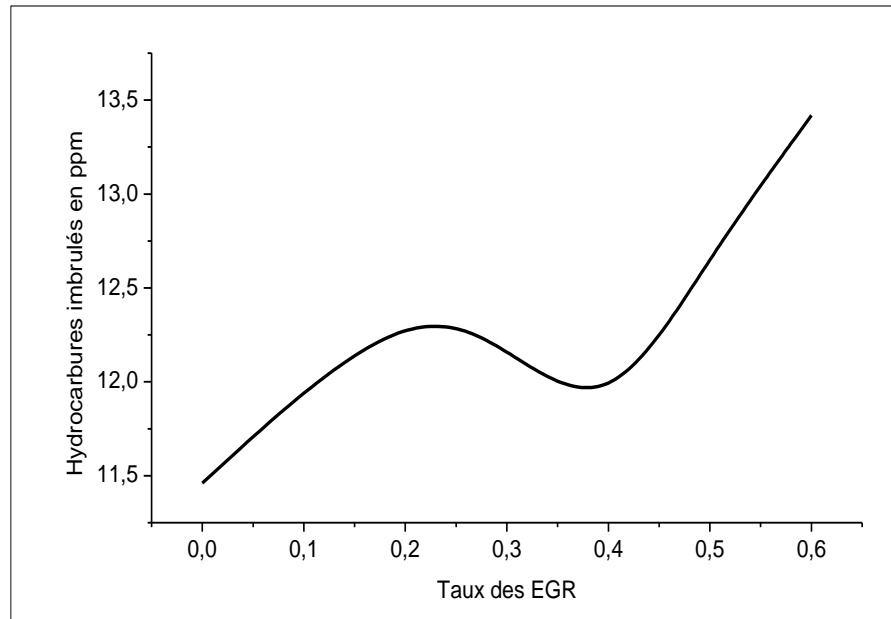
lorsqu'il forme en très fortes doses, donc la diminution de sa formation élimine sa dangerosité sur la santé d'humain (voir la figure. V.5).

### V.2.2.2 Influence du taux d'EGR sur la formation des hydrocarbures imbrulés



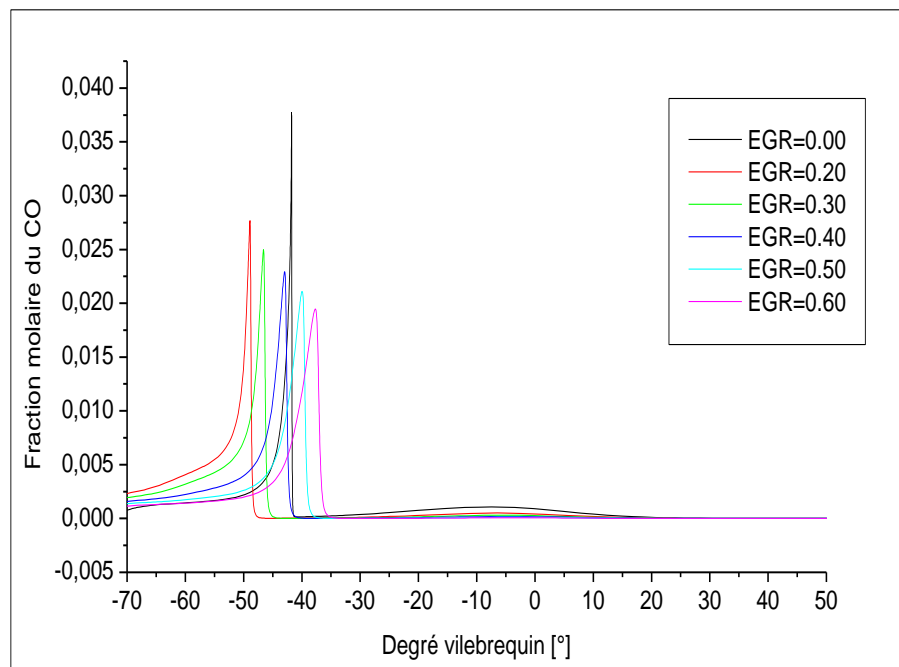
**Figure. V.8** : Influence des EGR sur la formation et la réduction des HC.

Cette figure présente l'évolution des hydrocarbures imbrulés en fonction du D.E.V. pour différents taux d'EGR ; on remarque que l'augmentation du taux des EGR engendre une diminution de la formation des HC. Pour des taux entre 20% et 40%, on remarque la diminution de la durée de combustion ce qui implique une diminution de la formation des hydrocarbures imbrulés. Pour des valeurs supérieures à la valeur 40%, l'effet du taux des EGR n'a aucun effet sur la réduction de la formation des HC car il y a une forte dilution par les gaz inertes ce qui conduit à faible combustion. Les meilleurs taux pour réduire la formation des hydrocarbures imbrulés sont situés entre 20% et 40% (voir la figure. V.9).



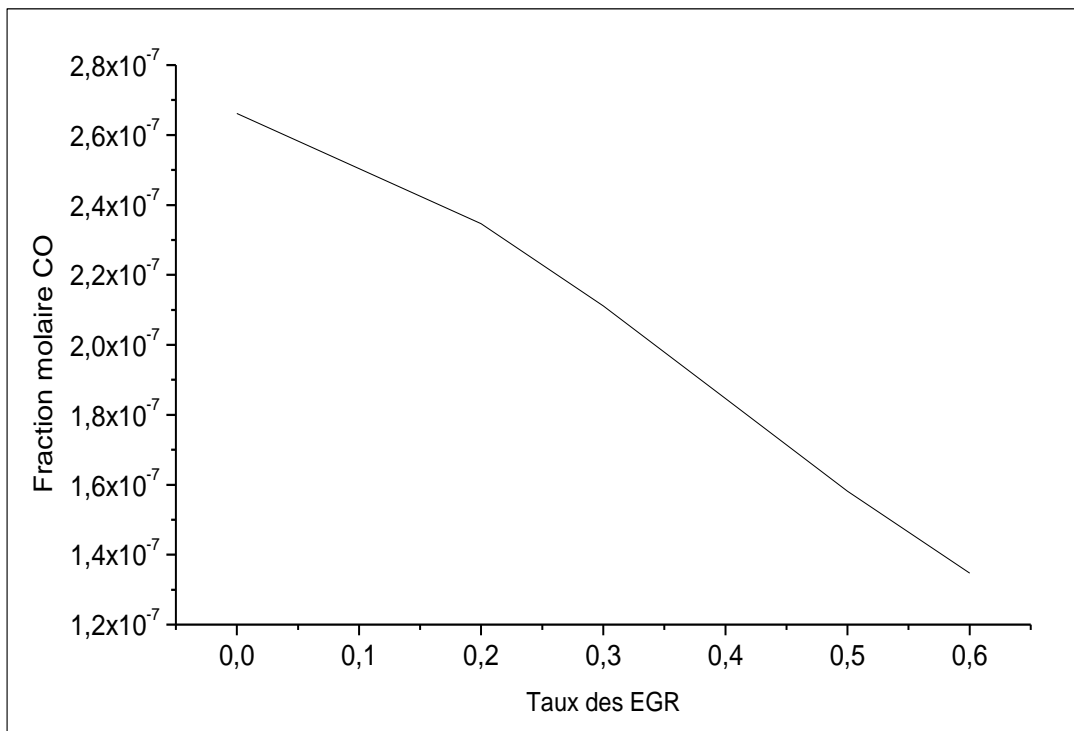
**Figure. V.9 :** Influence du taux de l'EGR sur la formation des HC à la fin de la combustion.

### V.2.2.3 Influence du taux d'EGR sur la formation du monoxyde de carbone



**Figure. V.10 :** Influence des EGR sur la formation et la réduction du CO.

La **figure. V.10** présente l'évolution du monoxyde de carbone en fonction du D.E.V. pour différents taux d'EGR ; on remarque que l'augmentation du taux des EGR engendre une diminution de la formation maximum du CO. Pour des taux entre 20% et 40%, on remarque qu'il y a une diminution de la durée de combustion. Par contre, pour des valeurs supérieures à la valeur 40%, l'effet du taux des EGR n'a aucun effet sur la durée de la combustion. Ces résultats nous aident à déterminer le taux d'EGR applicable pour réduire les émissions du monoxyde de carbone et ainsi les hydrocarbures imbrulés. L'utilisation du taux des EGR a un effet significatif pour réduire la formation du CO et des HC (voir **Figure. V.11**).



**Figure. V.11** : Influence du taux d'EGR sur la formation du CO à la fin de combustion.

### V.3 Influence de certaines espèces des EGR

Dans cette partie, on étudie de façon approfondie l'influence de l'ajout des EGR sur le déroulement de la combustion HCCI, c'est-à-dire, l'étude des effets de certaines espèces des EGR sur le fonctionnement du moteur HCCI.

Pour cela on a divisé notre travail en deux parties :

- L'utilisation du code de calcul PSR (Réacteur auto-agité) qui existe dans la bibliothèque du logiciel CHEMKIN.

- L'utilisation du code de calcul HCCI qui est trouvé à la bibliothèque du logiciel CHEMKIN.

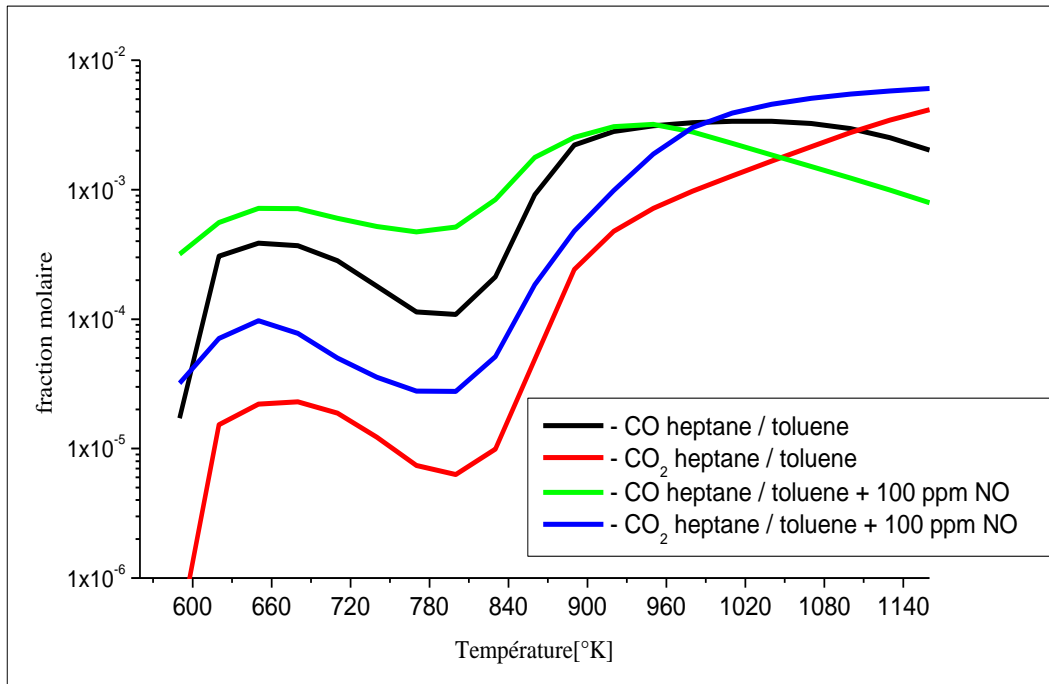
#### V.3.1 Réacteur auto-agité

On utilise le code de calcul PSR pour voir l'impact de certaines espèces des gaz d'échappements sur l'oxydation du carburant.

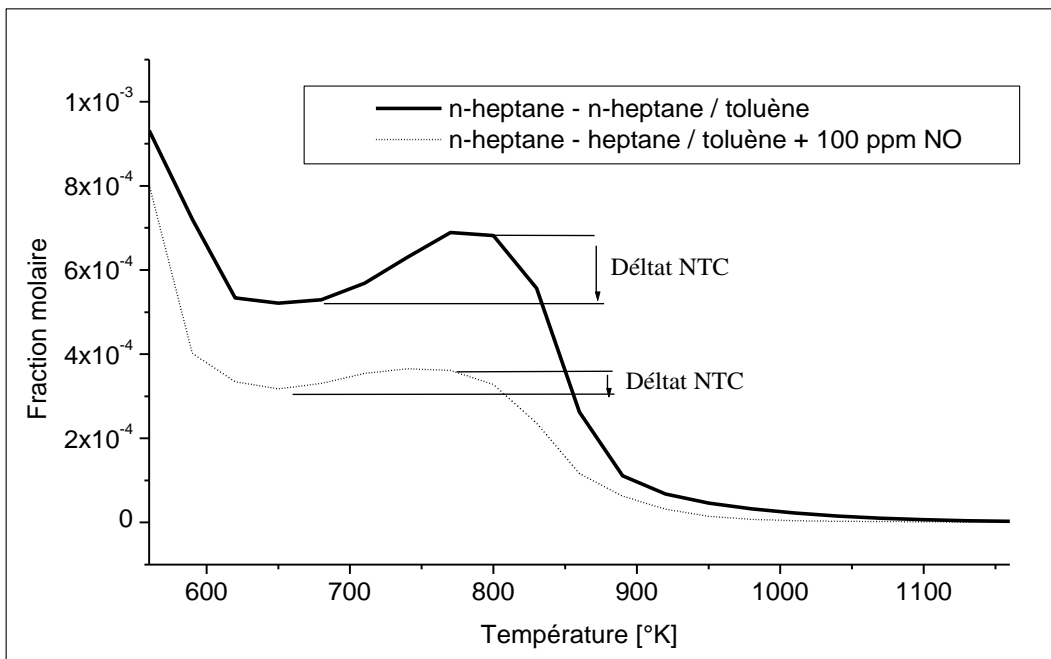
Pour obtenir des résultats on choisit une richesse de 0.75, une pression de 10 bars, un temps de passage 0.7s et on varie la température de 560 °K à 1160°K, par pas de 30°K.

##### V.3.1.1 Influence de l'ajout du NO.

La figure. V.12 présente l'allure de la formation du monoxyde de carbone et du dioxyde de carbone en fonction de la température pour un ajout de 100 ppm du NO. Premièrement, la courbe montre clairement les trois régimes de température de l'oxydation d'un hydrocarbure en mode HCCI. La formation du monoxyde de carbone ou dioxyde de carbone donne une idée sur la variation de la réactivité pendant l'oxydation du combustible (l'heptane), c'est-à-dire l'augmentation de la formation du CO ou du CO<sub>2</sub> implique qu'il y a une augmentation de la réactivité et vice-versa. En général la présence des ajouts du NO engendre un arrêt de l'oxydation des hydrocarbures avant la température 600 °K car il n'y a pas d'oxydation réelle avant cette température (Figure. V.12) qui résulte un retard de l'oxydation des hydrocarbures en basse température. L'addition du NO diminue la zone du gradient négatif de la température car la décroissance de la réactivité est très importante pour des cas sans ajout des NO (Figure. V.13).



**Figure. V.12:** Influence de l'ajout de 100ppm de NO sur la formation du CO et CO<sub>2</sub> (P=10 bars et  $\varphi = 0.75$ ).

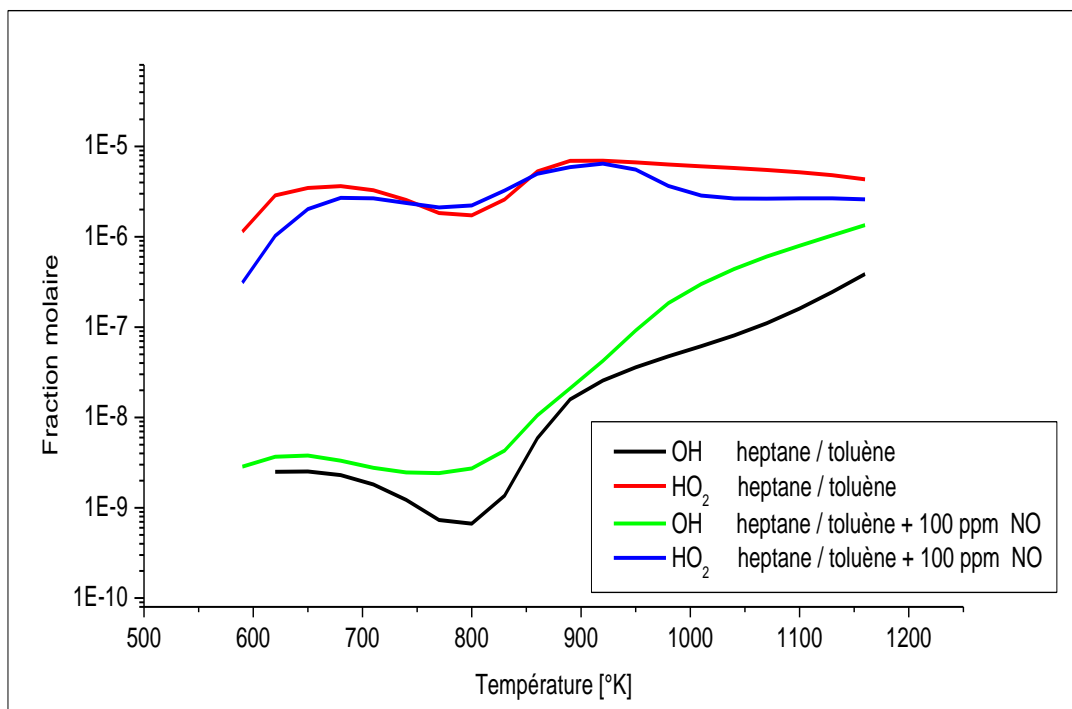


**Figure. V.13:** Influence de l'ajout de 100ppm de NO sur l'oxydation du n-heptane (mélange n-heptane/toluène P=10 bars et  $\varphi = 0.75$ ).

La diminution de la réactivité est due à la production des radicaux moins réactifs  $HO_2$  à partir de la consommation des radicaux plus réactifs  $OH$  selon la réaction suivante (dans ce cas là, la réaction prend le sens vers la gauche).



La figure ci-dessous montre bien les zones où il y a une formation ou une consommation des radicaux  $OH$  (radical très réactif) et des radicaux  $HO_2$  (radical moins réactif). Les transformations de ces radicaux sont responsables de la formation des trois régimes d'oxydation d'un hydrocarbure.



**Figure. V.14** : Formation des radicaux plus réactifs  $OH$  et des radicaux moins réactifs  $HO_2$  (mélange n-heptane/toluène  $P=10$  bars et  $\varphi = 0.75$ ).

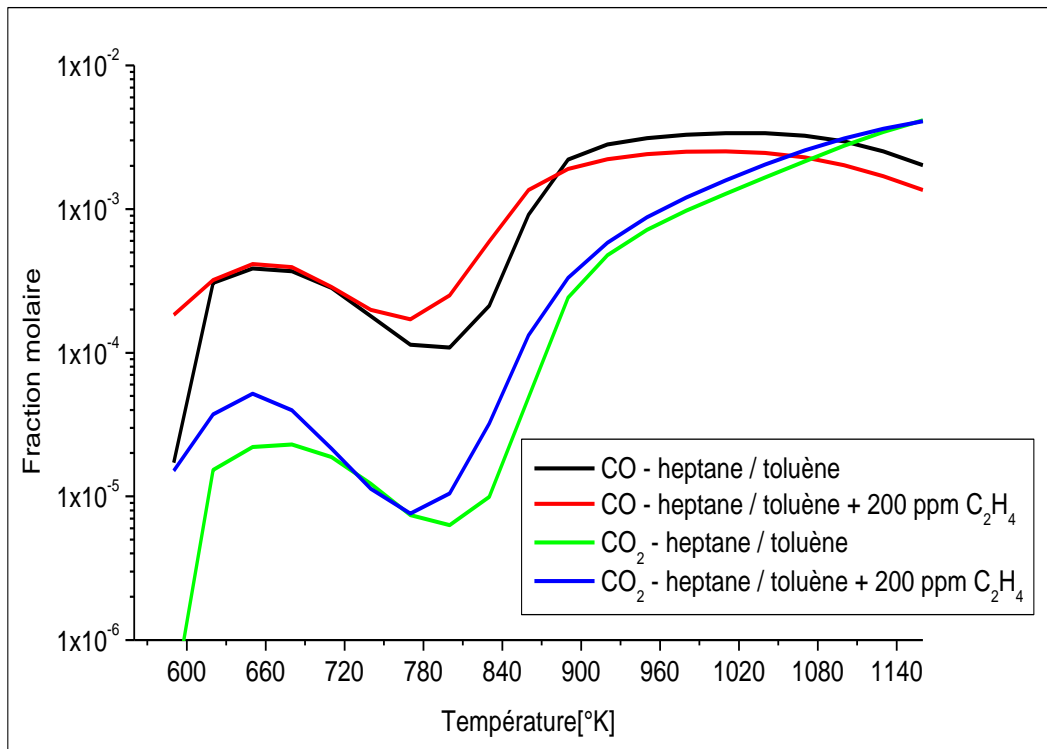
La diminution de la zone NTC engendre une augmentation de la région principale ce qui implique une bonne oxydation du combustible. Cet effet réduit la formation des émissions polluantes.

### V.3.1.2 Influence de l'ajout des hydrocarbures imbrûlés

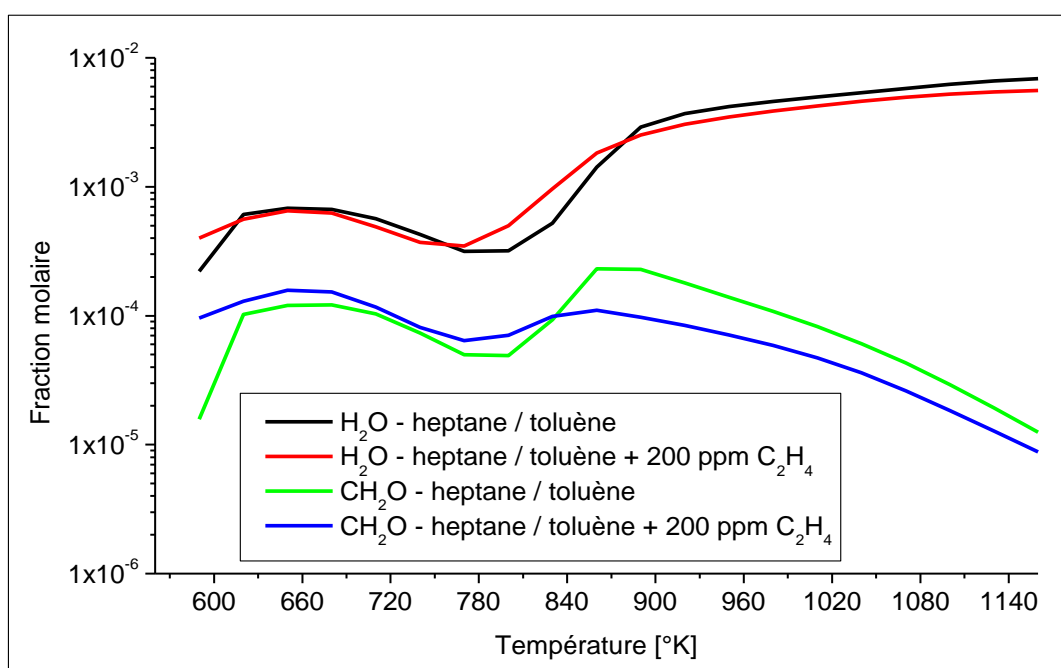
Les hydrocarbures imbrûlés HC sont nombreuses dans les gaz EGR, c'est pour cela l'étude de l'impact de ces espèces sur la combustion est très important.

#### V.3.1.2.1 Influence de l'ajout du $C_2H_4$ .

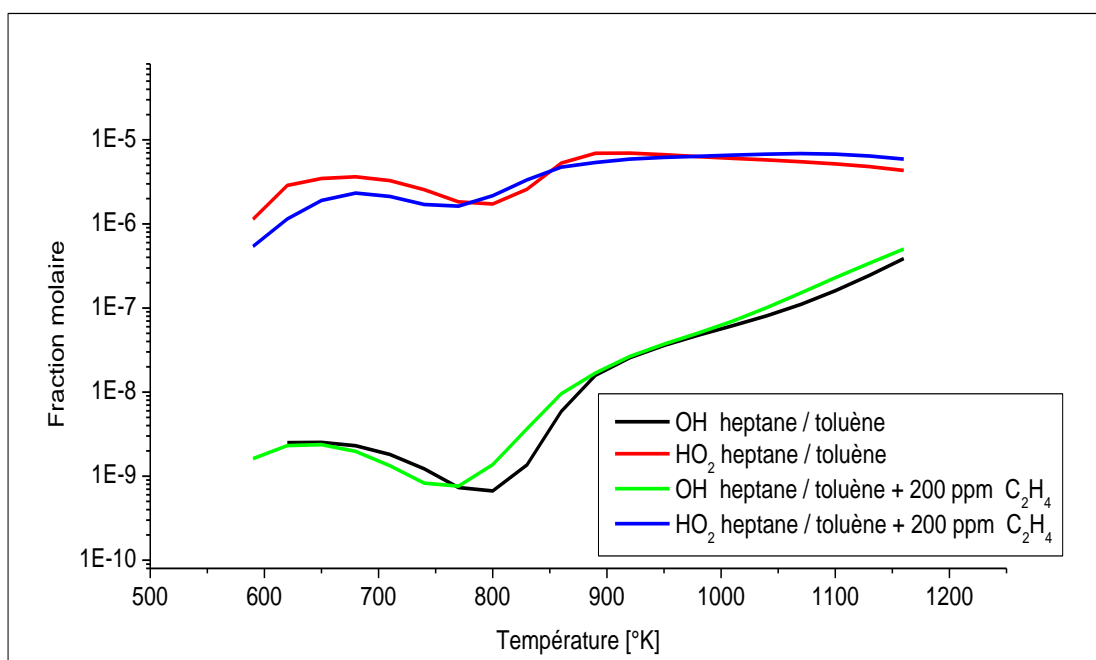
Les figures ci-dessous illustrent l'allure des deux produits de la combustion  $CO_2$  et  $H_2O$  et ainsi des deux espèces intermédiaires  $CO$  et  $CH_2O$  en fonction de la température pour un ajout de 200 ppm du  $C_2H_4$ . On remarque que la présence du  $C_2H_4$  joue un rôle de ralentissement de la production de  $CO$ ,  $CO_2$  et  $H_2O$  dans le domaine du NTC de température ce qui engendre une baisse de réactivité. Cette baisse de réactivité est due à la formation des radicaux moins réactifs à la place des radicaux plus réactifs (**Figure. V.15**).



**Figure. V.15:** Influence de l'ajout de 200ppm de  $C_2H_4$  sur la formation du  $CO$  et  $CO_2$  ( $P=10$  bars et  $\varphi = 0.75$ ).



**Figure. V.16:** Influence de l'ajout de 200ppm de C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> sur la formation du H<sub>2</sub>O et CH<sub>2</sub>O (P=10 bars et  $\varphi = 0.75$ ).



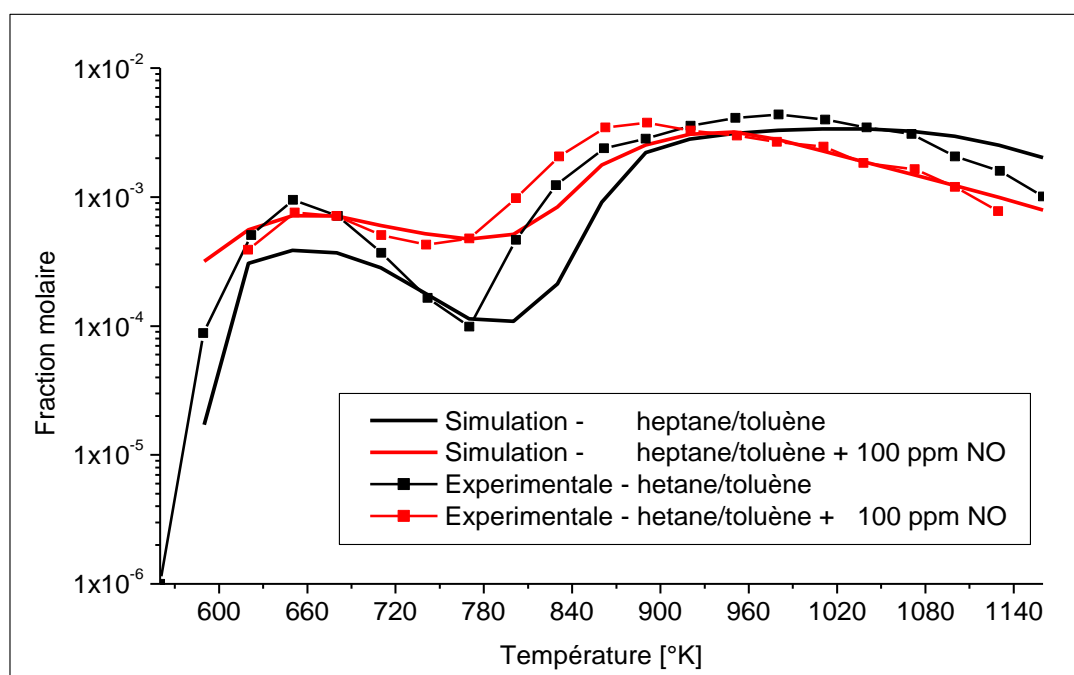
**Figure. V.17 :** Formation des radicaux plus réactifs OH et des radicaux moins réactifs HO<sub>2</sub> (mélange n-heptane/toluène P=10 bars,  $\varphi = 0.75$  et 200 ppm C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>).

La présence du  $C_2H_4$  entraîne une diminution de la zone NTC, mais cet effet est négligeable devant l'effet de l'ajout du NO malgré la grande quantité ajoutée de l'éthylène (200 ppm).

### V.3.1.3 Validation des résultats obtenus en PSR

On a choisis des résultats qu'on a obtenus par la simulation et les comparé avec des résultats expérimentaux [118] réalisés dans les mêmes conditions.

#### V.3.1.3.1 Effet de l'ajout du NO sur la formation du CO

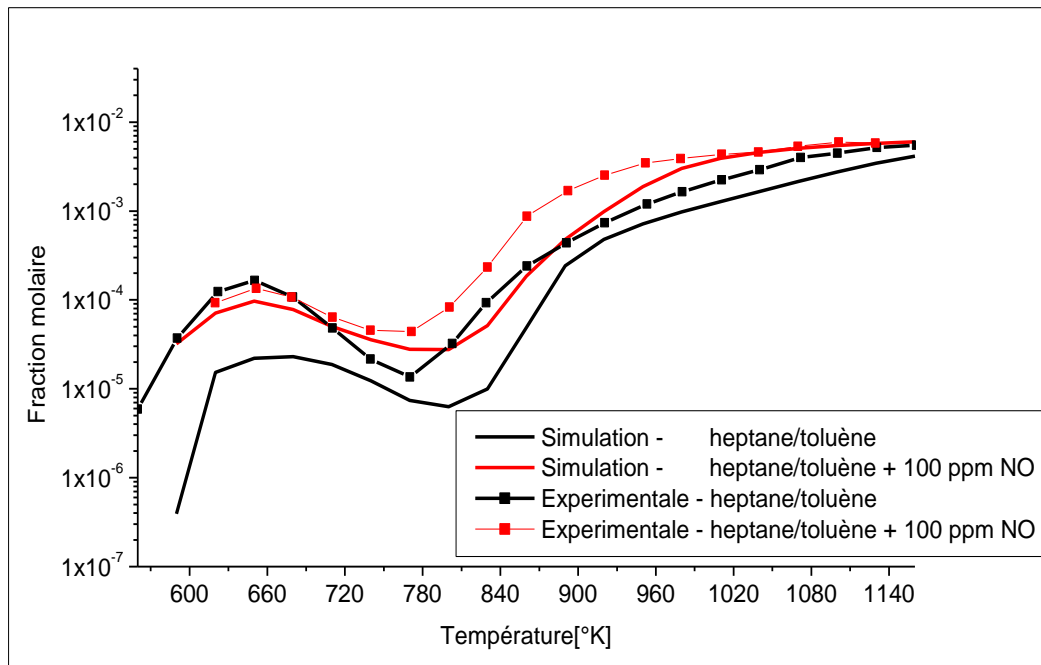


**Figure. V.18:** Impact de l'ajout du NO sur la formation du CO (résultat expérimental [118]).

On a comparé l'influence de l'ajout du NO sur la formation du CO obtenu par la simulation numérique (notre travail) avec les résultats expérimentaux du Aurélie PIPEREL [118]. Les courbes avec symboles montrent les résultats expérimentaux. Les autres courbes sont obtenues à partir des résultats obtenus par la simulation. On distingue deux types des courbes : les courbes en noir présentent les essais sans ajout du monoxyde d'azote et les courbes en rouge montrent les allures avec un ajout de 100 ppm du NO. Après la comparaison on a trouvé qu'il y a une correspondance entre ces résultats. La forme des courbes de la simulation numérique montre les trois régimes de l'oxydation

d'un hydrocarbure en mode HCCI. Elle est très convenable avec les résultats expérimentaux.

### V.3.1.3.2 Effet de l'ajout du NO sur la formation du CO<sub>2</sub>

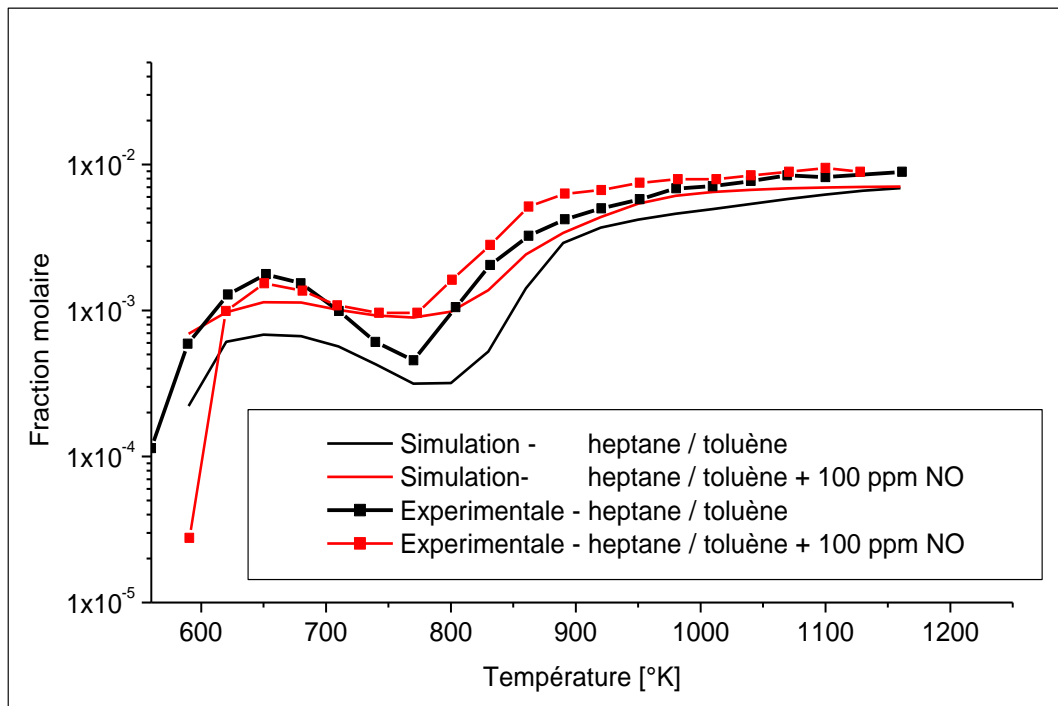


**Figure. V.19:** Impact de l'ajout du NO sur la formation du CO<sub>2</sub> (résultat expérimental [118]).

Nous avons comparé les résultats obtenus numériquement avec des résultats expérimentaux. Les différentes courbes sont définies sur la figure ci-dessus. On remarque que:

L'allure de l'impact de l'ajout de NO sur la formation de CO<sub>2</sub> obtenu par la simulation numérique (nos résultats) et par les résultats expérimentaux du Aurélie PIPEREL [118] montre une correspondance entre ces résultats. Chaque courbe de La figure montre clairement les trois régimes de l'oxydation d'un hydrocarbure en mode HCCI et on remarque que les courbes de la simulation sont très convenable avec les courbes de l'expérimentale.

### V.3.1.3.3 Effet de l'ajout du NO sur la formation du H<sub>2</sub>O

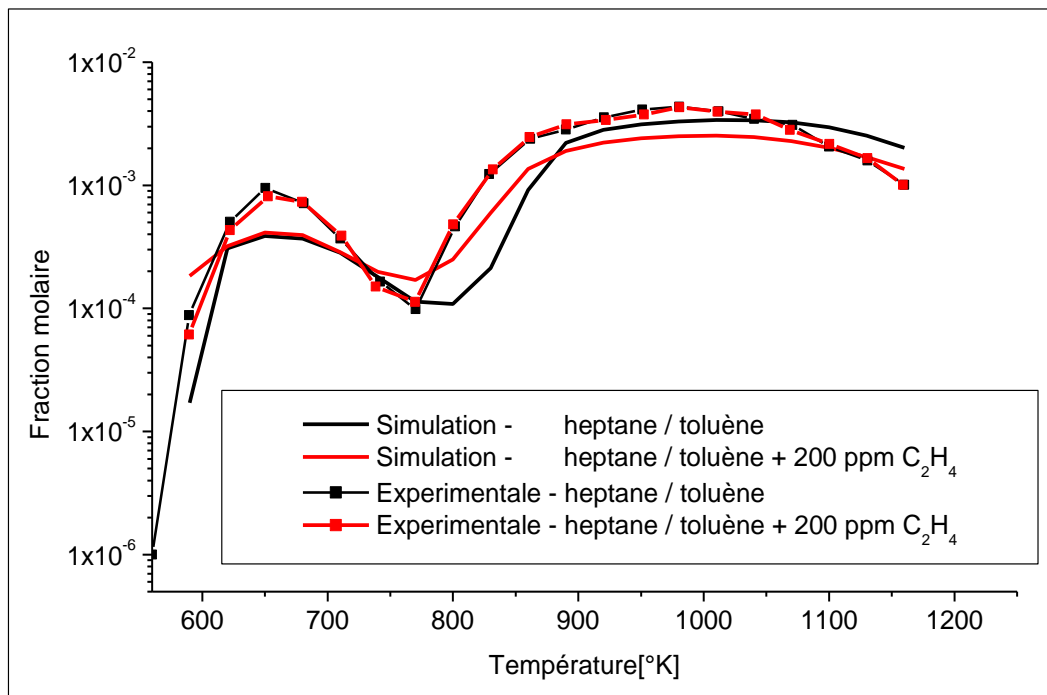


**Figure. V.20:** Impact de l'addition du NO sur la formation de H<sub>2</sub>O:

(résultat expérimental [118]).

La figure ci-dessus illustre la fraction molaire de l'eau en fonction de la température pour différents cas de l'addition du NO. Les courbes avec symboles montrent les résultats expérimentaux du Aurélie PIPEREL [118]. Les autres courbes sont obtenues à partir des résultats obtenus par la simulation. On distingue deux types de courbes : les courbes en noir présentent les essais sans ajout du monoxyde d'azote et les courbes en rouge montrent les essais avec un ajout de 100 ppm du NO. La comparaison entre les résultats expérimentaux et les résultats de la simulation montre bien qu'il y a une correspondance entre ces résultats. La forme de l'allure de la simulation montre clairement, les trois régimes de l'oxydation d'un hydrocarbure en mode HCCI ce qui nous donne un résultat très adéquat à titre de comparaison avec les résultats expérimentaux.

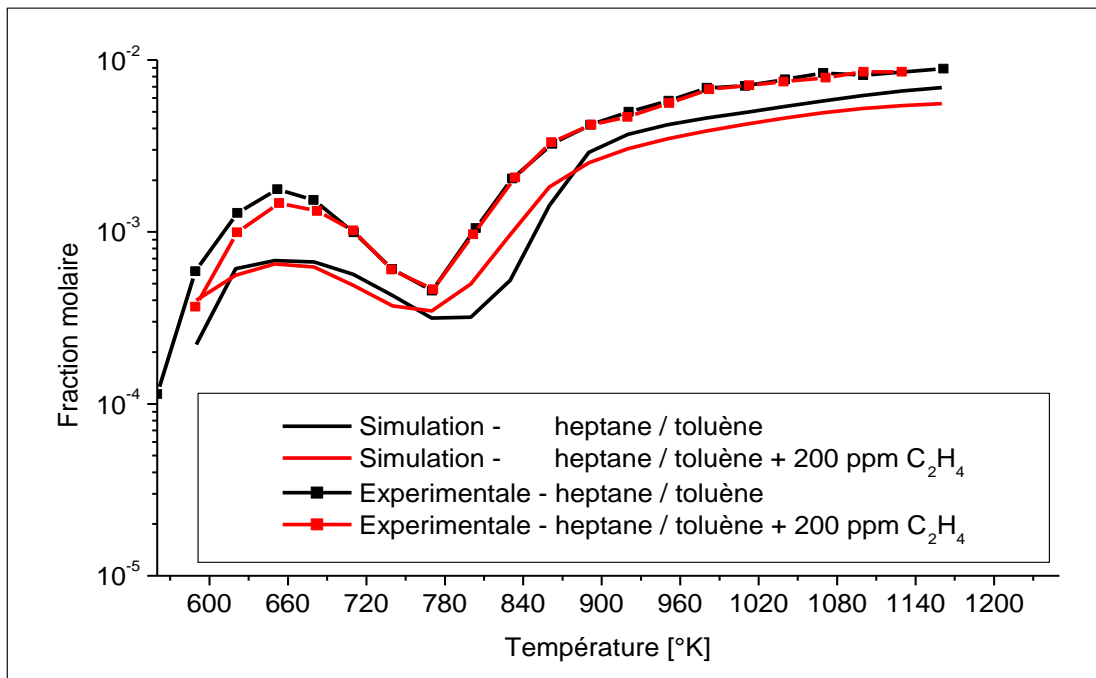
### V.3.1.3.4 Effet de l'ajout du $C_2H_4$ sur la formation du CO



**Figure. V.21:** Impact de l'ajout du  $C_2H_4$  sur la formation du monoxyde de carbone CO: (résultat expérimental [118]).

On a comparé l'influence de l'ajout de l'éthylène sur la formation du monoxyde de carbone obtenu par la simulation numérique (nos résultats) avec des résultats expérimentaux du Aurélie PIPEREL [118] et on a trouvé qu'il y a une correspondance entre ces résultats. La forme de l'allure de la simulation montre clairement les trois régimes de l'oxydation d'un hydrocarbure en mode HCCI. Cette forme est très ajusté avec les allures de l'expérimentale.

### V.3.1.3.5 Effet de l'ajout du $C_2H_4$ sur la formation du $H_2O$



**Figure. V.22:** Impact de l'ajout du  $C_2H_4$  sur la formation de  $H_2O$ : (résultat expérimental [118]).

La figure ci-dessus illustre la fraction molaire de l'eau en fonction de la température pour différents cas d'ajout d'éthylène. Les courbes avec symboles montrent les résultats expérimentaux du Aurélie PIPEREL [118] et les autres courbes sont les résultats de la simulation. On distingue deux types de courbes : les courbes en noir présente les essais sans ajout de l'éthylène et les courbes en rouge montrent les essais avec un ajout de 200 ppm de  $C_2H_4$ . La comparaison entre les résultats expérimentaux et les résultats de la simulation montre qu'il y a une équivalence entre les deux résultats, si on prend en considération, la forme de l'oxydation d'un hydrocarbure en mode HCCI (flamme froide, zone NTC et flamme chaude). En général, la comparaison est acceptable malgré quelques différences qui sont liées aux conditions des essais expérimentales et les hypothèses utilisées.

### V.3.2 Moteur HCCI

Dans cette partie on étudiera l'effet de quelques espèces des gaz d'échappements sur le déroulement de la combustion dans un moteur HCCI.

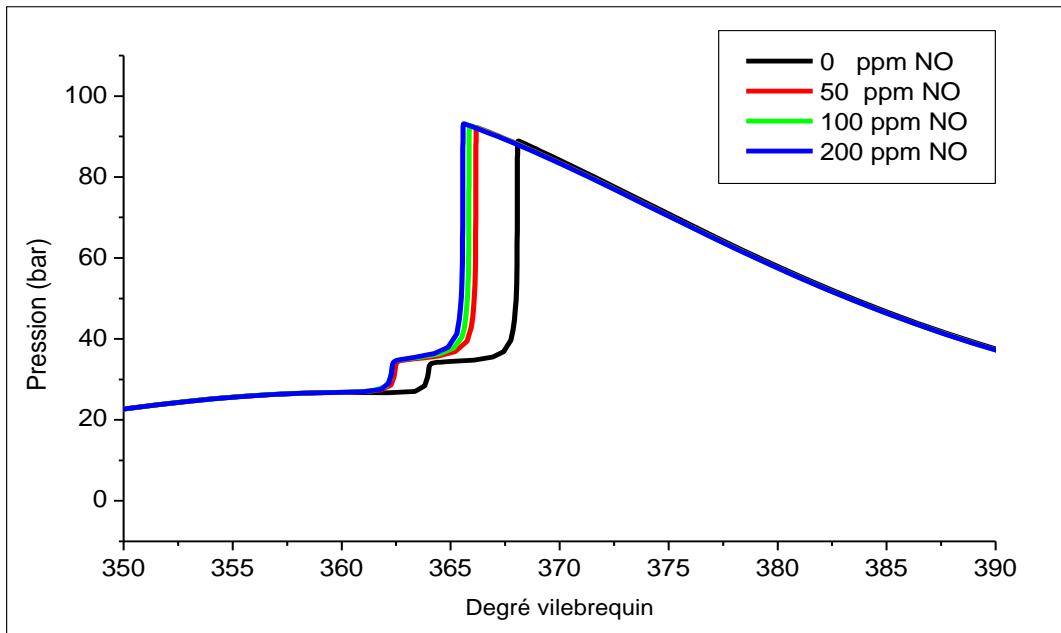
Le tableau suivant résume les paramètres du moteur utilisé et ainsi les conditions initiales de température et de pression.

**TAB. V.2** : les paramètres et les conditions initiales utilisées dans notre moteur HCCI.

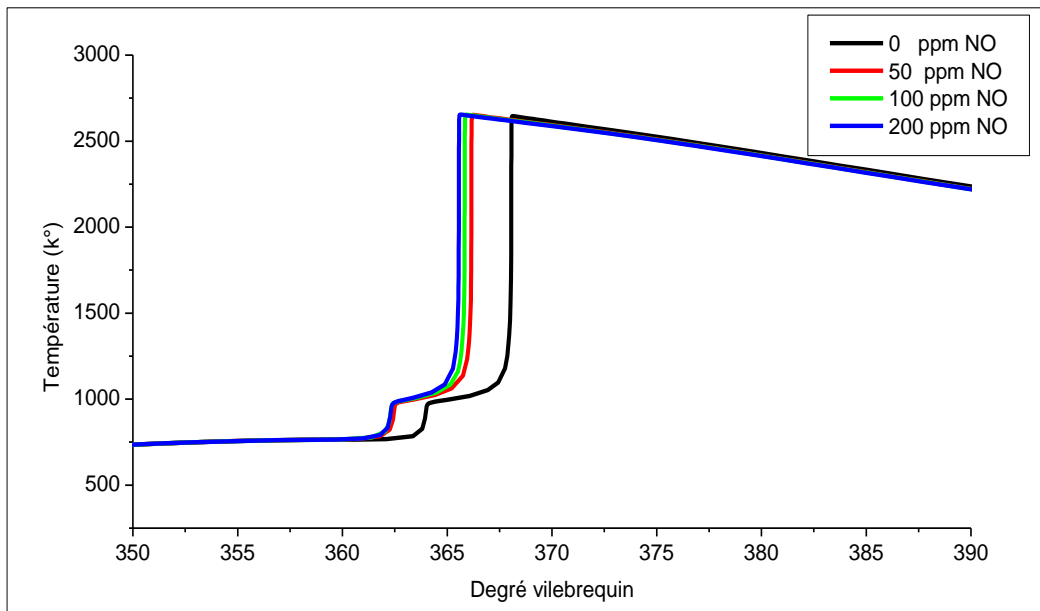
paramètres	valeurs
Taux de compression	15
Cylindrée (cm <sup>3</sup> )	416
Diamètre du piston (mm)	78,3
Course (mm)	86,4
Longueur de la bielle (mm)	158
Pression initiale (bar)	3
Température initiale (°K)	423

#### V.3.2.1 Influence de l'ajout du NO sur la combustion en mode HCCI.

Les résultats suivants sont obtenus à partir de la simulation numérique et par l'utilisation du code de calcul HCCI inclus dans le logiciel CHEMKIN. Dans ce cas, on utilise un mélange (heptane/toluène) pauvre ( $\phi=0.73$ ) et on varie les quantités du NO ajoutées (50,100 et 200 ppm) pour voir ses effets sur l'initiation et le déroulement de la combustion HCCI.



(a)



(b)

**Figure. V.23:** Impact de l'ajout du NO sur le déroulement et l'initiation de la combustion.

- (a) La pression - (b) la température

Les figures. V.23.a et V.23.b présentent respectivement la pression et la température en fonction du degré vilebrequin pour différents ajouts du NO (50,100 et 200 ppm) et on remarque que :

L'ajout du NO a un effet très important sur l'initiation et le déroulement de la combustion. Les figures montrent que l'augmentation des ajouts du NO engendre une avance de l'initiation ce qui engendre une diminution de la durée de la combustion (voir la figure c'est après).

Ces résultats montrent bien que l'ajout du NO a un effet d'un inhibiteur de la flamme froide et d'un promoteur pour la flamme principale, juste ce qu'on a trouvé lors de la simulation de l'oxydation de l'heptane par l'utilisation du réacteur auto-ajuté (voir la deuxième partie de cette simulation).

Cependant, il est important de noter que - comme il existait dans la littérature [98 et 101] l'effet de l'addition du NO sur le déroulement de la combustion dépend de la quantité ajoutée du NO (Figure. V.23) : l'effet est significatif pour l'ajout d'une faible quantité du NO (50 ppm), sur le déroulement de la combustion, tandis qu'à plus fort ajout du NO (100ppm), son effet sur le fonctionnement du moteur HCCI reste plus proche où on ajoute une faible quantité du NO (Figure. V.24).

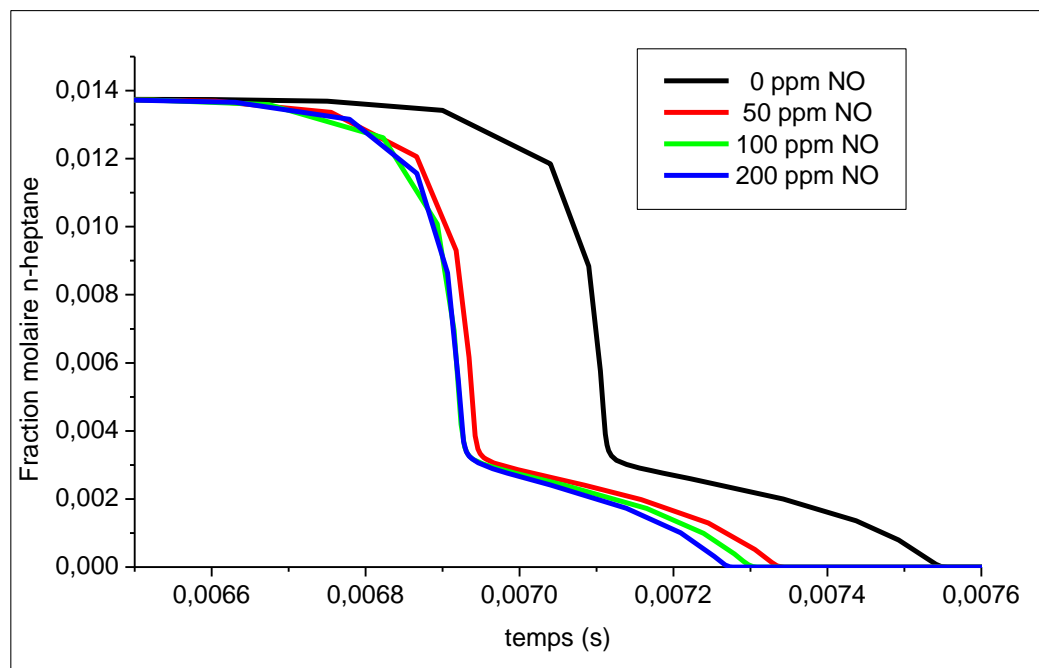


Figure. V.24: Impact de l'ajout du NO sur le déroulement et l'initiation de la combustion.

### V.3.2.2 Influence de l'ajout du NO sur les émissions polluantes.

#### V.3.2.2.1 Influence de l'ajout du NO sur les hydrocarbures imbrulés et le monoxyde de carbone

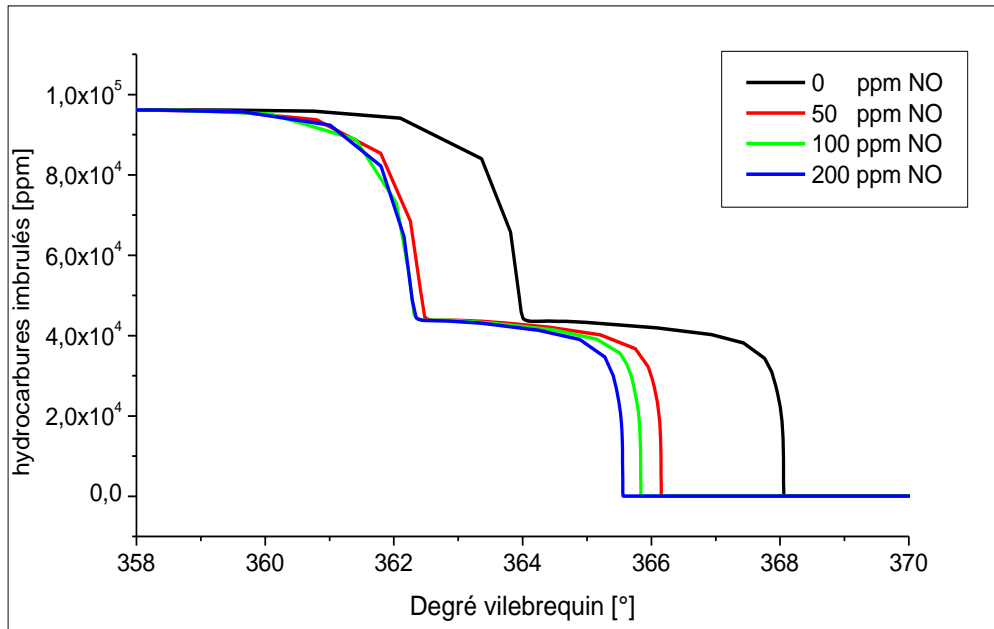


Figure. V.25: Impact de l'ajout du NO sur le déroulement et l'initiation de la combustion.

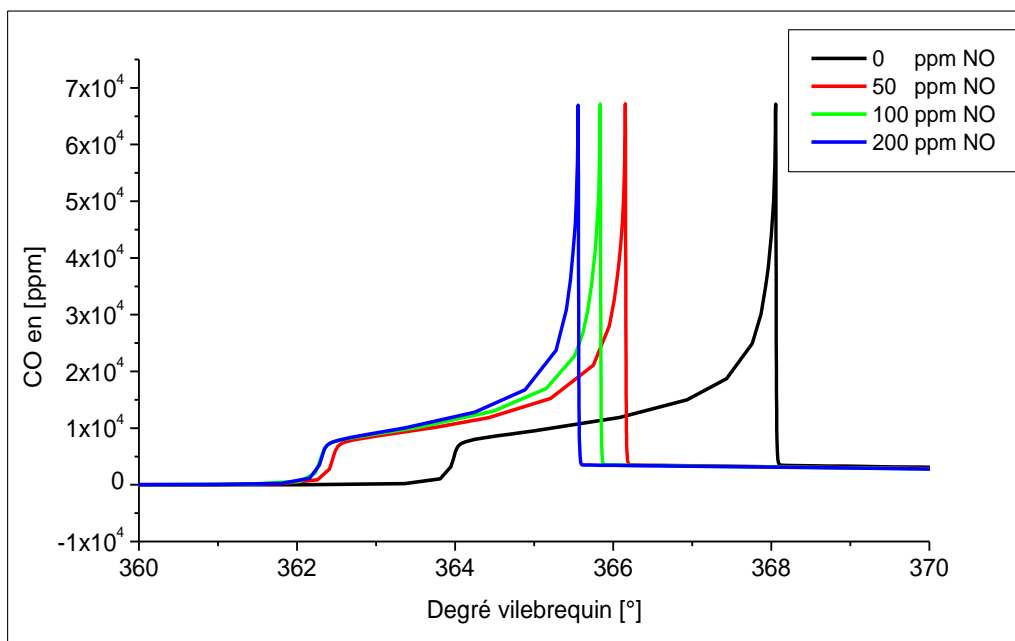


Figure. V.26: Impact de l'ajout du NO sur la formation du CO.

Les figures. V.25 et V.26 illustrent respectivement, la consommation des hydrocarbures imbrulés et la formation du CO en fonction du degré vilebrequin pour différents ajouts du NO (50,100 et 200 ppm) et on remarque que :

Le début de la consommation des HC est en fonction de l'ajout du NO. On remarque aussi que le fort ajout du NO n'affecte pas la formation ou la consommation des HC. La figure. V.27 montre que l'augmentation du NO ajouté engendre une diminution de la production des particules du CO à la fin de la combustion. Cette diminution est due à l'avance de l'initiation et aussi à la diminution du délai d'auto-inflammation.

Plusieurs études lient, pour un même carburant, en mode HCCI, l'augmentation du délai d'auto-inflammation à l'augmentation des émissions de HC et de CO [119 et 120]. En effet, il apparaît que plus le délai est long, plus le pic de température est faible, et donc plus il y a la formation de HC et de CO. Les deux figures, ci-dessus, montrent bien que l'ajout du NO engendre une diminution du délai d'auto-inflammation ce qui implique une diminution de la formation des CO et des hydrocarbures imbrulés.

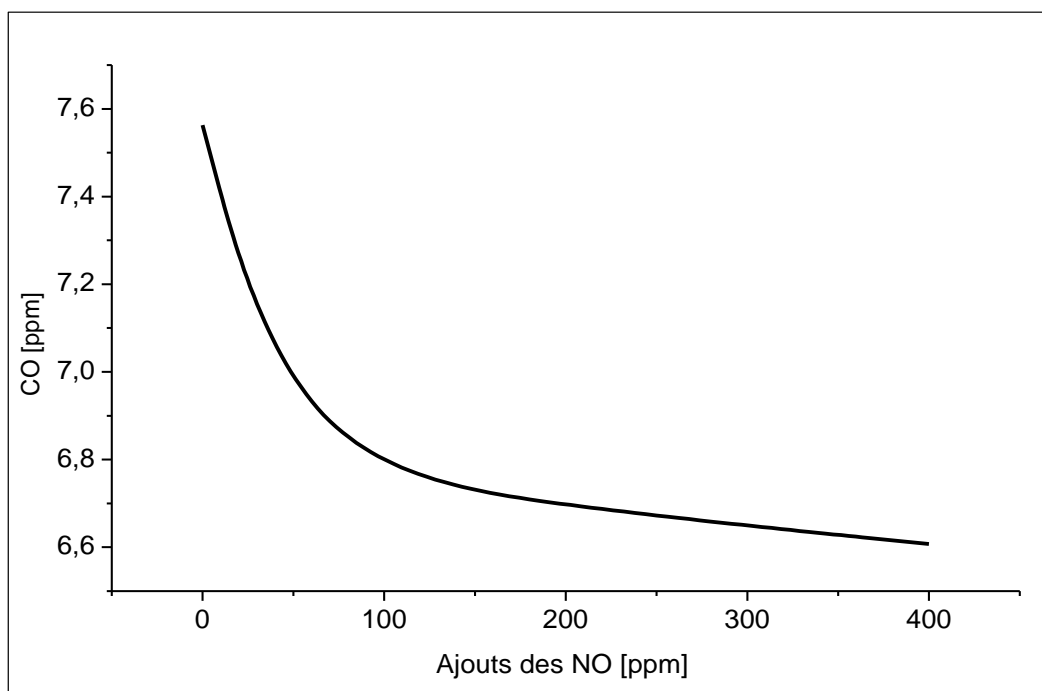
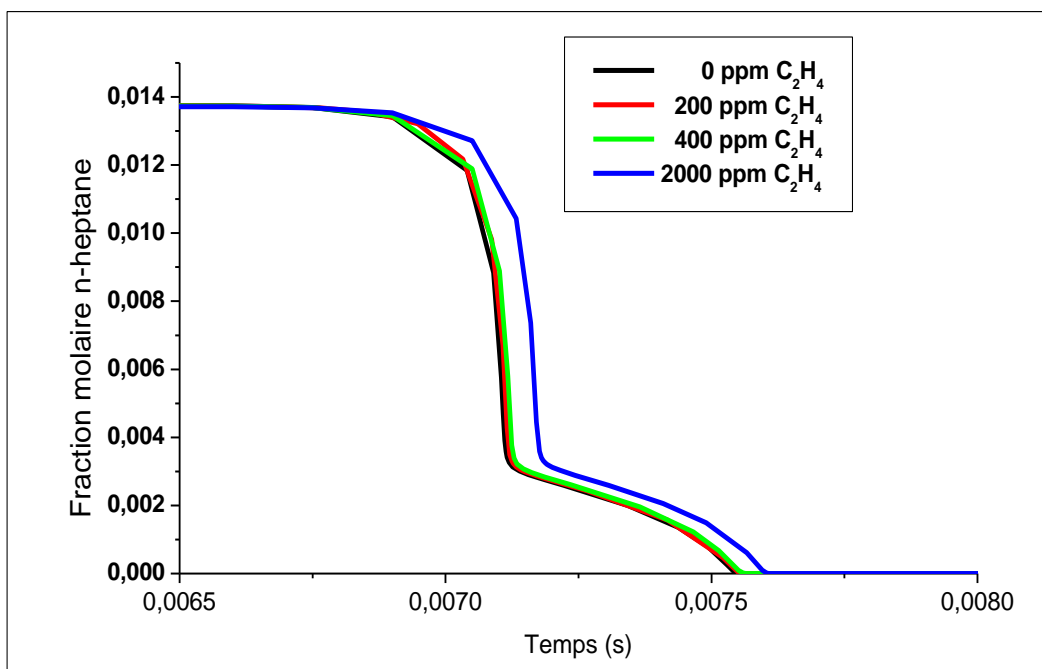


Figure. V.27: Impact de l'ajout du NO sur la formation du CO à la fin de la combustion.

### V.3.2.3 Influence de l'ajout du $C_2H_4$ sur la combustion en mode HCCI.

La figure suivante présente la quantité de l'heptane consommé en fonction du temps pour différents ajouts de l'éthylène (0, 200, 400 et 2000 ppm). On remarque que l'ajout de l'éthylène engendre un léger retard de l'inflammation et de la consommation du combustible (l'heptane). Malgré, l'ajout des quantités plus grandes de l'éthylène, l'effet visible en moteur est différent de celui visible en réacteur. Ce résultat montre que l'effet chimique réel de l'éthylène est faible.



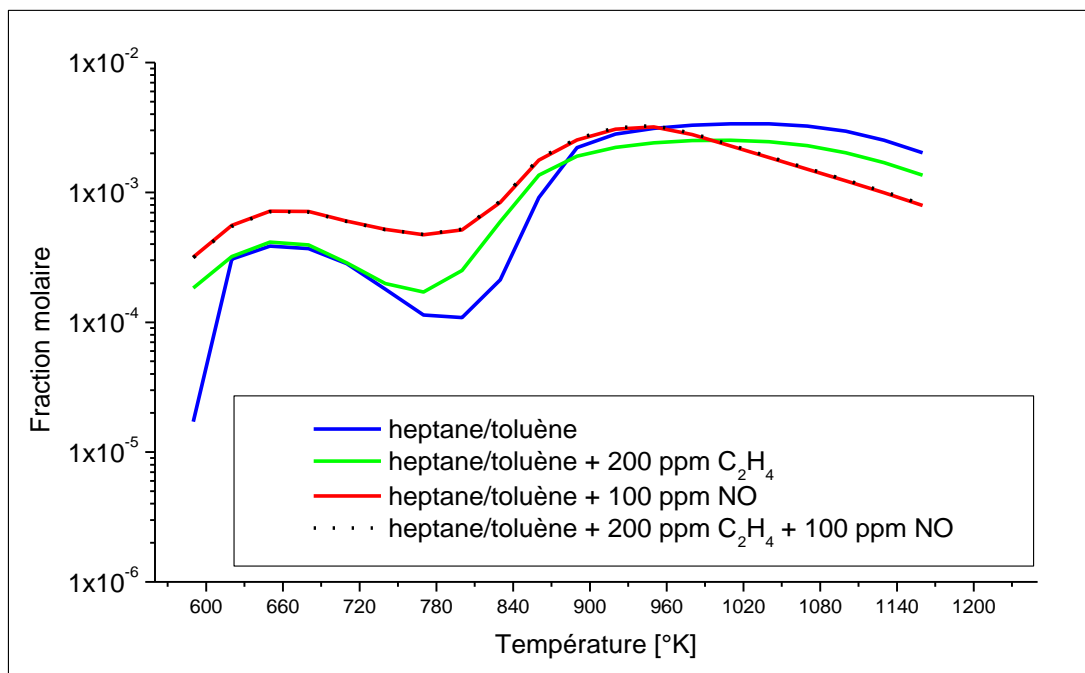
**Figure. V.28:** Impact de l'ajout de  $C_2H_4$  sur le déroulement et l'initiation de la combustion.

#### V.4 Influences de l'ajout de deux espèces simultanément

On a déjà étudié l'impact de l'ajout d'une espèce qui était l'un des constituants des gaz d'échappements sur l'oxydation des hydrocarbures (le mélange heptane/toluène) en mode HCCI mais dans ce cas-là, on basera sur l'ajout de deux espèces des gaz d'échappement en même temps pour voir leurs effets sur l'oxydation du mélange air/carburant.

Pour obtenir des résultats on a utilisé le code de calcul PSR et on choisit une richesse de 0.75, une pression de 10 bars, un temps de passage 0.7s et on varie la température de 560 °K à 1160 °K, par pas de 30 °K. On a choisit trois ajouts différents : le monoxyde d'azote avec l'éthylène, le monoxyde d'azote avec le méthanol et l'éthylène avec le méthanol.

##### V.4.1 Influence de l'ajout du NO avec l'éthylène.

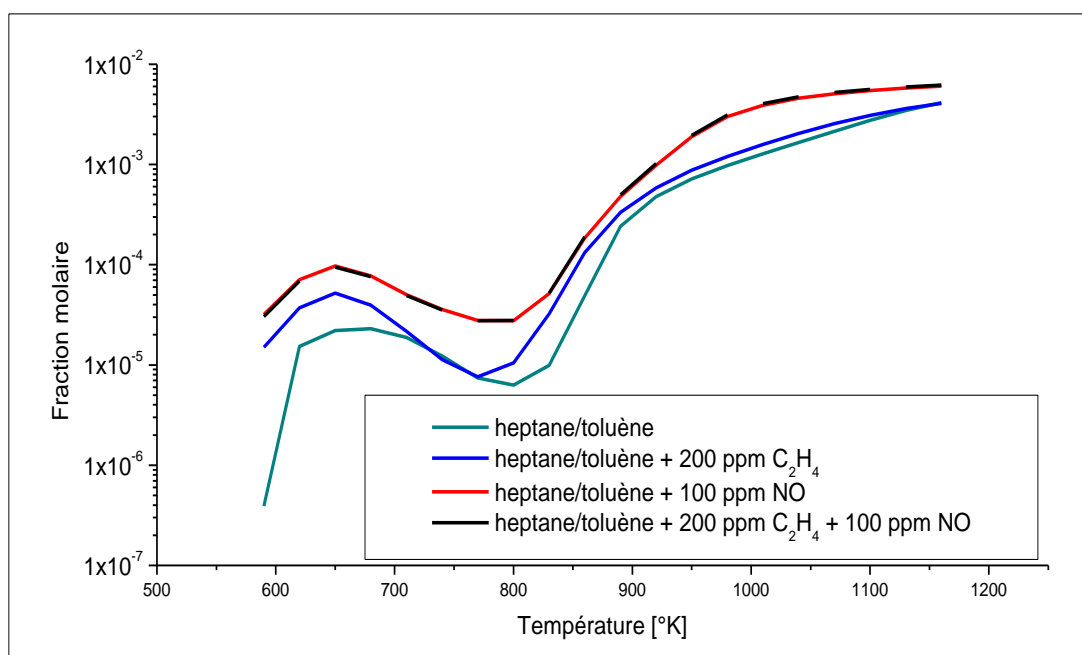


**Figure. V.29:** Influence de l'ajout de 100 ppm de NO avec 200 ppm de  $C_2H_4$  sur la production du CO. (Mélange n-heptane/toluène  $P=10$  bars et  $\phi = 0.75$ ).

La figure ci-dessus illustre l'allure de la formation du monoxyde de carbone en fonction de la température pour différents ajouts des espèces du gaz d'échappement (0,

200 ppm  $C_2H_4$ , 100 ppm NO et 200 ppm  $C_2H_4$  + 100 ppm NO), en général la présence des ajouts du NO a un effet très important sur la production du CO comparables aux ajouts de l'éthylène mais on remarque aussi que l'ajout des deux espèces en même temps (le monoxyde d'azote avec l'éthylène) engendre une avance de l'oxydation des hydrocarbures en basse température de quelque degrés vilebrequin comparable aux ajouts du NO qui ont retardé l'oxydation. L'addition des deux espèces ensemble diminue la zone du gradient négatif de la température car la décroissance de la réactivité est très importante pour des cas sans ajout des NO. Dans le domaine des hautes températures, à partir de 950 °K, la diminution des teneurs du CO est beaucoup plus rapide que sans présence des ajouts.

De façon générale, on remarque que l'ajout des deux espèces simultanées l'éthylène et le monoxyde d'azote entraîne un effet global qui est égal à l'effet de l'ajout du NO seul. Dans ce cas-la, on a conclu que l'ajout de deux espèces simultanées n'est pas forcément la sommes des deux effets individuels et on en résulte que l'effet majeure, c'est l'effet de l'ajout du NO seul.



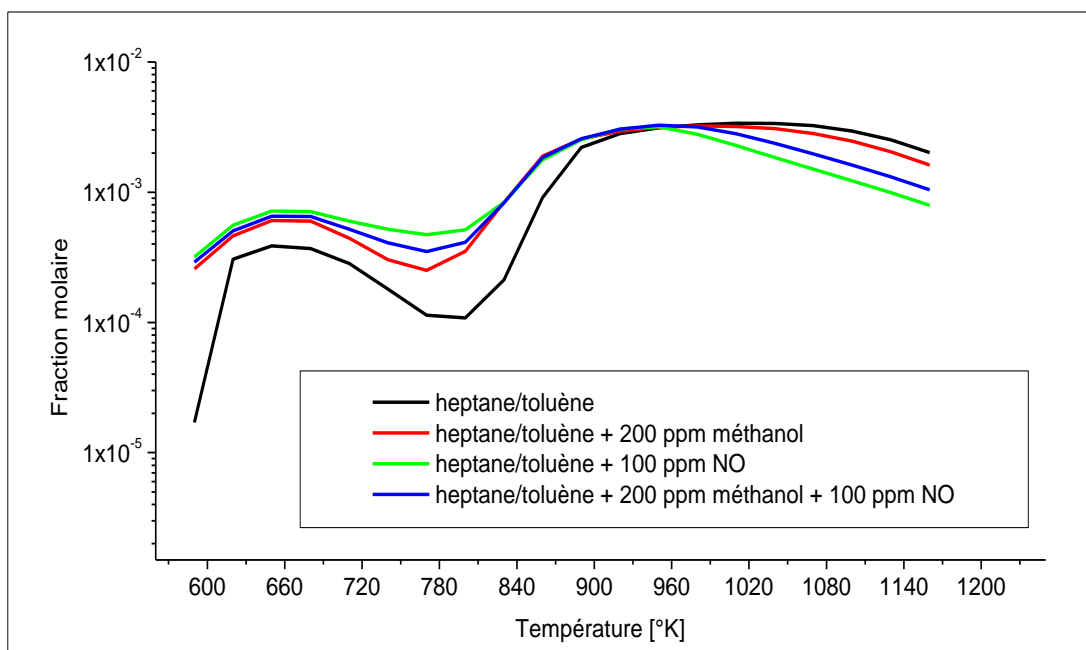
**Figure. V.30:** Influence de l'ajout de 100 ppm de NO avec 200 ppm de  $C_2H_4$  sur la production du  $CO_2$ . (Mélange n-heptane/toluène  $P=10$  bars et  $\phi = 0.75$ ).

**La figure. V.30** montre l'allure de la formation du  $\text{CO}_2$  en fonction de la température pour différents ajouts des espèces du gaz d'échappement (0, 200 ppm  $\text{C}_2\text{H}_4$ , 100 ppm NO et 200 ppm  $\text{C}_2\text{H}_4$  + 100 ppm NO), on remarque que la formation du  $\text{CO}_2$  est augmentée en fonction des ajouts.

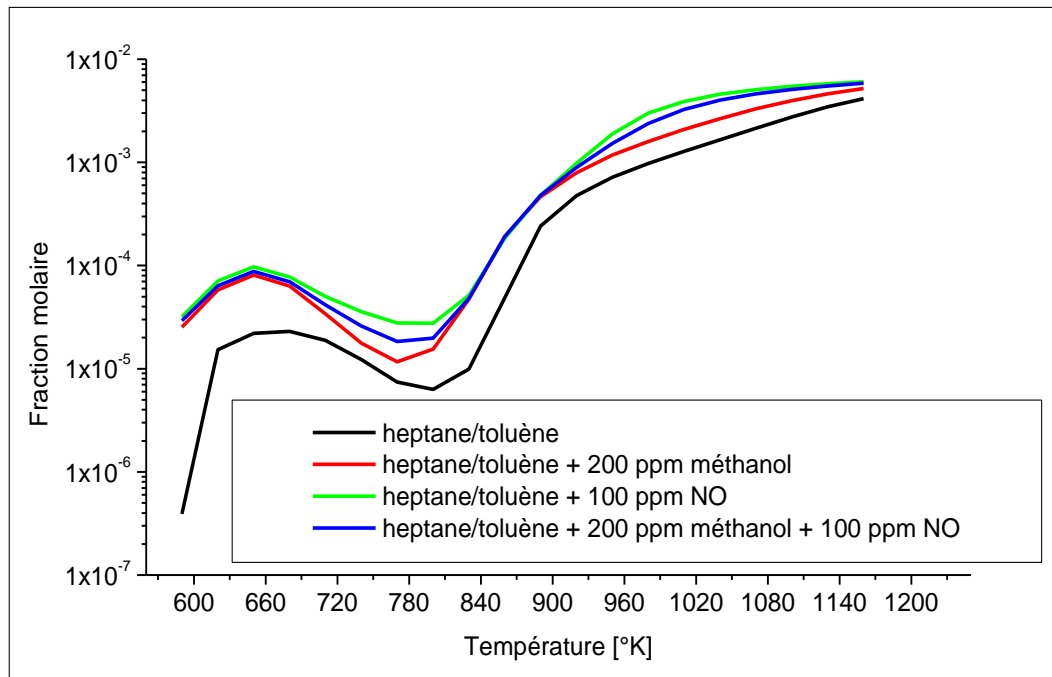
L'ajout d'éthylène combiné avec l'oxyde d'azote montre qu'il y a une formation d'une grande quantité du  $\text{CO}_2$  à la fin de la combustion. Cette augmentation de la formation du dioxyde de carbone est due à la disparition rapide du CO (l'un des intermédiaires réactionnels).

#### V.4.2 Influence de l'ajout du NO avec du méthanol.

**Les figures. V.31 et 32** présentent l'allure de la formation du monoxyde de carbone et du dioxyde de carbone respectivement en fonction de la température pour différents ajouts des espèces du gaz d'échappement (0, 200 ppm méthanol, 100 ppm NO et 200 ppm méthanol avec 100 ppm NO), en général on remarque que l'effet du NO + méthanol est égal au somme des effets du NO et des effets du méthanol. Comme l'effet de l'ajout du méthanol est négligeable par rapport au NO donc l'ajout simultané n'a aucune amplification sur la combustion.



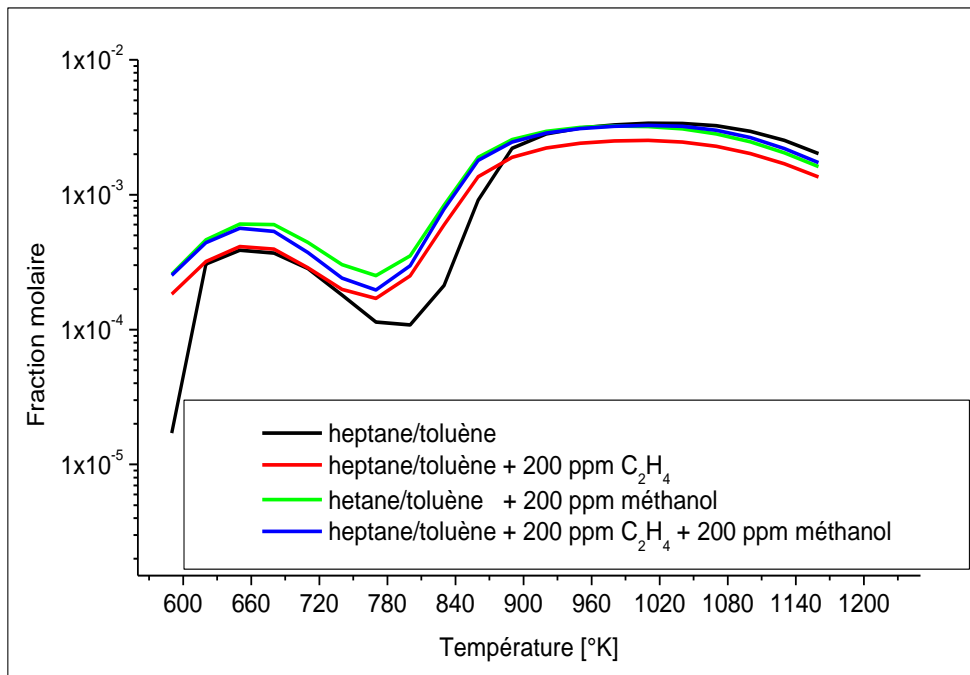
**Figure. V.31:** Influence de l'ajout de 100 ppm de NO avec 200 ppm du méthanol sur la production du CO. (Mélange n-heptane/toluène P=10 bars et  $\varphi = 0.75$ ).



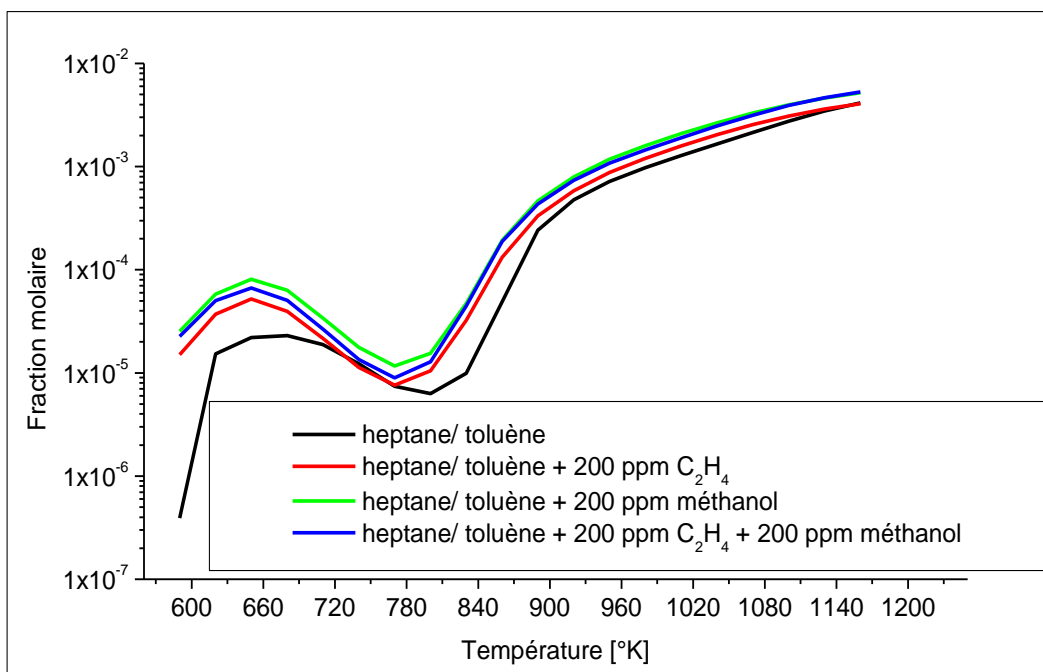
**Figure. V.32:** Influence de l'ajout de 100 ppm de NO avec 200 ppm du méthanol sur la production du CO<sub>2</sub>. (Mélange n-heptane/toluène P=10 bars et  $\varphi = 0.75$ ).

#### V.4.3 Influence de l'ajout d'éthylène avec le méthanol.

Les figures. V.33 et 34 présentent l'allure de la formation du monoxyde de carbone et du dioxyde de carbone respectivement en fonction de la température pour différents ajouts des espèces du gaz d'échappement (0, 200 ppm méthanol, 200 ppm d'éthylène et 200 ppm méthanol avec 200 ppm d'éthylène). L'ajout de 200 ppm d'éthylène avec 200 ppm du méthanol a un effet moins significatif sur l'oxydation des hydrocarbures à cause de l'impact faible de chacune de ces espèces sur la combustion (voir les figures). En effet, ce n'est pas possible d'avoir un impact plus significatif sur la combustion à partir de la combinaison des deux espèces ajoutées (l'éthylène avec le méthanol).



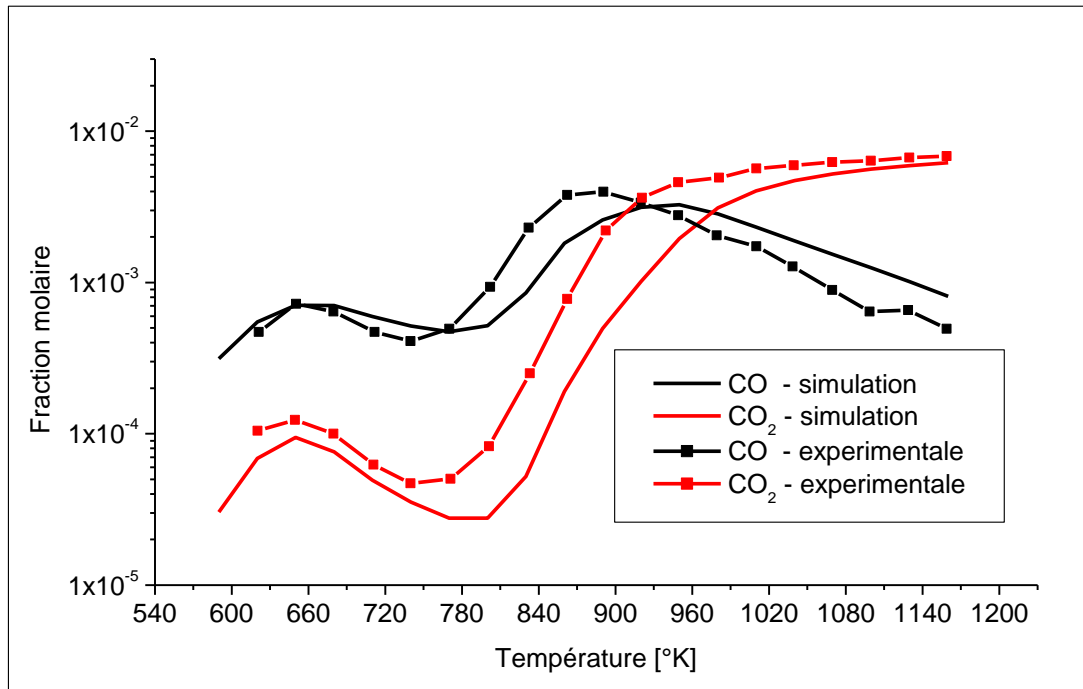
**Figure. V.33:** Influence de l'ajout de 200 ppm de  $C_2H_4$  avec 200 ppm du méthanol sur la production du CO. (Mélange n-heptane/toluène  $P=10$  bars et  $\varphi = 0.75$ ).



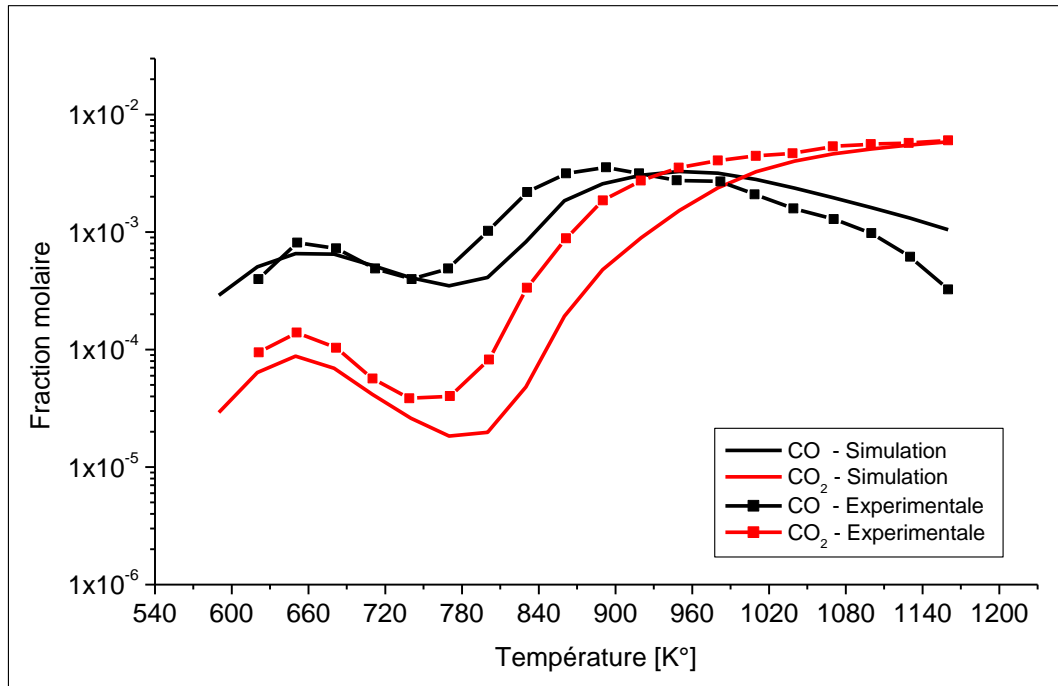
**Figure. V.34:** Influence de l'ajout de 200 ppm de  $C_2H_4$  avec 200 ppm du méthanol sur la production du  $CO_2$ . (Mélange n-heptane/toluène  $P=10$  bars et  $\varphi = 0.75$ ).

#### V.4.4 Comparaison des résultats

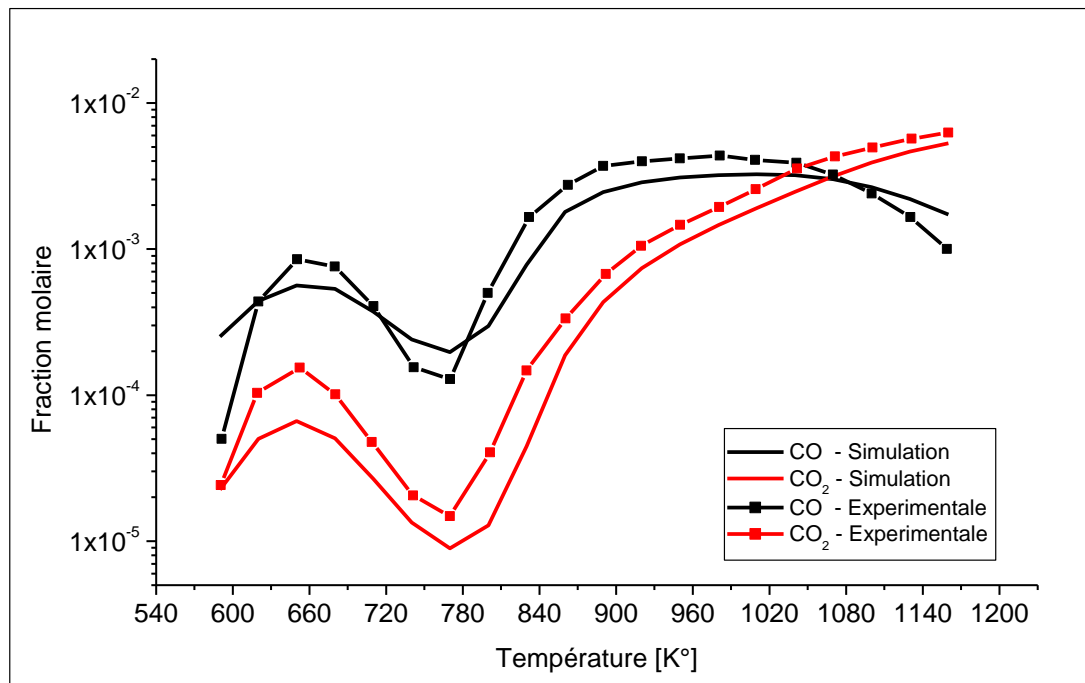
On a choisi quelques résultats qu'on a obtenus par la simulation pour faire une comparaison avec des résultats expérimentaux réalisés dans les mêmes conditions.



**Figure. V.35:** Impact de l'ajout des 100 ppm du NO avec 200 ppm de l'éthylène sur la formation du CO et du CO<sub>2</sub> (expérimental [118]).



**Figure. V.36:** Impact de l'ajout des 100 ppm du NO avec 200 ppm du méthanol sur la formation du CO et du CO<sub>2</sub> (expérimental [118]).



**Figure. V.37:** Impact de l'ajout des 200 ppm de l'éthylène avec 200 ppm du méthanol sur la formation du CO et du CO<sub>2</sub> (expérimental [118]).

Les figures. **V.35**, **36** et **37** montrent des courbes qui sont réalisés à partir de notre simulation numérique (lignes simples) et les autres courbes sont amenés de l'expérimentale (lignes symbolisés). On distingue deux types de courbes : courbes en noir montrent la formation du monoxyde de carbone et les courbes en rouge montrent la formation du dioxyde de carbone. Les trois graphes ci-dessus sont réalisés pour comparer l'effet de l'ajout de : 100 ppm du NO avec 200 ppm de l'éthylène, 100 ppm du NO avec 200 ppm du méthanol et 200 ppm de l'éthylène avec 200 ppm du méthanol respectivement.

A partir de cette comparaison on a trouvé presque les mêmes courbes mais avec quelques différences. Ces différences sont dûes à plusieurs paramètres comme les hypothèses utilisées, les erreurs de mesures expérimentales, la réalité de la combustion, l'utilisation des mécanismes réactionnels a besoin de beaucoup de calcul et d'autre causes sont liées à la nature des hydrocarbures utilisés,...). Mais en général, on a trouvé qu'il y a une correspondance entre ces résultats. La forme de l'allure de la simulation montre les trois régimes de l'oxydation d'un hydrocarbure en mode HCCI et elle est très convenable avec les courbes de l'expérimentale.



## *Conclusion générale et perspectives*

---

## CONCLUSION GENERALE

Dans l'objectif de limiter la production des émissions polluantes et d'augmenter les rendements énergétiques des moteurs à combustion interne, de nouveaux concepts de combustion sont apparus. Le mode HCCI étant l'un de ces concepts qui permet une baisse significative des émissions polluantes (les NO<sub>x</sub> et les particules de suies), mais son contrôle est très difficile. L'utilisation de la recirculation des gaz d'échappement est l'un des solutions utilisables pour contrôler ce mode de combustion.

Dans cette étude, on a développé un mécanisme réactionnel par un assemblage de trois mécanismes réactionnels détaillés (le mécanisme réactionnel détaillé du n-heptane, le mécanisme réactionnel détaillé du toluène et le mécanisme réactionnel détaillé du NO) chaque mécanisme a un rôle. L'assemblage de ces mécanismes nous donne un mécanisme réactionnel développé constitué de **1055 espèces** et de **4495 réactions**.

La simulation du fonctionnement du moteur HCCI a été réalisée à l'aide du programme de calcul CHEMKIN. L'existence d'un code de calcul qui s'appelle réacteur auto-agité dans la bibliothèque du CHEMKIN nous permet une étude l'oxydation d'un hydrocarbure utilisé pour faire fonctionner le moteur.

On a étudié l'influence du taux d'EGR sur le déroulement de la combustion dans un moteur à combustion interne type HCCI (amélioration les technologies des moteurs à combustion interne), sur la réduction de la consommation du combustible utilisé (coté économique) et sur la formation et la réduction des émissions polluantes (coté environnemental). Ensuite, on a étudié l'effet de certains espèces des gaz d'échappement sur l'oxydation des hydrocarbures utilisés pour faire fonctionner ce moteur (l'heptane dans notre étude) et ainsi leur effet sur le déroulement de la combustion HCCI et sur la réduction des émissions polluantes rejetées par ce type de moteur. On a finalisé notre travail par l'étude de l'impact de l'ajout de deux espèces simultanées sur les mêmes points noté précédemment et on a obtenu quelques résultats importants :

- Pour les paramètres de fonctionnement du moteur (température et pression) les résultats qu'on a obtenus en fonction du taux d'EGR ont montré que l'augmentation du taux des gaz d'échappement engendre une diminution du pic de pression et une diminution de la

température maximale dans le cylindre du moteur. En parfaite concordance avec la logique du processus de combustion dans les moteurs HCCI qui fonctionnent en mélanges pauvres, et les conditions de la formation des oxydes d'azote (la température et le taux d'oxygène), ces résultats entraînent une diminution de la formation de ces espèces polluantes liées à la concentration des EGR ajoutés. L'étude montre qu'il doit préciser le taux ajouté (un faible taux n'a aucun effet et un fort taux déséquilibre le fonctionnement du moteur). Notre travail limite le taux d'EGR entre 20% et 40%.

- Globalement l'ajout de NO entraîne une inhibition de la flamme froide c'est-à-dire une diminution de l'effet NTC et une promotion efficace pour l'oxydation des hydrocarbures à haute température.

- Il ya une diminution de la formation des teneurs des hydrocarbures imbrûlés HC et du monoxyde de carbone CO lie par l'augmentation des ajouts du NO.

- Les hydrocarbures imbrûlés sont en grande quantité dans les gaz EGR, et dans notre travail on a testé quelques espèces et on a trouvé que certaines espèces permettent d'augmenter l'efficacité de l'initiation et le déroulement de la combustion principale et d'autres permettent de retarder la combustion.

- À la stœchiométrie on sait que la formation des NOx est minimale par contre la formation des suies est maximales (travaux du Golovitchev [34]) ce qui nous oblige à faire un choix plus judicieux de la richesse; ou tout simplement d'avoir un mélange pauvre au voisinage de la stœchiométrie pour s'assurer de l'oxydation complète des suies. À cet effet, l'utilisation des EGR joue un rôle de délutions (diminution de la température et de l'oxygène) ce qui conduit à une combustion plus propre et à des émissions polluantes réduites.

- Notre étude indique que l'ajout de deux espèces simultanées (ensembles) n'implique pas que leur effet sur la combustion était la somme de l'effet de ces deux espèces ce qu'il montre que certaine espèce a un effet majeure sur la combustion HCCI et d'autre n'a aucune effet.

- Certaines espèces composantes des gaz EGR avaient un effet très important sur l'initiation de la combustion, ce qui donne une idée générale sur le contrôle de la combustion en mode HCCI.

- L'influence des gaz EGR sur l'initiation et le déroulement de la combustion dépend des espèces entrantes dans leurs compositions.

A la suite de cette étude, plusieurs travaux peuvent l'accomplir pour obtenir un bon contrôle du mode HCCI telle qu'une meilleure gestion de la chimie des carburants utilisés, l'étude de la composition des suies et leurs mécanismes réactionnels dans le circuit des EGR et l'utilisation de systèmes de post- traitement des gaz d'échappement pour obtenir une composition de gaz brûlés plus proche de l'idéal.

Finalement, ce modeste travail est devenu comme une base de données mais il se reste encore d'améliorer pour atteindre les meilleurs résultats.



## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

---

**REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES**

- [1] “Greenhouse gas emissions in the EU-27 by gas and sector, 2011”. [www.eea.europa.eu](http://www.eea.europa.eu).
- [2] “Sector share of nitrogen oxides emissions (EEA member countries) 2015”. [www.eea.europa.eu](http://www.eea.europa.eu).
- [3] “Air quality in Europe — 2016 report”. [www.eea.europa.eu](http://www.eea.europa.eu).
- [4] J.B. Heywood, “Internal Combustion Engine Fundamentals,” McGraw-Hill, Inc. ISBN 0-07-028637-X, (1988).
- [5] V.K. Pauline. “Modélisation des oxydes d’azote et des suies dans les moteurs Diesel”. Ph.D. Thèse, Ecole Centrale.IFP Energies Nouvelles, Division Techniques d’Applications énergétiques EM2C, Centrale Paris. France,( 2012).
- [6] M.W. Katarzina. “Analyse de flammes pré-mélangées méthane/monoxyde d’azote/ammoniac/ air : expérience, modélisation, application à la réduction des oxydes d’azote”. Ph.D. Thèse, Université des Sciences et Technologies, Lille, France,2006.
- [7] J. A . Miller., M.. Pilling. Et J. Troe. “Unraveling combustion mechanism through a quantitative understanding of elementary reactions”. Proc. Combust. Inst, 30, 43–88, (2005).
- [8] P. Glarborg. Hidden. “Interactions trace species governing combustion and emissions”. Proc. Combust. Inst., 31 :77–98, (2007).
- [9] Y.B. Zeldovich., P.Y. Sadvnikov. et D.A. Frank-Kamenetskii. “Oxydation of Nitrogen in combustion”. Académie des Sciences de l’URSS, Institute of chemical physics, Moscou Leningrad, (1947).
- [10] C.P. Fenimore., G.W. Jones. “Oxidation of ammonia in flames”. Journal of Physical Chemistry, 65, 298-303. (1961).
- [11] C.P. Fenimore. “Formation of nitric oxide in premixed hydrocarbon flames”. 13rd Symposium International on Combustion , 373-380. (1971).
- [12] L. Moskaleva. et M.C. Lin. “The Spin-Conserved Reaction  $CH+N_2=H+NCN$ : A Major Pathway to Prompt NO Studied by Quantum/Statistical Theory Calculations and Kinetic Modeling of Rate Constant.” Proceedings of Combustion Institute 28: 2393-401.(2000).
- [13] L.L. Smith., H.Karim, M.J.Castaldi., S. P Etemad., W,C fefferle., V.K. Khanna. et K.O. Smith. “ Rich-catalytic lean-burn combustion for low-single digit NOx gas turbines”. Paper GT-2003-38129. Presented at ASME Turbo Expo 2003, Atlanta. (2003).

- [14] A. el Bakali. "Cinétique de combustion du n-heptane et de l'isooctane à pression atmosphérique". Ph.D. Thèse, université d'Orléans. France. (1996).
- [15] M. J. Bradley. "Updated Comparison of Energy Use & Emissions from Different Transportation Modes". 2<sup>nd</sup> Floor Manchester, NH 0310.(2008).
- [16] J. Lamouroux. "Modélisation de la combustion diluée par tabulation de la cinétique chimique" Ph.D. Thèse, École Centrale Paris, France. (2013).
- [17] H. A. Olschewski, J. troe, Gg. H. Wagner, and B; Bunsenges. J. Phys. Chem.,70 :450, (1966).
- [18] D. C. Haworth., R. J . Blint., B. Cuenot. et T. J . Poinso. "Numerical simulation of turbulent propane-air combustion with non homogeneous reactants". Combustion and Flame, 121((3)) :395–417, (2000).
- [19] M. Nishioka., S. Nakagawa., Y. Ishikawa. et T. Takeno. "NO emissions characteristics of methane-air double flame" . Combust. Flame, 98 :127–138, (1994).
- [20] M. Frenklach. et H. Wang. "Detailed Mechanism and Modeling of Soot Particle Formation, in Soot Formation in Combustion". 165, (1994).
- [21] J. Appel., H. Bockhorn. et M. Frenklach. "Kinetic Modeling of Soot Formation with Detailed Chemistry and Physics: Laminar Premixed Flames of C2 Hydrocarbons". Combustion and flame. 121, 122–136, (2000).
- [22] M. Frenklach., D.W. Clary., W. C. J. Gardinier. et S. E. Stein. "Detailed kinetic modelling of soot formation in shock tube". Proc. Combust. Inst., pages 887–901, (1984).
- [23] J.A. Cole., J. D. Bittner, J. P. Longwell. et J. B. Howard. "Formation mechanisms of aromatic compounds in aliphatic flames". Combust. Flame, 56 :51–70, (1984).
- [24] M. Frenklach. et J. Warnatz. "Combust. Sci. and Tech., Title = Detailed modeling of PAH Profiles in a sooting low-pressure acetylene flame". Volume = 51, Pages = 256-283, Year = (1987).
- [25] J.A. Miller. et C. F. Mellius. "Kinetic and thermodynamic issues in the formation of aromatic compounds in flames of aliphatic fuels". Combust. Flame, 91 :21–39, (1992).
- [26] S.E. Stein., A. J. Walker., M. M. Suryan. et A., Fahr. "A New Pathway to Benzene in Flames". The 23<sup>rd</sup> Intern, Symp, on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, USA, 1990, pp. 85-90, (1990).
- [27] Stéphane. Barbusse. Gabriel Plassat. "Les particules de combustion automobile et leurs dispositifs". (ADEME 2005), disponible sur : [www.ademe.fr](http://www.ademe.fr).

- [28] P. Dagaut., M. Reuillon. et M. Cathonnet. “ High Pressure Oxidation of Liquid Fuels from Low to High Temperature” . 1. n-Heptane and iso-Octane. Combustion Science and Technology, (95)233-260. (1994).
- [29] P. Amneus., F. Mauss., M. Kraft., A. Vressner. et B. Johansson. “NO<sub>x</sub> and N<sub>2</sub>O Formation in the HCCI Engine,” . SAE Paper No. 2005-01-0126. (2005).
- [30] A. Boiarcuic. “Développement de la technique (Incandescence Induite par Laser) pour caractériser les particules de suies dans un moteur Diesel” . Ph.D Thèse , Université d’Orléans ,France, (2006).
- [31] T. Feng. “Numerical Modelling of Soot and NO<sub>x</sub> Formation in Non- Stationary Diesel Flames with Complex Chemistry” . Ph.D. Thèse, Chalmers University of Technology, Suede, (2003).
- [32] F. Douce. “Etude de la formation des particules de suie à partir des constituants représentatifs du gazole” . Ph.D. , Université, d’Orléans ,France, (2001).
- [33] A. Krayem. (Juillet2012). “Préparation d’un moteur diesel a pollution réduite” . Université Libanaise (Juillet2012). <http://www.educauto.org/Documents/Infotech/ReductionDesNox.pdf>.
- [34] V. I. Golovitchev. (Novembre2006). “CFD combustion and emission formation modeling for a HSDI diesel engine using detailed chemistry” Dep of Applied Mechanics. Chalmers University of Technology. Gothenburg, Sweden, (2006).
- [35] P. Miles. “On sources of CO and UHC emissions in low-temperature diesel combustion regimes” . 2007 Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion Symposium, Lund, Suède, (2007).
- [36] Brigitte. Martin. “Les techniques de dépollution des véhicules industriels” . (PANORAMA 2005). Disponible sur: <http://www.ifpenergiesnouvelles.fr>.
- [37] Philippe. DAGAUT. “Formation et réduction des polluants en combustion” . CNRS Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs 1C, avenue de la recherche Scientifique. 45071 Orléans cedex 2. [dagaut@cnrs-Orléans.fr](mailto:dagaut@cnrs-Orléans.fr).
- [38] A. Haupais. “Combustion dans les moteurs Diesel” . Edition Techniques de l’ingénieur, 1992, B2700.(1992).
- [39] ADEME. “Emissions de particules et de NO<sub>x</sub> par les véhicules routiers” . (2014) disponible sur: <http://carlabelling.ademe.fr>.
- [40] S. Onishi., S. H. Jo., K. Shoda., P. D. Jo. et S. Kato. “Active Thermo Atmosphere Combustion (ATAC) - A new Combustion Process for Internal Combustion Engines” . Society of Automotive Engineers, (790501).(1979).

- [41] P. M. Najt. et D. E. Foster. "Compression-Ignited Homogeneous Charge Combustion". Society of Automotive Engineers, (830264).(1983).
- [42] Différence entre injection directe et indirecte. (18/03/2017). <http://www.fiches-auto.fr/articles-auto/fonctionnement-d-une-auto/s-1256-difference-entre-injection-directe-et-indirecte.php>.
- [43] B. Desmet. "Modes de combustion non conventionnels dans les moteurs à combustion interne". Laboratoire de Mécanique et d'Energétique, Université de Valenciennes et du Hainaut-Cambrésis, EA 2447- Le Mont Houy-59313 VALENCIENNES CEDEX 9.
- [44] N. Docquier., P. Lessart. et J. Chérel. "Data base on ignition delays and combustion history, including characterization of fuel and residual fuels for a set of fuels and operating conditions obtained in engines running in stratified mode with an adapted injection system". PLANET, Deliverable Report. Rapport technique, Institut Français du Pétrole. (2002).
- [45] N. Docquier. "Experimental investigations in an optical HCCI Diesel engine. About the influence of fresh charge preparation and composition on auto-ignition delays and combustion development". 19th ICDERS conference, July 27-August 1, Hakone, Japan.(2003).
- [46] N. Kaneko., H. Ando., H. Ogawa. et N. Miyamoto . "Expansion of the Operating Range with In-Cylinder Water Injection in a Premixed Charge Compression Ignition Engine". Society of Automotive Engineers, (2002-01-1743).(2002).
- [47] H. Akagawa., T. Miyamoto., A. Harada., S.Sasaki., N. Shimazaki., T.Hashizume. et K. Tsujimura. "Approaches to Solve Problems of the Premixed Lean Diesel Combustion". Society of Automotive Engineers, (1999 01-0183).(1999).
- [48] A. Harada., N. Shimazaki., S. Sasaki., T. Miyamoto., H. Akagawa. et K. Tsujimura. "The effects of mixture formation on premixed lean diesel combustion". Society of Automotive Engineers, (980533). (1998).
- [49] B. Walter. et B. Gatellier. "Development of the high power NADITM concept using dual mode diesel combustion to achieve zero NOx and particulate emissions". Society of Automotive Engineers, (2002-01-1744). (2002).
- [50] P. Duret. "Quels carburants pour des moteurs à basses émissions de CO2 ?, Oil & Gas Science and Technology". Rev. IFP Energies nouvelles, 59:551-557, (2004).
- [51] A. Hultqvist., M. Christensen., B. Johansson., A. Franke., M. Richter. et M. Aldén. "A Study of the Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion Process by Chemiluminescence Imaging". SAE Paper 1999-01 n3680,1999.(1999).

- [52] R. Edenhofer., K. Lucka. et H. Köhne . “Low temperature oxidation of diesel air mixtures at atmospheric pressure”. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31:2947-2954,2007.(2007).
- [53] N. Docquier. et D. Mariani. “Etude GSMD1.1 - Rapport des activités 2001, Base de données expérimentale sur moteur transparent en injection directe Diesel Common rail. Etude de l'injection pilote”. *Rapport technique*, Institut Français du Pétrole. (2002).
- [54] N. Docquier., P. Lessart. et J. Chérel. “Platform on Auto-ignition Numerical Engine Simulation Tools - PLANET, Strained experiments (task UD3). Final Report. Etude de la combustion Diesel HCCI sur moteur optique”. *Rapport technique*, Institut Français du Pétrole. (2003).
- [55] M. Christensen., A. Hultqvist. et B. Johansson. “Demonstrating the Multi Fuel Capability of a Homogeneous Charge Compression Ignition Engine with Variable Compression Ratio”. *Society of Automotive Engineers*, (1999-01 3679). (1999).
- [56] M. Christensen., B. Johansson., P. Amnéus. et F. Mauss. “Supercharged Homogeneous Charge Compression Ignition”. *Society of Automotive Engineers*, (980787). (1998).
- [57] G. 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”. *Ph.D. These*, Institut National des Sciences Appliquées INSA, Rouen, France, (2005).
- [58] S. S . Morimoto., Y. Kawabata., T. Sakurai. et T. Amano. “Operating characteristics of a natural gas-fired homogeneous charge compression ignition engine (performance improvement using EGR),” . *SAE Paper 2001-01-1034*, 2001. [View at Google Scholar](#).
- [59] P. U. Ricklin., A. Kazqkov., F. I. Dryer., S. C. Kong. et R . D. Reitz. “The effects of NOx addition on the auto ignition behavior of naturel gas under HCCI conditions”. *SAE Paper*, 2002, no: 2002-01-1746.(2002).
- [60] Venkateswarlu. et Murth. “Emission characteristics of diesel engines with alternative alternative ‘. *Vol.2, Issue 2(2010)69-78*. (2010).
- [61] Pascal. GIANSETTI, “Contrôle moteur à allumage commandé Estimation / prédiction de la masse et de la composition du mélange enfermé dans le cylindre”. *Ph. D.Thèse*, (2005).
- [62] S. C. Sorenson., S.-E.M. “Performance and emissions of a 0.273 liter direct injection diesel engine fuelled with neat dimethyl ether”. 1995. 950064. (1995).
- [63] V. Pradeep. et R. P. Sharma. “Use of HOT EGR for NOx control in a compression ignition engine fuelled with bio-diesel from Jatropha oil”. *Renewable Energy*, 2007.32: p. 1136–1154. (2007).

- [64] D. Agarwal., , S. Sinha. et A. K. Agarwal. “Experimental investigation of control of NO<sub>x</sub> emissions in biodiesel-fueled compression ignition engine”. *Renewable Energy*, 2006. 31(14): p. 2356-2369. (2006).
- [65] Ming. Zheng. Graham., T. Reader. et J.Gary Hawley. “Diesel engine exhaust gas recirculation--a review on advanced and novel concepts”. *Energy Conversion and Management*, 2004. 45(6): p. 883-900. (2004).
- [66] M. Christensen. et B. Johansson. “Supercharged Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) with Exhaust Gas Recirculation and Pilot Fuel”. *SAE Paper 2000-01-1835*, (2000).
- [67] T. Aroonsrisopon., V. Sohm., P. Werner., D. E. Foster., T. Morikawa. et M. Iida. “An Investigation Into the Effect of Fuel Composition on HCCI Combustion Characteristics”. *SAE Paper 2002-01-2830*, (2002).
- [68] H. Yamada., Y. Goto. et A. Tezaki. “Analysis of Reaction Mechanisms Controlling Cool and Thermal Flame with DME Fueled HCCI Engines”. *SAE Paper 2006-01-3299*, (2006).
- [69] J. Nygren., J. Hult., M. Richter., M. Aldén., M. Christensen., A. Hultqvist. et B. Johansson. “Three-dimensional laser induced fluorescence of fuel distribution in an HCCI engine”. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29:679- 685, (2002).
- [70] N. Iida. et T. Igarashi. “Auto-ignition and Combustion of n-butane and DME/Air Mixtures in a Homogeneous Charge Compression Ignition Engine”. *SAE paper 2000-01-1832*. (2000).
- [71] Y. Yamasaki. et N. Iida. “Numerical simulation of auto-ignition and combustion of n-butane and air mixtures in a 4-stroke HCCI engine by using elementary reactions”. *SAE paper 2003-01-1834*. (2000).
- [72] K. Epping., S. M. Aceves., R. Bechtold. et J.E. “The potential of HCCI combustion for High Efficiency and Low Emissions”. *SAE paper 2002-01-1923*. (Dec 2007).
- [73] M. Sjöberg. et J.E. “Combined effects of fuel-type and engine speed on intake temperature requirements and completeness of bulk-gas reactions for HCCI combustion”. *SAE paper 2003-01-3173*. (Dec 2003).
- [74] X.C.Lu., W.Chen. et Z.Huang. “A fundamental study on the control of the HCCI combustion and emissions by fuel design concept combined with controllable EGR. Part2. Effect of operating conditions and EGR on HCCI combustion, Fuel”. Vol. 84, issue 9, pp. 1084-1092. (2005).

- [75] S. Tanaka., F. Ayala. et J. C Keck. "A reduced chemical kinetic model for HCCI combustion of primary reference fuels in a rapid compression machine". *Combustion and Flame*, 133:467-481, 2003. (2003).
- [76] E. Ranzi., P. Gaffuri., T. Faravelli. et P. Dagaut. "A Wide-Range Modeling Study of n-Heptane Oxidation". *Combustion and Flame*, 103:91-106, 1995. (1995).
- [77] M. Mehl., W. J. Pitz., M. Sjöberg. et , J. E. "Detailed Kinetic Modeling of Low-Temperature Heat Release for PRF Fuels in an HCCI Engine". SAE Paper 2009-01-1806, (Dec 2009).
- [78] M S Motor Service International GmbH · 41540 Dormagen · Germany KOLBENSCHMIDT PIERBURG GROUP. [www.ms-motor-service.com](http://www.ms-motor-service.com).
- [79] A. Maiboom., X. Tauzia. et J.F. Hetet. "Experimental study of various effects of exhaust gas recirculation (EGR) on combustion and emissions of an automotive Energy". 2008. 33(1): p. 22-34. (2008).
- [80] N. Ladommatos. "The dilution, chemical, and thermal effects of exhaust gas recirculation on diesel engine emissions". Part 2: Effects. *Fuel and Energy Abstracts*, 1997. 38(3): p. 186-186. (1997).
- [81] Catherine. Gruselle. "Etude du développement d'une flamme soumise à un gradient de concentration : Rôle de la stratification et des EGR". Ph.D. INSA de Rouen, 2014. France . (2014).
- [82] D. Agarwal., S. Sinha. et A.K. Agarwal. "Experimental investigation of control of NOx emissions in biodiesel-fueled compression ignition engine". *Renewable Energy*, 2006. 31(14): p. 2356-2369. (2006).
- [83] H. E. Saleh. "Effect of variation in LPG composition on emissions and performance in a dual fuel diesel engine. *Fuel*". 2008. 87(13): p. 3031-3039.(2008).
- [84] S. B. Fiveland. et D. Assanis. "A Four Stroke Homogenous Charge Compression Ignition Engine Simulation for Combustion and Performance Studies". SAE paper 2000-01- 0332. (2000).
- [85] M. Zheng. "Biodiesel engine performance and emissions in low temperature combustion. *Fuel*". 2008. 87(6): p. 714-722.(2008).
- [86] F. Swartling. "Gaz flow observer for diesel engineswith EGR". (2005).
- [87] M. Zheng., G. T. Reader. et J.G. Hawley. "Diesel engine exhaust gas recirculation- -a review on advanced and novel concepts". *Energy Conversion and Management*, 2004. 45(6): p. 883-900.(2004).

- [88] W. Ying. et Z. Longbao. “Experimental study on exhaust emissions from a multicylinder DME engine operating with EGR and oxidation catalyst”. *Applied Thermal Engineering*, 2008. 28(13): p. 1589-1595. (2008).
- [89] O. Armas., J. J. Hernandez. et M. D. Cardenas. “Reduction of diesel smoke opacity from vegetable oil methyl esters during transient operation”. *Fuel*, 2006. 85(17): p. 2427-2438. (2006).
- [90] R. Chen. et N. Milovanovic. “A computational study into the effect of exhaust gas recycling on homogeneous charge compression ignition combustion in internal combustion engines fuelled with methane”. *International journal of thermal sciences*, vol. 41, issue 9, pp. 805-813. (2002).
- [91] W. Sahashi., A. Azetsu et C. Oikawa. “effects of N<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> addition on ignition and combustion in homogeneous charge compression ignition engine operated on dimethyl ether, the sixth international symposium on diagnostics and modeling of combustion in internal combustion engines”. *comoda, Japan*. (2004).
- [92] T. Le Cong. “Etude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion de combustibles gazeux: Méthane, gaz naturel et mélanges contenant de l’hydrogène, du monoxyde de carbone, du dioxyde de carbone et de l’eau”. Ph.D. université d’Orléans, France, (2007).
- [93] G. Moréac., P. Dagaut., J. F. Roesler. et M. Cathonnet. “Impact of Trace NO and other residual burnt gas components from piston engines on the oxidation of various hydrocarbons in a jet stirred reactor at atmospheric pressure”. *Proc. 2<sup>nd</sup> Symp. (Med.) on Combust. The Combustion Institute*, 2, 240-251.
- [94] G. Subramanian., R. Bounaceur., A. Pires Da Cruz. et L. Vervisch. “Chemical impact of CO and H<sub>2</sub> addition on the auto-ignition delay of homogeneous n-heptane/air mixtures”. *Combust. Sci. Technol.* 197, 1937-1962. 2007. (2007).
- [95] H. Machrafi., S. Cavadias. et P. Guibert. “An experimental and numerical investigation on the influence of external gas recirculation on the HCCI autoignition process in an engine: Thermal, diluting, and chemical effects”. *Combust. Flame*, 155,476-489. (2008).
- [96] S. Sato., Y. Yamasaki., H. Kawamura. et N. Iida. “Research on the Influence on Natural Gas HCCI Combustion of Hydrogen and Carbon Monoxide”. *The Sixth International Symposium on Diagnostics and Modeling of Combustion in Internal Combustion Engines, COMODIA, Japan*. (2004).
- [97] T. Shudo., Y. Ono. et T. Takahashi. “Influence of Hydrogen and Carbon Monoxide on HCCI Combustion of Dimethyl Ether”. *SAE paper 2002-01-2828*. (2002).

- [98] G. Moreac. "Etude expérimentale et Modélisation des interactions chimiques entre gaz résiduels et gaz frais dans l'allumage spontané homogène des moteurs à essence,". Ph.D. dissertation, Université d'Orléans, France. (2003).
- [99] A. Dubreuil., F. Foucher. et C. Mounaïm-Rouselle. "Effect of EGR Chemical Components and Intake Temperature on HCCI Combustion Development". SAE Paper, 2006-32-0044, 2006. DOI: [10.4271/2006-32-0044](https://doi.org/10.4271/2006-32-0044). (2006).
- [100] P. A. Glaude., N. Marinov., Y. Koshiishi., N. Matsunaga. et M. Hori. "Kinetic modeling of the mutual oxidation of NO and larger alkenes at low temperature,". Energy & Fuel, vol.19 pp 1839-1849, (2005).
- [101] A. Dubreuil., F. Foucher., C. Mounaïm-Rouselle., G. Dayma. et P. Dagaut. "HCCI combustion : Effet of NO in EGR". Proc. Combust. Inst. Vol. 31, pp. 2879-2886. (2007).
- [102] S.K Prabhu., H. Li., D. L Miller. et N. P. Cernansky. "The effect of Nitric Oxide on Auto ignition of a Primary Reference Fuel Blend in a Motored Engine". SAE paper 932757. (1993).
- [103] P. U Ricklin., A. Kazakov., F.L. Dryer., S.C. Kong. et R.D. Reitz. "The Effect of NOx Addition on the Auto Ignition Behavior of Naturel Gas under HCCI combustion". SAE paper 2002-01-1746. (2002).
- [104] M. Kono., Z. Chen. et K. Miki. "Computational and experimental study on the influence of formaldehyde on HCCI combustion fueled with dimethyl ether". SAE paper 2003-01-1826. (2003).
- [105] H. Liu., Z. Zheng., M. Yaoa., P. Zhang., Z. Zheng., B.Hea. et Y. Qi. "Influence of temperature and mixture stratification on HCCI combustion using chemiluminescence images and CFD analysis". Appl. Therm. Eng. 33e34 (2012) 135e143. (2012).
- [106] L. Zhou., M.-Z. Xie. et K.H. Luo. "Numerical study of heat transfer and combustion in IC engine with a porous media piston region". Appl. Therm. Eng. 65 (1e2) (2014) 597e604. (2014).
- [107] A. Aziz. Hairuddin. "Effect of different heat transfer models on a diesel homogenous charge compression ignition engine". International Journal of Automotive and Mechanical Engineering (IJAME). Volume 8, pp. 1292-1304, July-December 2013. University Malaysia Pahang. DOI: <http://dx.doi.org/10.15282/ijame.8.2013.18.0106> (2013).
- [108] Étienne. Parizot. "Thermodynamique et gaz parfaits". Université Paris.

- [109] F. A. Williams. "Combustion Theory. Perseus Books, Reading, Massachusetts". 2nd edition, 1985. Cité p. 18, 165, 191. (1985).
- [110] V. Giovangigli. "Multicomponent Flow Modeling". Birkhäuser Boston, 1999. Cité p. 18, 19, 22, 23, 80, 86, 156, 167, 168. (1999).
- [111] T. Poinso et D. Veynante. "Theoretical and Numerical Combustion". Edwards, 2nd edition, 2005. Cité p. 18, 21, 77, 78, 165, 168. (2005).
- [112] M. Olivier. CABRIT. "Modalisation des flux pariétaux sur les tuyères des moteurs à propergol solide". Université Montpellier II. (2009).
- [113] Catherine. Gruselle. "Etude du développement d'une flamme soumise à un gradient de concentration. Rôle de la stratification et des EGR". Ph. D. Thèse, Institut National des Sciences Appliquées de Rouen. France, (2014).
- [114] Amir. MZE. AHMED. "Étude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion d'alcanes lourds, de kérosènes reformulés et de carburants modèles – Formation de polluants". Ph. D. Thèse, Université d'Orléans, (2011).
- [115] Casimir. TOGBE. "Etude cinétique de l'oxydation de constituants de biocarburants et composés modèles – Formation de polluants". Ph. D. Thèse, Université d'Orléans, (2010).
- [116] S. Gordon. et B. J. McBride. "Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks and Chapman-Jouguet detonations". Technical report, NASA Report SP 273, (1971).
- [117] C. Muller., V. Michel., G. Scacchi. et G. M. "Come THERGAS: A computer program for the evaluation of thermochemical data molecules and free radicals in the gas phase". Journal de Chimie physique et Physico-Chimie Biologique, 1995, vol 92, pp. 1154-1178. (1995).
- [118] Aurélie. PIPEREL. "Impact des propriétés des gaz d'échappement recyclés sur l'initiation et le déroulement de la combustion, caractérisation paramétrique de la réactivité de l'EGR, ". Ph.D. dissertation, Dept. CNRS., Orléans Univ., France, (2008).
- [119] G. Kalghatgi., P. Risberg. et H.E. Angstrom. "Advantage of fuels with high resistance to Auto-ignition in late-injection, low-temperature, compression ignition combustion". SAE paper, 2006-01-3385, 2006. DOI: [10.4271/2006-01-3385](https://doi.org/10.4271/2006-01-3385). (2006).

- [120] J.P. Szybist. et B.G. Bunting. “Cetane number and engine speed effect on diesel HCCI performance and emission,”. SAE paper, 2005-01-3723, 2005. DOI: [10.4271/2005-01-3723](https://doi.org/10.4271/2005-01-3723). (2005).



# ANNEXE

---

## A.1 INTRODUCTION

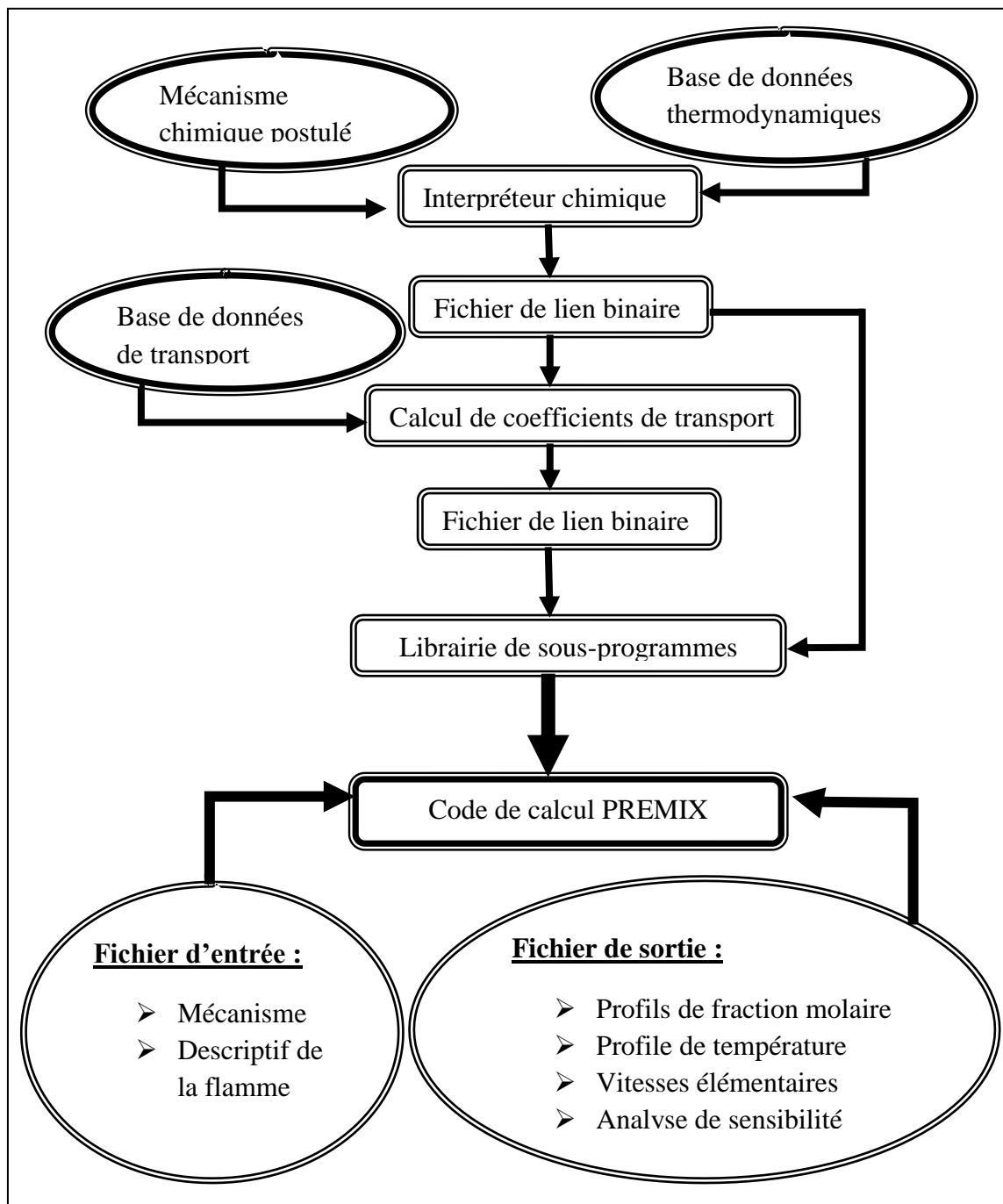
Le code CHEMKIN est le code de calcul le plus utilisé dans la combustion. Il est constitué d'une bibliothèque de programmes de calculs cinétiques en phase gazeuse et de divers utilitaires écrits en langage Fortran. La structure originale de CHEMKIN permet à l'utilisateur, à partir de la reformulation de n'importe quel problème de cinétique en phase gazeuse décrit par un système d'équations et par un mécanisme réactionnel, de développer son propre code de calcul en faisant appel aux divers sous programmes et utilitaires disponibles.

## A.2 Structure du CHEMKIN

CHEMKIN est composé de quatre parties très importantes :

- l'interpréteur.
- les bases de données thermodynamiques et de transport.
- les fichiers liens.
- la bibliothèque de sous-programmes de calculs cinétiques en phase gazeuse.

*La figure. A.1.* illustre l'organigramme simplifié de fonctionnement des codes CHEMKIN.



**Figure. A.1** : Schéma représente la structure du CHEMKIN.

### A.2.1 L'interpréteur.

L'interpréteur a pour rôle de lire et d'interpréter en langage fortran le mécanisme chimique détaillé postulé contenant les éléments chimiques, les espèces, les réactions et les paramètres d'Arrhenius.

L'interpréteur extrait d'une base de données thermodynamiques les propriétés  $C_{pk}^0$ ,  $H_{pk}^0$  et  $S_{pk}^0$  des espèces mises en jeu dans le mécanisme. Les propriétés sont alors stockées dans un fichier lien binaire.

Les informations contenues dans les fichiers liens et n'importe quels programmes de la bibliothèque de CHEMKIN peuvent être appelées et utilisées par les codes de calcul propres à l'utilisateur.

### A.2.2 Les données thermodynamiques

La base de données thermodynamiques reconstitue pour chaque espèce. Il y a 14 coefficients polynômiaux ( $a_i$ ) permettant le calcul des grandeurs thermodynamiques dans deux domaines de température (300-1000 °K et 1000-5000 °K). Ces grandeurs (chaleur spécifique, enthalpie et entropie des espèces) sont exprimées sous forme de polynômes comme sui :

$$1- \text{ La chaleur spécifique : } \frac{C_{pk}^0}{R} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 \quad (\text{A.1})$$

$$2- \text{ L'enthalpie : } \frac{H_k^0}{R} = a_1T + \frac{a_2}{2}T^2 + \frac{a_3}{3}T^3 + \frac{a_4}{4}T^4 + \frac{a_5}{5}T^5 + a_6 \quad (\text{A.2})$$

$$3- \text{ L'entropie : } \frac{S_k^0}{R} = a_1 \ln T + a_2T + a_3 \frac{T^2}{2} + a_4 \frac{T^3}{3} + a_5 \frac{T^4}{4} + a_7 \quad (\text{A.3})$$

Les autres propriétés thermodynamiques se calculent facilement en termes de  $C_p^0$ , de  $H^0$  et de  $S^0$ . La chaleur spécifique à volume constant se calcule par la relation de Meyer :

$$C_v = C_p - R \quad (\text{A.4})$$

L'énergie interne  $U^0$  est donnée par la relation suivante :

$$U^0 = H^0 - RT \quad (\text{A.5})$$

L'enthalpie libre standard de Gibbs,  $G^0$  s'écrit sous la forme suivante :

$$G^0 = H^0 - TS \quad (\text{A.6})$$

L'énergie libre standard de Helmholtz est définie par l'équation suivante :

$$A^0 = U^0 - TS^0 \quad (\text{A.7})$$

On constate donc que les données thermodynamiques d'une espèce sont parfaitement définies à partir des 14 coefficients  $a_{ik}$  ( $i = 1 \dots 14$ ), avec 7 coefficients pour un domaine de basses températures et 7 autres coefficients pour un domaine des hautes températures.

La base de données fournit les noms des espèces, leur composition élémentaire, leur charge électronique, une indication de leur phase (gaz, liquide ou solide) et les domaines de validité des interpolations en température.

### A.2.3 Exemples:

THERMO

300.000 1000.000 5000.000

! GRI-Mech Version 3.0 Thermodynamics released 7/30/99

! NASA Polynomial format for CHEMKIN-II

! see README file for disclaimer

O	L 1/90O 1	G 200.000 3500.000 1000.000	1
	2.56942078E+00-8.59741137E-05 4.19484589E-08-1.00177799E-11 1.22833691E-15		2
	2.92175791E+04 4.78433864E+00 3.16826710E+00-3.27931884E-03 6.64306396E-06		3
	-6.12806624E-09 2.11265971E-12 2.91222592E+04 2.05193346E+00		4
O2	TPIS89O 2	G 200.000 3500.000 1000.000	1
	3.28253784E+00 1.48308754E-03-7.57966669E-07 2.09470555E-10-2.16717794E-14		2
	-1.08845772E+03 5.45323129E+00 3.78245636E+00-2.99673416E-03 9.84730201E-06		3
	-9.68129509E-09 3.24372837E-12-1.06394356E+03 3.65767573E+00		4

H	L 7/88H 1	G 200.000 3500.000 1000.000	1
	2.50000001E+00-2.30842973E-11 1.61561948E-14-4.73515235E-18 4.98197357E-22		2
	2.54736599E+04-4.46682914E-01 2.50000000E+00 7.05332819E-13-1.99591964E-15		3
	2.30081632E-18-9.27732332E-22 2.54736599E+04-4.46682853E-01		4
H2	TPIS78H 2	G 200.000 3500.000 1000.000	1
	3.33727920E+00-4.94024731E-05 4.99456778E-07-1.79566394E-10 2.00255376E-14		2
	-9.50158922E+02-3.20502331E+00 2.34433112E+00 7.98052075E-03-1.94781510E-05		3
	2.01572094E-08-7.37611761E-12-9.17935173E+02 6.83010238E-01		4
OH	RUS 78O 1H 1	G 200.000 3500.000 1000.000	1
	3.09288767E+00 5.48429716E-04 1.26505228E-07-8.79461556E-11 1.17412376E-14		2
	3.85865700E+03 4.47669610E+00 3.99201543E+00-2.40131752E-03 4.61793841E-06		3
	-3.88113333E-09 1.36411470E-12 3.61508056E+03-1.03925458E-01		4
H2O	L 8/89H 2O 1	G 200.000 3500.000 1000.000	1
	3.03399249E+00 2.17691804E-03-1.64072518E-07-9.70419870E-11 1.68200992E-14		2
	-3.00042971E+04 4.96677010E+00 4.19864056E+00-2.03643410E-03 6.52040211E-06		3
	-5.48797062E-09 1.77197817E-12-3.02937267E+04-8.49032208E-01		4

### A.3.4 Nomenclature utilisée dans cet exemple :

1ère ligne : Nom de l'espèce, symbole atomique ou formule d'un élément chimique, nombre des atomes, phase (S) solide, (L) liquide ou (G) gazeuse), limites des intervalles de température : respectivement limite inférieure, supérieure et intermédiaire.

2ème ligne : les coefficients  $a_1 - a_5$  pour les hautes températures.

3ème ligne : les coefficients  $a_6$  et  $a_7$  pour les hautes températures ; les Coefficients  $a_1$ ,  $a_2$  et  $a_3$  pour les basses températures.

4ème ligne : les coefficients  $a_4$ ,  $a_5$ ,  $a_6$  et  $a_7$  pour les basses températures.

### A.3.5 Le fichier INPUT

Le fichier INPUT permet de spécifier les éléments de calcul à utiliser.

Ce fichier, comme tous les fichiers correspondants a des données d'entrée, doit suivre une structure parfaitement définie et répondre à une syntaxe bien précise.

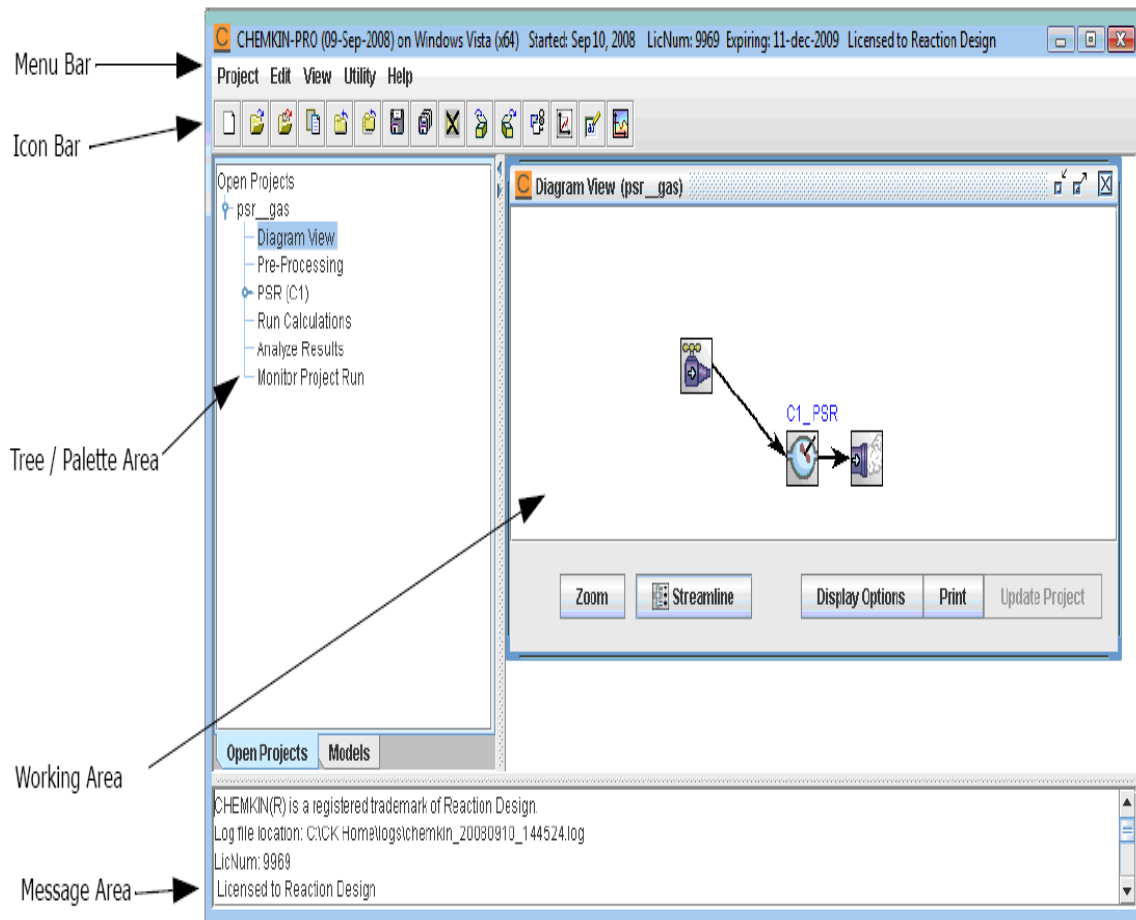
### A.4 Comment en travaillant avec le programme CHEMKIN ?

Quand, le programme CHEMKIN est lancé, la première étape qui était commencé est le projet « psr\_gas ». Puis, chaque ouverture du CHEMKIN accompagne automatiquement l'ouverture du dernier projet actif.

Le travail initial est composé de cinq domaines :

- 1- « Menu Bar » est composé de (project, edit, view, utility et help).
- 2- « Icon Bar » trouvé directement au dessous de la première barre, il permet d'accès les options du programme.
- 3- « Tree/Palette Area » trouvé à la coté gauche de l'écran, il contient 'Open Projets Tree' et 'Models Palette'.
- 4- « Working Area » trouvé à la coté droite de l'écran ; il basé sur la sélection du 'Open Projets Tree'.
- 5- « Message Area » trouvé en bas de l'écran, il contient les conditions des erreurs.

La figure ci-dessous présente le premier lancement du logiciel CHEMKIN après leur installation. Ce schéma là contient les clefs essentielles pour faire un travail par l'utilisation du CHEMKIN.










**Figure. A.2** : Schéma représente les clés nécessaires pour commencer un travail à l'aide du logiciel CHEMKIN.



#### A.4.1 Menu et les icônes des barres

Les éléments suivants (*Project*, *Edit*, *View*, *Utility* et *Help*) fournissent plusieurs options. *Les tableaux A.1 jusqu'au A.6* présente une courte description d'utilisation les icônes.




**Tableau A.1**

icône	Article	Description
	New	Crier un nouveau projet
	Open	Ouvrir un dossier déjà existé
	Import	Permettre d'importer des dossiers
	Close	Fermeture d'un projet sélectionné
	Close all	Fermeture de tous les projets ouverts et associer les panneaux du projet. Si certain projet a été changé, l'utilisateur doit être sauve gardé le projet.
	Save	Sauve gardé le projet sélectionné.
	Save as	Sauve gardé le projet sélectionné avec un nouveau nom.
	Save all	Sauve gardé tous les projets ouverts.


**Tableau A.2**

Icône	Article	Description
	Archive....	Assemblé tous les fichiers pour un projet sélecté.
	Unarchive...	extraire ou arracher tous les fichiers d'archive.
	exit	Sortir du programme. L'utilisateur sauve gardé les projets qui sont changés.

**Tableau A.3**

Icône	Article	Description
	Préférences....	Ouverture les préférences panneaux.
	Profiles...	Ouverture les profils.
	File Editor...	Lancer le profil.



**Tableau A.4**

Icône	Article	Description
	Grafical post- processor....	Lancer les graphes.

**Tableau A.5**

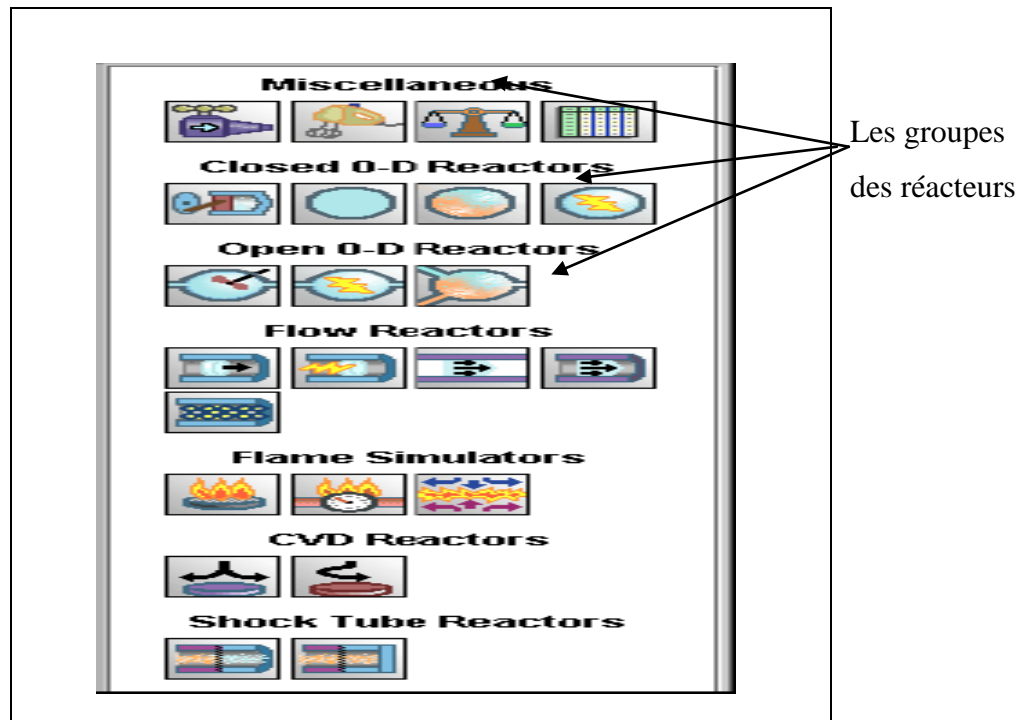
Article	Description
Run Chemistry Set Pre-processor	Permet d'utiliser le processus chimique situé indépendant de n'importe quel projet.
Run Upgrade Solution Utility	Amélioration des solutions
Run Export Solution Utility	Permettre d'afficher les solutions

**Tableau A.6**

Icône	Article	Description
	Help....	Ouverture les pages qui sont donnent des informations sur l'utilisation du programme.
	About CHEMKEN...	Cette icône pour démarrer ou lancer le programme CHEMKEN.

#### A.4.2 Ouverture d'un projet

Pour ouvrir un nouveau projet, il faut connaître d'abord la nomination et l'utilisation de chaque icône de les listes qui sont illustrées dans *les figures A.3 et A.4*.



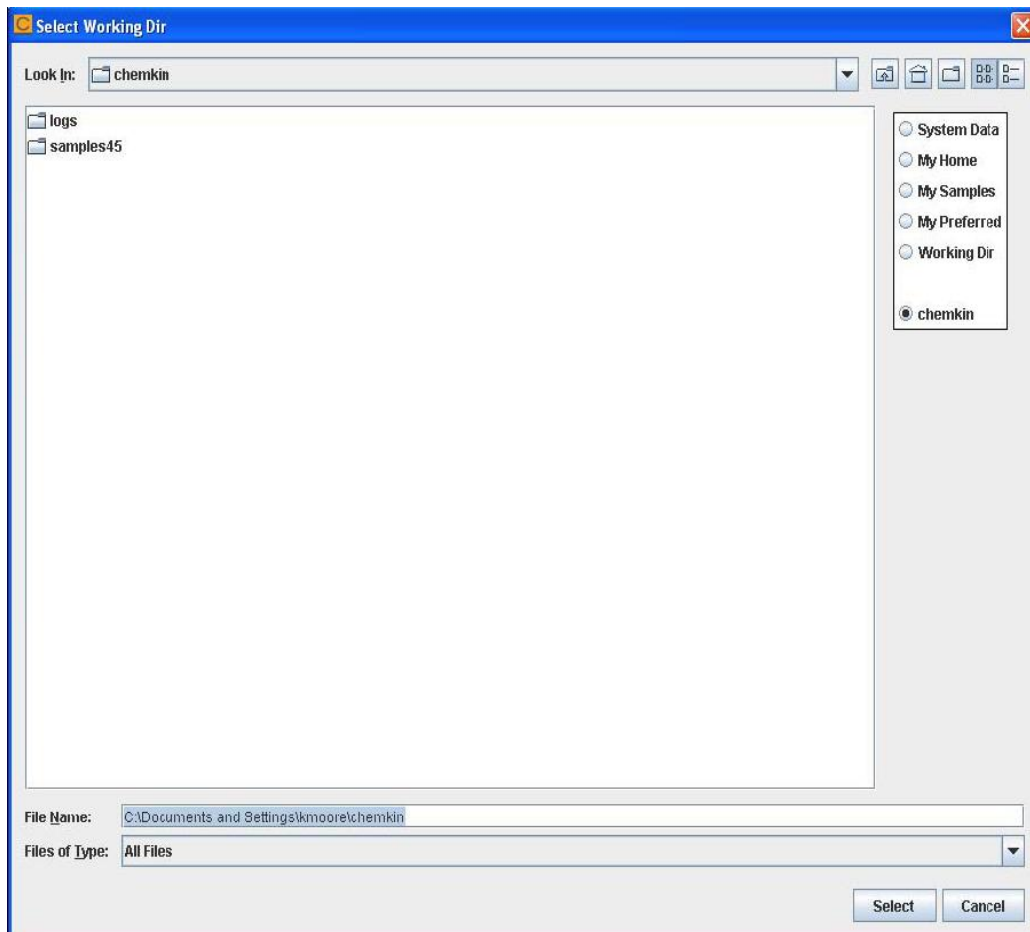
**Figure. A.3 :** Les types des réacteurs.

Liste des réacteurs utilisés dans des applications des problèmes spécifiques.

	Non-reactive Gas Mixer		Honeycomb Plug Flow Reactor
	Chemical and Phase Equilibrium Calculations		Plasma Plug Flow Reactor
	Mechanism Analyzer		Planar Shear Flow Reactor
	Closed Internal Combustion Engine Simulator		Cylindrical Shear Flow Reactor
	Closed Homogeneous Batch Reactor		Premixed Laminar Burner-stabilized Flame
	Closed Partially Stirred Reactor		Premixed Laminar Flame-speed Calculation
	Closed Plasma Reactor		Diffusion or Premixed Opposed-flow Flame
	Perfectly Stirred Reactor (PSR)		Stagnation Flow CVD Reactor
	Plasma PSR		Rotating Disk CVD Reactor
	Partially Stirred Reactor (PaSR)		Normal Incident Shock
	Plug Flow Reactor		

**Figure. A.4 :** Les modèles des réacteurs inclus.

Après le démarrage du programme CHEMKIN, on clique sur projet (*figure .2*) puis on clique sur (open), une fenêtre s'ouvre (*figure. A.5*), dans cette fenêtre on clique deux fois sur (samples) (*figure. A.5*) et on choisit le modèle de la simulation (notre problème moteur à combustion interne HCCI, l'utilisation du code PSR et fonctionner un moteur HCCI avec EGR).



**Figure. A.5** : Schéma représente le répertoire de la sélection d'un code de calcul.

On sélectionne les hypothèses du transfert de chaleur (adiabatique ou non, si on travail avec les codes de calcul moteur HCCI, HCCI avec EGR et aussi si on travail avec le code de calcul PSR). Pour compléter ce projet en suivant les étapes suivantes :

1- On clique deux fois sur le bouton (**Pre-Processing**) (*figure A.6*) qui l'on passe au panneau (Pre-processing) (*figure .A.7*).

2- Au panneau (Pre-processing), on sélectionne les différents mécanismes réactionnels (donnés thermodynamiques et cinétique chimique) puis, on clique sur le bouton (**Run Pre-Processor**), après cette étape on vérifie les erreurs par l'appuie sur (vieu results).

3- Fermeture du panneau (Pre-processing) et on entre tous les donnés initiales de notre problème.

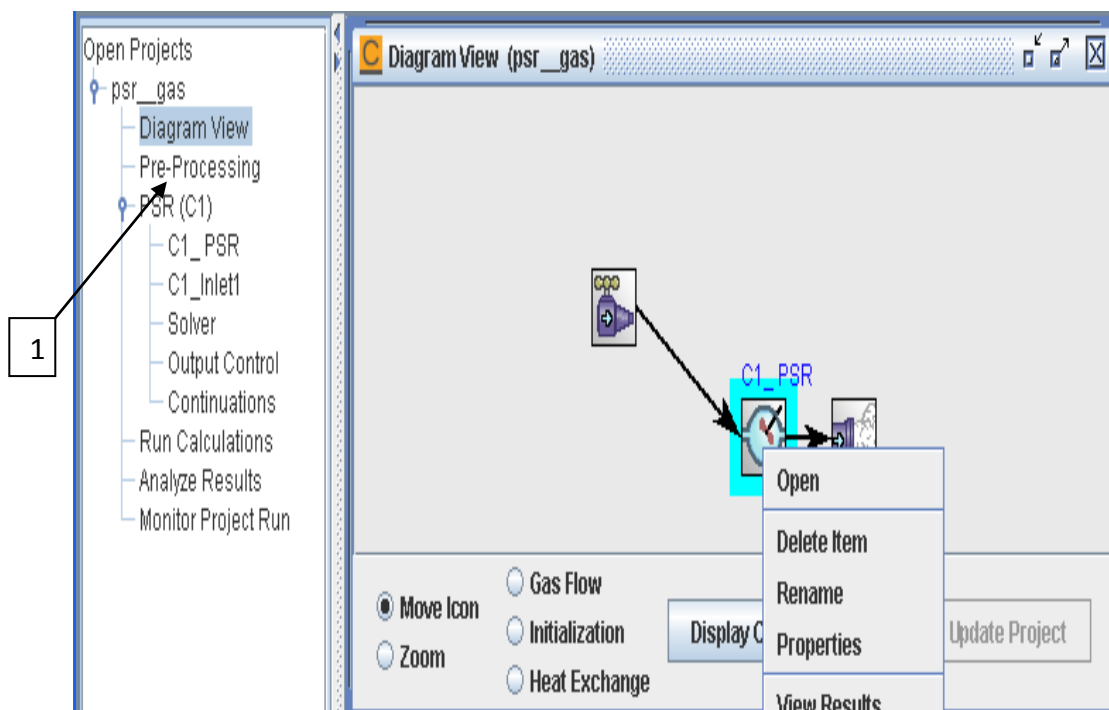
4- On clique deux fois sur le bouton (**Run Model**) (*figure : A.8*) ; le schéma de la figure A.11 est représenté ; dans cette schéma on suivi le démarche suivant pour obtenir les résultats :

1 D'abord, on clique sur le bouton (**Create Input File**).

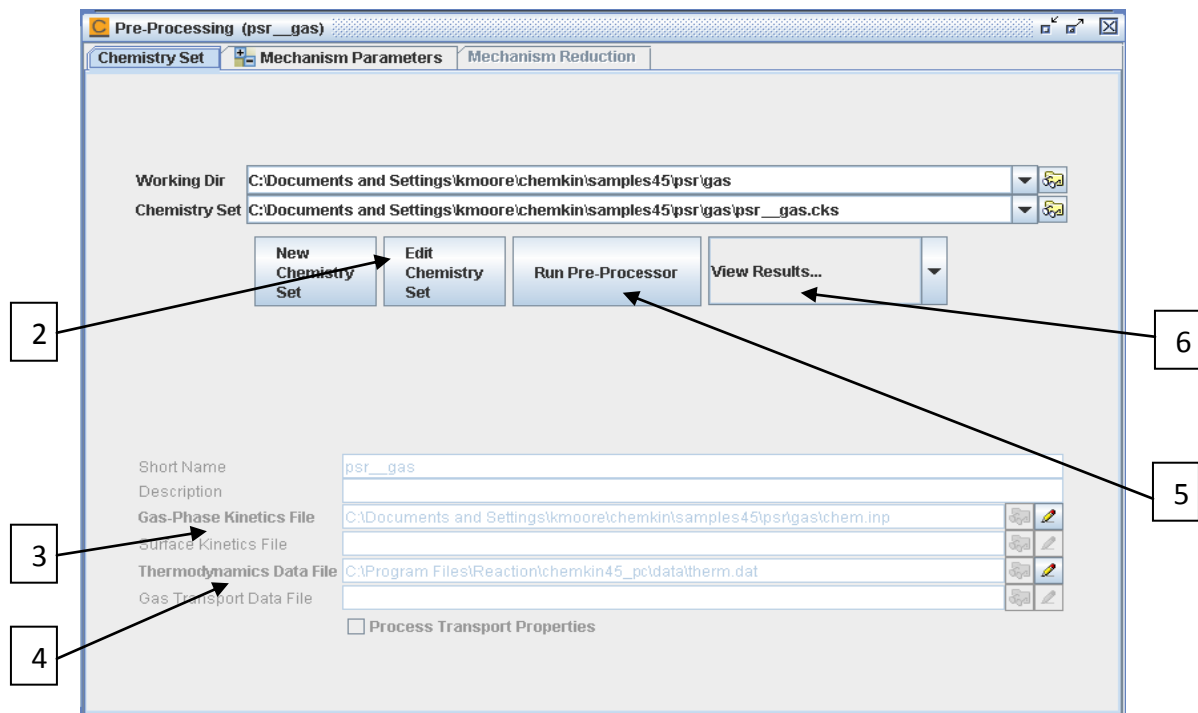
2 Ensuite, on clique sur le bouton (**Run Model**).

3 Finalement, on clique sur le bouton (**Run Post Processor**) et on laisse le simulateur de traiter le problème et de nous donne les résultats qui nous les cherchent.

Ces étapes sont montrées sur les schémas suivants :



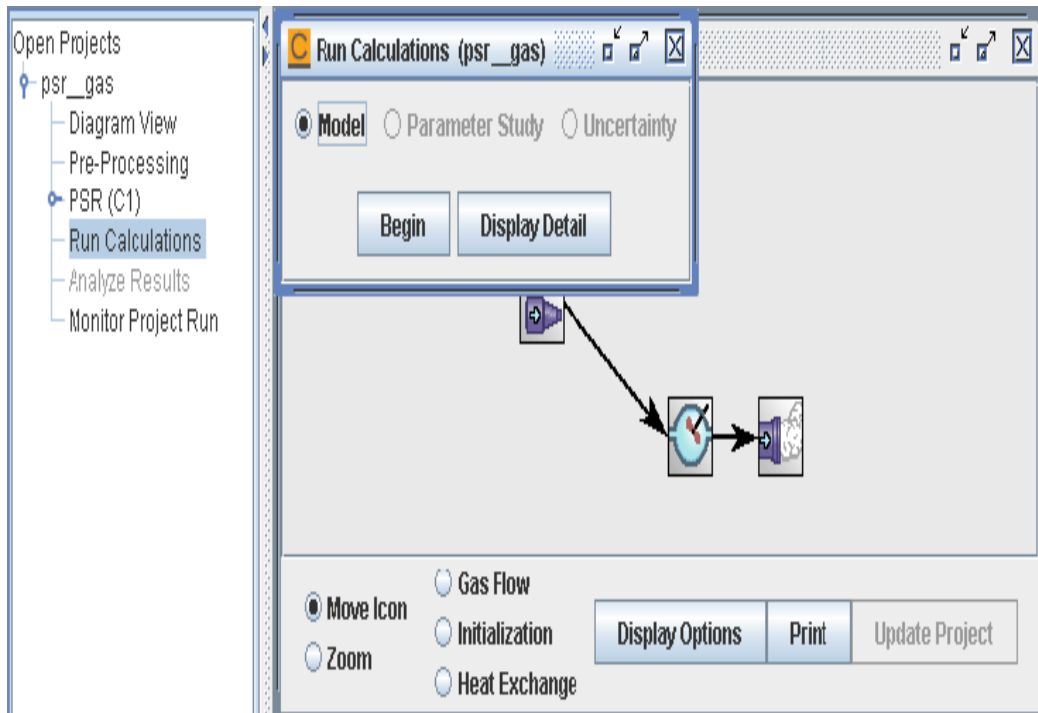
**Figure. A.6** : Ce schéma permet de passer au schéma A.7.



**Figure. A.7 :** Schéma représente les paramètres du couplage CHEMKIN avec les mécanismes réactionnels.

- 1 Pour passer au schéma A.7 on clique sur ce bouton (*figure. A.8*).
- 2 On clique sur ce bouton pour choisir le mécanisme réactionnel et les données thermodynamiques.
- 3 On couple le fichier du schéma cinétique avec le programme de calcul.
- 4 On couple le fichier des données thermodynamiques avec le programme de calcul.
- 5 On clique sur ce bouton et on laisse le simulateur pour faire le couplage.
- 6 On clique sur ce bouton pour vérifier les erreurs du couplage.

Après la vérification des erreurs, on passe maintenant pour entrer tous les données initiales et on laisse le simulateur de résoudre le problème par le clique sur le bouton (Run Calculations) (voir le schéma ce dessous).



**Figure. A.8 :** Schéma représente les paramètres du couplage CHEMKIN avec les mécanismes réactionnels.

## A.5 Conclusion

On a résumé les étapes de fonctionnement du logiciel CHEMKIN de façon globale mais si quelqu'un peut travailler avec ce logiciel il faut tout simplement installer le logiciel et après le lancement il trouvera une documentation qui est lié à ce logiciel. Dans ce document vous trouverez des explications et des guides pour travailler facilement avec ce logiciel.

