

THESE

présentée devant

L'ECOLE CENTRALE DE LYON

Ecole Doctorale : M.E.G.A.

pour obtenir

le titre de **Docteur**

Spécialité : **Thermique et Energétique**

par **Catherine ALIGROT**

Ingénieur I.N.S.A.

ETUDE EXPERIMENTALE ET THEORIQUE DU DELAI D'AUTO-INFLAMMATION DE DIFFERENTS CARBURANTS DANS UNE CHAMBRE DE COMBUSTION A VOLUME CONSTANT

Soutenue le 24 février 1994 devant la Commission d'Examen

**Jury MM. C. HOANG VAN (Président)
J. C. CHAMPOUSSIN
G. CLAUS
F. FISSON
J. C. GUIBET
K. SAHETCHIAN**

THESE

présentée devant

L'ECOLE CENTRALE DE LYON

Ecole Doctorale : M.E.G.A.

pour obtenir

le titre de **Docteur**

Spécialité : **Thermique et Energétique**

par **Catherine ALIGROT**

Ingénieur I.N.S.A.

ETUDE EXPERIMENTALE ET THEORIQUE DU DELAI D'AUTO-INFLAMMATION DE DIFFERENTS CARBURANTS DANS UNE CHAMBRE DE COMBUSTION A VOLUME CONSTANT

Soutenue le 24 février 1994 devant la Commission d'Examen

**Jury MM. C. HOANG VAN (Président)
J. C. CHAMPOUSSIN
G. CLAUS
F. FISSON
J. C. GUBET
K. SAHETCHIAN**

ECOLE CENTRALE DE LYON

LISTE DES PERSONNES HABILITEES A ENCADRER DES THESES

A. du 30.03.82 Art. 21 et A. du 23.11.88

Directeur : Jacques BORDET
 Directeur Adjoint : Etienne PASCAUD
 Directeur des Etudes : Jean ROZINOER
 Directeur Administration de la Recherche : Francis LEBOEUF

DEPARTEMENT	NOM-PRENOM	FONCTION	
ACOUSTIQUE	COMTE-BELLOT Geneviève JUVE Daniel	PROFESSEUR ---	
	GALLAND Marie-Annick ROGER Michel	MAITRE DE CONFERENCES ---	
	BLANC-BENON Philippe SUNYACH Michel	CHARGE DE RECHERCHE CNRS PORFESSEUR IUT LYON I	
ELECTRONIQUE	BLANCHET Robert LE HELLEY Michel	PROFESSEUR ---	
	HELLOUIN Yves	MAITRE DE CONFERENCES	
	VIKTOROVITCH Pierre	DIRECTEUR DE RECHERCHE CNRS	
	HOLLINGER Guy	---	
	GENDRY Michel	CHARGE DE RECHERCHE CNRS	
	KRAWCZYK Stanislas TARDY Jacques	---	
ELECTROTECHNIQUE	AURIOL Philippe NICOLAS Alain	PROFESSEUR ---	
	BEROUAL Abderahman ROJAT Gérard	MAITRE DE CONFERENCES ---	
MACHINES THERMIQUES	ARQUES Philippe BRUN Maurice CHAMPOUSSIN Jean-Claude	PROFESSEUR --- ---	
	MATERIAUX MECANIQUE PHYSIQUE	GUIRALDENQ Pierre TREHEUX Daniel VANNES Bernard VINCENT Léo	PROFESSEUR --- --- ---
		BLANC-BENON Jean BRUGIRARD Jean	PROFESSEUR LYON I ---
FAYEULLE Serge JUVE Denyse		CHARGE DE RECHERCHE CNRS INGENIEUR D'ETUDES	

<p>MATHEMATIQUES INFORMATIQUE SYSTEMES</p>	<p>DAVID Bertrand MARION Martine MOUSSAOUI Mohand Arezki MAITRE Jean-François THOMAS Gérard</p> <p>MUSY François ROZINOER Jean</p>	<p>- 2 -</p> <p>PROFESSEUR --- --- --- ---</p> <p>MAITRE DE CONFERENCES ---</p>
<p>MECANIQUE DES FLUIDES</p>	<p>MATHIEU Jean ALCARAZ Emilio JEANDEL Denis LEBOEUF Francis SCOTT Jean</p> <p>BATAILLE Jean GAY Bernard GENCE Jean-Noël LANCE Michel</p> <p>BEN HADID Hamda BUFFAT Marc HAMADICHE Mahmoud</p> <p>MOREL Robert</p> <p>CAMBON Claude</p> <p>BERTOGLIO Jean-Pierre ESCUDIE Dany FERRAND Pascal HENRY Daniel</p>	<p>PROFESSEUR EMERITE PROFESSEUR --- --- ---</p> <p>PROFESSEUR LYON I --- --- ---</p> <p>MAITRE DE CONFERENCES LYON I --- ---</p> <p>PROFESSEUR INSA</p> <p>DIRECTEUR DE RECHERCHE CNRS</p> <p>CHARGE DE RECHERCHE CNRS --- --- --- ---</p>
<p>MECANIQUE DES SOLIDES</p>	<p>CAMBOU Bernard JEZEQUEL Louis SIDOROFF François</p> <p>SURRY Claude</p>	<p>PROFESSEUR --- ---</p> <p>PROFESSEUR ENISE</p>
<p>PHYSICOCHIMIE DES INTERFACES</p>	<p>CLECHET Paul JOSEPH Jacques MARTELET Claude MARTIN Jean-René PORTE Louis</p> <p>ROBACH Yves STREMSDOERFER Guy</p> <p>JAFFREZIC Nicole</p> <p>SOUTEYRAND Elyane</p>	<p>PROFESSEUR --- --- --- ---</p> <p>MAITRE DE CONFERENCES ---</p> <p>DIRECTEUR DE RECHERCHE CNRS</p> <p>CHARGE DE RECHERCHE CNRS</p>

<p>PHOTACATALYSE</p>	<p>PICHAT Pierre HERRMANN Jean-Marie</p>	<p>- 3 - DIRECTEUR DE RECHERCHE CNRS - - -</p>
<p>TECHNOLOGIE DES SURFACES</p>	<p>GEORGES Jean-Marie SABOT Jean MARTIN Jean-Michel MATHIA Thomas KAPSA Philippe LOUBET Jean-Luc LE BOSSE Jean-Claude LOPEZ Jacques ROUSSEAU Jacques</p>	<p>PROFESSEUR - - - - - - DIRECTEUR DE RECHERCHE CNRS - - - CHARGE DE RECHERCHE CNRS MAITRE DE CONFERENCES INSA MAITRE DE CONFERENCES UCB PROFESSEUR ENISE</p>

*A mes parents,
pour le soutien qu'ils m'ont apporté tout
au long de ma scolarité*

Cette étude a été réalisée au Laboratoire de Machines Thermiques de l'Ecole Centrale de Lyon, sous la direction de Monsieur le Professeur J. C. CHAMPOUSSIN. Je le prie de bien vouloir trouver ici l'expression de ma reconnaissance pour l'aide qu'il m'a apportée et pour les conseils qu'il m'a prodigués tout au long de ce travail.

Je remercie Monsieur C. HOANG VAN, Directeur de Recherche C.N.R.S. au Laboratoire de Photocatalyse, Catalyse et Environnement de l'Ecole Centrale de Lyon, qui m'a fait l'honneur de bien vouloir accepter la présidence du Jury.

J'exprime également toute ma reconnaissance à Monsieur F. FISSON, Maître de Conférences à l'Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, pour l'attention qu'il a portée à la lecture de ce mémoire et pour avoir accepté de le juger et de participer au Jury.

Je tiens à remercier vivement Monsieur K. SAHETCHIAN, Directeur de Recherche C.N.R.S. à l'Université Pierre et Marie Curie (Paris VI), pour sa contribution à ce travail, pour avoir accepté d'en être un des rapporteurs ainsi que pour sa participation au Jury.

J'adresse mes remerciements les plus sincères à Monsieur G. CLAUS, Ingénieur au Centre de Recherche Elf de Solaize, pour sa collaboration tout au long de ce travail, ainsi que pour sa participation au Jury.

Monsieur J. C. GUIBET, Professeur à l'Ecole Nationale Supérieure du Pétrole et des Moteurs, a bien voulu m'honorer de sa participation au Jury. Qu'il trouve ici l'expression de ma profonde reconnaissance.

Mes remerciements vont également à Messieurs A. EFFERNELLI et B. GRANDJEAN, qui m'ont apporté leur contribution lors de la réalisation de la chambre de combustion à volume constant ainsi que lors des essais.

Je remercie Messieurs H. EMTIL et N. LEVY, pour leur collaboration lors des travaux réalisés à l'aide du code de calcul KIVA II.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Messieurs J. M. VIGNON, S. AMARA et M. SOCOLIUC pour les précieux conseils qu'ils m'ont donnés au cours de multiples discussions.

Je tiens enfin à remercier très sincèrement tous les membres du Laboratoire de Machines Thermiques de l'Ecole Centrale de Lyon. Ce travail n'aurait pu être mené à bien sans leur aide quotidienne toujours très amicale.

TABLE DES MATIERES

Notations	VII
Liste des figures	IX
Liste des tableaux	XIII
INTRODUCTION	1
PREMIERE PARTIE : ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE	5
CHAPITRE I : GENERALITES	7
I.1 - La combustion Diesel	7
I.2 - Le phénomène d'auto-inflammation	8
I.2.1 - Définitions	9
I.2.2 - Délai physique et délai chimique	10
I.2.3 - Différents types d'inflammation	11
I.2.4 - Paramètres influençant le délai d'auto-inflammation	12
CHAPITRE II : INFLUENCE DES PARAMETRES MOTEUR ET DES CARACTERISTIQUES DU CARBURANT SUR LE DELAI D'AUTO- INFLAMMATION	13
II.1 - Influence des paramètres moteur	13
II.1.1 - Influence des conditions de fonctionnement	13
II.1.1.1 - Température	14
II.1.1.2 - Pression	16
II.1.1.3 - Vitesse des gaz	17
II.1.1.4 - Concentration en oxygène	19
II.1.2 - Influence des conditions d'injection	20
II.1.2.1 - Atomisation des gouttes	20
II.1.2.2 - Distribution spatiale du gazole	21
II.1.2.3 - Distribution temporelle du gazole	21
II.1.2.4 - Quantité injectée	23
II.1.2.5 - Impact à la paroi	24
II.2 - Influence des caractéristiques du carburant	24
II.2.1 - Indice de cétane	24
II.2.1.1 - Définition	24

IV.1.2 - Dispositif de chauffage	55
IV.1.3 - Systèmes d'injection	55
IV.2 - Instrumentation	57
IV.3 - Procédure expérimentale et traitement des données	58
IV.3.1 - Mode opératoire	58
IV.3.2 - Traitement des données	59
CHAPITRE V : RESULTATS EXPERIMENTAUX	61
V.1 - Détermination du délai d'auto-inflammation	61
V.1.1 - Rappels	61
V.1.2 - Conditions expérimentales	62
V.1.3 - Résultats	62
V.1.4 - Conclusions	63
V.2 - Influence des conditions expérimentales	63
V.2.1 - Influence de la température régnant dans la chambre de combustion	64
V.2.2 - Influence de la pression régnant dans la chambre de combustion	70
V.2.3 - Influence des caractéristiques de l'injection	70
V.2.3.1 - Diamètre de l'injecteur	70
V.2.3.2 - Type d'injecteur	72
V.2.3.3 - Pression d'injection	74
V.3 - Influence des caractéristiques du carburant	76
V.3.1 - Caractéristiques des différents carburants testés	76
V.3.2 - Influence de l'indice de cétane	76
V.3.3 - Influence de la teneur en additif	76
V.3.4 - Influence de la nature des additifs	80
V.3.5 - Influence d'un même additif sur différents carburants	82
CONCLUSIONS DE LA DEUXIEME PARTIE	85
TROISIEME PARTIE : MODELISATION	87
CHAPITRE VI : DETERMINATION D'UNE LOI DE CORRELATION EN MILIEU HOMOGENE	89
VI.1 - Relation de Wolfer	89
VI.1.1 - Formulation	89
VI.1.2 - Identification des constantes	90
VI.1.3 - Comparaison avec les valeurs trouvées dans la littérature	94
VI.2 - Prise en considération de la nature du carburant	95
VI.2.1 - Choix des principales caractéristiques des carburants	96

VI.2.2 - Expression des coefficients de la relation de Wolfer en fonction des caractéristiques retenues	97
VI.2.3 - Identification des différentes constantes	100
VI.3 - Conclusions	102
CHAPITRE VII : MODELE CINETIQUE DU DELAI D'AUTO-INFLAMMATION DANS UN MILIEU HETEROGENE	107
VII.1 - Description des différents mécanismes considérés	108
VII.1.1 - Modèle de Westbrook	108
VII.1.2 - Modèle de Zellat	109
VII.1.3 - Modèle de Sahetchian	110
VII.2 - Comparaison entre les différents mécanismes	114
VII.2.1 - Expérimentation	115
VII.2.2 - Résultats numériques	115
VII.3 - Conclusions	118
CONCLUSIONS DE LA TROISIEME PARTIE	121
CONCLUSION GENERALE	123
BIBLIOGRAPHIE	129
ANNEXES	137
ANNEXE 1 :	
Définition du délai de dégagement de chaleur	139
ANNEXE 2 :	
Caractéristiques physico-chimiques moyennes d'un gazole commercial	143
ANNEXE 3 :	
Additifs pour gazole autres que les additifs procétane	145
ANNEXE 4 :	
Caractéristiques du dispositif expérimental	147
ANNEXE 5 :	
Instrumentation	149
ANNEXE 6 :	
Caractéristiques des carburants utilisés	151
ANNEXE 7 :	
Evolution du délai d'auto-inflammation des carburants utilisés en fonction de la température pour différentes pressions initiales	153

ANNEXE 8 :		
Méthode des moindres carrés pondérés		167
ANNEXE 9 :		
Intervalle de confiance des triplets (A, m, B) correspondant aux différents carburants utilisés		169
ANNEXE 10 :		
Evolution du délai d'auto-inflammation des carburants utilisés en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les délais mesurés expérimentalement et les délais calculés à l'aide de la loi de Wolfer (III.1)		173
ANNEXE 11 :		
Différentes lois empiriques testées		187
ANNEXE 12 :		
Evolution du délai d'auto-inflammation des carburants utilisés en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les délais mesurés expérimentalement et les délais calculés à l'aide de la relation (VI.7)		191

NOTATIONS

Notations latines :

A	: constante pré-exponentielle (relation (III.1))
a	: constante (relation (VII.2))
a_i	: ordre partiel relatif à l'espèce i
B	: constante (relation (III.1))
b	: constante (relation (VII.2))
c_d	: coefficient de perte de charge
c_i	: concentration de l'espèce i
E_a	: énergie d'activation
H.A.P.	: hydrocarbures aromatiques polycycliques
IC	: indice de cétane
k	: constante de vitesse de réaction
m	: constante (relation (III.1))
N	: vitesse de rotation
P	: pression
P_i	: pression initiale
P_{inj}	: pression d'injection
P_{tarage}	: pression de tarage de l'injecteur
R	: constante des gaz parfaits
r_c	: taux de compression
Ri	: richesse
S_p	: vitesse moyenne du piston
T	: température
T_a	: température d'activation
T_i	: température initiale
T_s	: température de suralimentation
t	: temps
t_i	: instant initial
t_{paraf}	: teneur massique en composés paraffiniques
V	: volume de la chambre de combustion
V_0	: vitesse d'injection

- W_i : masse moléculaire de l'espèce i
- X : espèce chimique
- z : constante (relation (VII.2))
- $[X_0]$: concentration critique de l'espèce X
- $[X]$: concentration de l'espèce X

Notations grecques :

- ϕ_{inj} : diamètre du trou d'injecteur
- γ : coefficient polytropique
- ν : viscosité cinématique du carburant
- ρ : masse volumique
- ρ_f : masse volumique du carburant
- τ : délai d'auto-inflammation total
- τ_{ch} : délai d'auto-inflammation chimique
- τ_p : délai physique permanent
- τ_{ph} : délai d'auto-inflammation physique
- $\dot{\omega}$: vitesse de réaction

LISTE DES FIGURES

FIGURE	TITRE	PAGE
I.1	Courbe de dégagement de chaleur typique d'un moteur Diesel	8
I.2	Définition du délai d'élévation de la pression dans une chambre de combustion à volume constant	10
I.3	Inflammation en un stade (Ryan et col. [4])	11
I.4	Inflammation en deux stades (Ryan et col. [4])	11
II.1	Effet de la température T_i régnant dans la chambre de combustion d'un moteur sur le délai d'auto-inflammation à différentes pressions initiales (Miwa et col. [1])	15
II.2	Evolution du délai physique en fonction de la température (Miwa et col. [1])	15
II.3	Evolution du délai chimique en fonction de la température (Miwa et col. [1])	15
II.4	Evolution du délai physique en fonction de la pression (Miwa et col. [1])	17
II.5	Evolution du délai chimique en fonction de la pression (Miwa et col. [1])	17
II.6	Influence de la vitesse de l'air sur la combustion (Siebers [3])	18
II.7	Effet de la concentration en oxygène sur le délai d'auto-inflammation (Ryan et col. [4])	19
II.8	Influence de l'avance à l'injection sur le délai d'auto-inflammation (Claude [14])	21
II.9	Influence du taux d'introduction sur le délai d'auto-inflammation (Claude [14])	22
II.10	Evolution du délai d'auto-inflammation en fonction de la quantité injectée (Miwa et col. [1])	23
II.11	Evolution du délai d'auto-inflammation en fonction de la température pour les combustibles de référence (Siebers [3])	26
II.12	Evolution du délai en fonction de la température pour les combustibles testés (Siebers [3])	26

FIGURE	TITRE	PAGE
II.13	Influence de la teneur en aromatiques sur le délai d'auto-inflammation (Claude [14])	27
II.14	Influence de la nature du carburant sur le délai d'auto-inflammation (Hoskin et col. [5])	28
II.15	Influence de la viscosité sur le délai d'auto-inflammation (Pischinger et col. [8])	29
II.16	Influence d'un additif (nitrate d'alkyle) sur le délai d'auto-inflammation [8]	31
III.1	Réactions à la base des mécanismes détaillés	42
III.2	Schéma du mécanisme chimique proposé par Cox et col. [34]	47
IV.1	Schéma de la chambre de combustion à volume constant	54
IV.2	Schéma du système d'injection monocoup	56
IV.3	Circuit d'injection (pompe classique)	56
IV.4	Synoptique des systèmes d'acquisition, de mesure et de commande du dispositif expérimental	57
IV.5	Enregistrements caractéristiques d'un essai	59
V.1	Définition du délai de dégagement de chaleur apparent dans une chambre de combustion à volume constant selon Thelliez et col. [21]	62
V.2	Comparaison entre les différents délais mesurés (n-dodécane, P = 20 bar)	63
V.3	Evolution du délai d'auto-inflammation de Bach (IC = 20,1) en fonction de la température pour différentes pressions initiales	65
V.4	Evolution du délai d'auto-inflammation de Mozart (IC = 42,8) en fonction de la température pour différentes pressions initiales	66
V.5	Evolution du délai d'auto-inflammation de Häendel (IC = 60,1) en fonction de la température pour différentes pressions initiales	67
V.6	Evolution du délai d'auto-inflammation de différents carburants en fonction de la pression initiale régnant dans la chambre de combustion	71
V.7	Influence du diamètre de l'injecteur sur le délai d'auto-inflammation d'un carburant	72
V.8	Influence du type d'injecteur sur le délai d'auto-inflammation d'un carburant	73
V.9	Evolution de la pression d'injection en fonction du temps	75

FIGURE	TITRE	PAGE
V.10	Evolution du délai d'auto-inflammation en fonction de la température pour différentes pressions d'injection (gazole commercial, P = 20 bar)	75
V.11	Influence de l'indice de cétane sur le délai d'auto-inflammation	77
V.12	Influence de la teneur en additif sur le délai d'auto-inflammation	79
V.13	Influence de la nature de l'additif sur le délai d'auto-inflammation ...	81
V.14	Efficacité d'une additivation au nitrate d'alkyle rapportée au cétane clair du carburant	82
V.15	Influence d'un même additif sur le délai d'auto-inflammation de différents carburants	83
VI.1	Evolution du délai d'auto-inflammation de Bach en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfer (III.1)	91
VI.2	Evolution du délai d'auto-inflammation de Mozart en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfer (III.1)	92
VI.3	Evolution du délai d'auto-inflammation de Häendel en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfer (III.1)	93
VI.4	Evolution de la teneur en composés aromatiques en fonction de l'indice de cétane	96
VI.5	Evolution de la teneur en composés paraffiniques en fonction de l'indice de cétane	97
VI.6	Evolution de A en fonction de l'indice de cétane	98
VI.7	Evolution de A en fonction de la teneur en composés paraffiniques ..	98
VI.8	Evolution de B en fonction de l'indice de cétane	99
VI.9	Evolution de B en fonction de la teneur en composés paraffiniques ..	100
VI.10	Comparaison entre les valeurs réelles de A et les résultats de la relation (VI.4)	101
VI.11	Comparaison entre les valeurs réelles de m et les résultats de la relation (VI.5)	101
VI.12	Comparaison entre les valeurs réelles de B et les résultats de la relation (VI.6)	101

FIGURE	TITRE	PAGE
VI.13	Evolution du délai d'auto-inflammation de Bach en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)	103
VI.14	Evolution du délai d'auto-inflammation de Häendel en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)	104
VI.15	Evolution du délai d'auto-inflammation de Rameau en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)	105
VII.1	Mécanisme d'oxydation à basse température des hydrocarbures comportant plus de cinq atomes de carbone	113
VII.2	Maillage de la chambre de combustion	116
VII.3	Comparaison entre les résultats des différents modèles	117

LISTE DES TABLEAUX

TABLEAU	TITRE	PAGE
II.1	Effet de la teneur en peroxyde de di-t-butyle sur le délai d'auto-inflammation d'un combustible (Clothier et col. [18])	31
III.1	Valeurs des constantes de la relation de Wolfer obtenues par différents auteurs	36
V.1	Domaines de température considérés par différents auteurs	70
V.2	Evolution du délai d'auto-inflammation en fonction du type d'injecteur	74
V.3	Conditions expérimentales relatives à l'étude de l'influence de la pression d'injection	74
VI.1	Conditions expérimentales	90
VI.2	Valeurs des coefficients de la loi de Wolfer (III.1) obtenues pour les différents combustibles	90
VI.3	Valeurs des différentes constantes et de leur écart-type	100
VII.1	Mécanisme chimique proposé pour l'auto-inflammation du n-dodécane [41]	111
VII.2	Espèces chimiques impliquées dans les réactions de ramification pour les différents domaines de température	112
VII.3	Caractéristiques du dispositif expérimental	115
VII.4	Conditions expérimentales relatives aux cinq points expérimentaux retenus	115
VII.5	Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés à l'aide des différents mécanismes	116
VII.6	Influence de la température seuil choisie sur le délai d'auto-inflammation (modèle de Zellat, essai n°1)	117
VII.7	Erreurs relatives	118

INTRODUCTION

INTRODUCTION

Aujourd'hui, les constructeurs automobiles cherchent à concevoir des moteurs répondant à des normes de pollution et de bruit de plus en plus sévères, tout en continuant à améliorer leurs performances. De nombreuses études sont donc réalisées sur les moteurs à allumage commandé et à allumage par compression afin de mieux décrire la phase de combustion. C'est en effet pendant cette phase qu'apparaissent les nuisances qui font actuellement l'objet d'une attention toute particulière.

La combustion dans les moteurs génère des produits nocifs pour l'homme : monoxyde de carbone CO, oxydes d'azote NO_x et hydrocarbures imbrûlés parmi lesquels on trouve les hydrocarbures aromatiques polycycliques H.A.P. particulièrement toxiques ... Elle contribue également au phénomène connu sous le terme d' "effet de serre", en rejetant une quantité importante de dioxyde de carbone CO₂, produit final de la combustion. Dans le cas des moteurs Diesel, la période de pré-combustion, appelée aussi délai d'auto-inflammation, est un des facteurs principaux de la combustion d'un gazole. Elle détermine d'une part l'augmentation rapide de pression dans l'étape initiale de combustion. Il est par conséquent nécessaire de la maîtriser le plus précisément possible, afin de ne pas dépasser un seuil maximal de pression pendant le délai qui risquerait d'endommager le moteur par fatigue thermomécanique et d'augmenter le bruit. Le délai d'auto-inflammation joue d'autre part un rôle important au niveau de la formation des polluants.

Pour déterminer l'ordre de grandeur de l'augmentation de la pression pendant la première phase de la combustion, les lois de corrélation utilisées par les motoristes suffisent. En revanche, en ce qui concerne les polluants émis, il est indispensable de maîtriser les différentes étapes de la cinétique de la combustion, depuis l'arrivée de la première goutte de carburant dans la chambre de combustion jusqu'à l'échappement des gaz brûlés. Si la phase de combustion proprement dite est aujourd'hui relativement bien connue au point de vue énergétique, les mécanismes chimiques ayant lieu pendant le délai d'auto-inflammation ne sont pas encore décrits de façon précise. Des produits ou radicaux vont en effet se former pendant le délai : certains disparaîtront presque immédiatement, d'autres seront le point de départ de réactions conduisant à la formation des polluants émis à l'échappement.

L'objectif de ce travail est, après avoir étudié l'influence de divers paramètres sur le délai d'auto-inflammation, de proposer dans un premier temps une loi de corrélation permettant de déterminer le délai d'auto-inflammation de différents carburants de composition connue. Un mécanisme chimique décrivant l'inflammation d'un hydrocarbure sera ensuite considéré. Ce

mécanisme pourra ultérieurement être utilisé pour évaluer les polluants formés pendant la phase de pré-combustion.

La première partie de ce travail est une étude bibliographique. Quelques généralités concernant les moteurs Diesel sont exposées dans le chapitre I. Le chapitre II présente quant à lui les relations liant le délai d'auto-inflammation aux paramètres de fonctionnement (pression, température, ...) et aux caractéristiques du carburant. Le chapitre III termine cette étude par la description des différentes lois empiriques et des différents mécanismes chimiques proposés dans la littérature pour décrire le phénomène d'auto-inflammation.

La deuxième partie est consacrée à l'expérimentation. Le dispositif expérimental utilisé est décrit dans le chapitre IV. Il s'agit d'une chambre de combustion à volume constant, dont les parois sont maintenues à haute température. Le carburant est injecté dans cette chambre au moyen d'une pompe monocoup. Le chapitre V présente les mesures de délai d'auto-inflammation réalisées. L'influence de la pression et de la température régnant dans la chambre de combustion avant l'injection est notamment étudiée. Différents gazoles sont utilisés afin de mettre en évidence le rôle joué par la composition du carburant sur le délai.

La troisième et dernière partie concerne la modélisation du délai d'auto-inflammation. Dans le chapitre VI, une loi de corrélation simple est proposée. Elle permet de prédire le délai d'auto-inflammation d'un carburant quelconque, connaissant quelques paramètres fondamentaux tels que la pression et la température régnant dans la chambre de combustion avant l'injection. Dans le chapitre VII, trois mécanismes semi-globaux sont étudiés. Deux sont issus de la littérature, le dernier a été mis au point au laboratoire, en collaboration avec l'Université de Paris VI. Ils décrivent les différentes étapes menant à l'inflammation du mélange carburant / air. Ces mécanismes sont implantés dans un code de calcul tridimensionnel et leurs performances respectives sont comparées.

PREMIERE PARTIE

ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE

CHAPITRE I

GENERALITES

Depuis son invention à la fin du siècle dernier par Rudolf Diesel, le moteur à allumage par compression a fait l'objet de développements ininterrompus. Grâce aux nombreuses études qui ont été menées, nous avons aujourd'hui une bonne connaissance du cycle Diesel. Les différents phénomènes internes sont de mieux en mieux expliqués et peuvent donc être intégrés dans des modélisations toujours plus fines de la combustion. Cette meilleure compréhension a de plus permis d'améliorer les performances des moteurs : augmentation de la puissance sur l'arbre, diminution de la consommation spécifique, tout en réduisant les émissions : particules, oxydes d'azote, hydrocarbures imbrûlés, monoxyde de carbone pour ne citer que les polluants réglementés.

Nous allons ici rappeler quelques généralités concernant le cycle d'un moteur Diesel. Nous nous attacherons ensuite à définir de façon précise le délai d'auto-inflammation d'un carburant dans un moteur à allumage par compression.

I.1 - LA COMBUSTION DIESEL

La combustion Diesel se caractérise par une inflammation spontanée du mélange combustible-comburant quand il est porté dans les conditions de température et de pression requises. Dans un moteur à allumage par compression classique à quatre temps et à injection directe, le cycle Diesel est le suivant.

La première phase du cycle est la phase d'admission, pendant laquelle l'air est introduit dans la chambre de combustion.

Au cours de la deuxième phase, le mélange air + gaz résiduels est comprimé. Sa pression et sa température augmentent progressivement pour atteindre des valeurs élevées. Vers la fin de la compression, le combustible est injecté à haute pression (entre 200 et 1500 bar) dans le mélange, à travers le nez de l'injecteur. Le jet de combustible se pulvérise en formant des gouttelettes qui se vaporisent au fur et à mesure de leur pénétration dans la chambre. La vapeur de combustible ainsi formée se mélange avec l'air environnant tandis que la compression se poursuit.

Après un délai très court (de l'ordre de la milliseconde dans les conditions habituelles de fonctionnement d'un moteur), le combustible s'auto-enflamme : la combustion démarre sans aucun apport extérieur d'énergie pour son allumage. La fraction de combustible suffisamment mélangée à l'air et se trouvant dans des concentrations comprises entre les limites d'inflammabilité (richesse locale comprise entre 0,5 et 1,2) brûle très rapidement. Le premier pic que l'on observe sur la courbe de dégagement de chaleur (figure {I.1}) représente cette étape de la combustion, appelée combustion en pré-mélange. La fraction restante de combustible qui n'est pas encore mélangée ou pas encore vaporisée ne brûlera que plus lentement, au fur et à mesure de sa préparation. Cette deuxième étape de la combustion est contrôlée par la diffusion de l'air au niveau des gouttelettes, c'est-à-dire limitée par la vitesse à laquelle le combustible se mélange à l'air. On l'appelle combustion en flamme de diffusion.

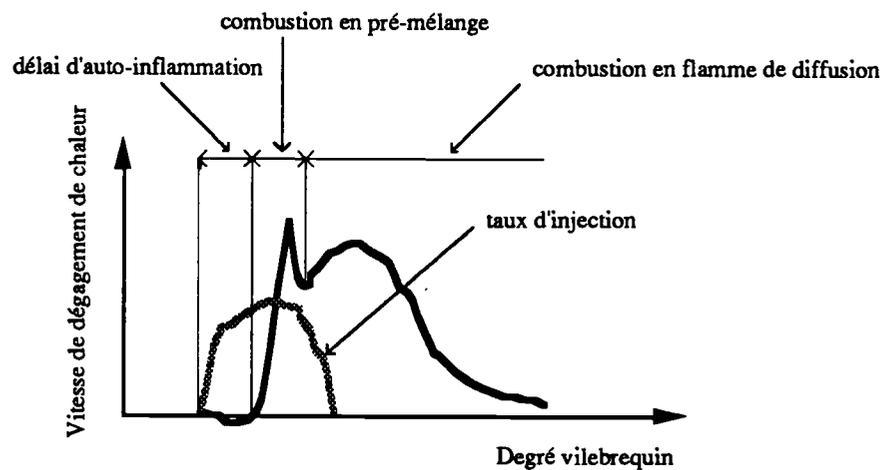


Figure {I.1} : Courbe de dégagement de chaleur typique d'un moteur Diesel

L'énergie libérée par la combustion provoque une augmentation rapide de la température des gaz. La pression dans la chambre croît. Les gaz poussent le piston qui fournit alors un travail utile au vilebrequin. C'est la phase de détente.

La dernière phase du cycle Diesel est l'échappement : les gaz brûlés sont expulsés de la chambre de combustion.

I.2 - LE PHENOMENE D'AUTO-INFLAMMATION

Comme nous l'avons mentionné au paragraphe précédent, le phénomène caractéristique de la combustion Diesel est l'auto-inflammation du carburant qui brûle sans apport extérieur d'énergie. Pour la caractériser, une grandeur est universellement utilisée : le délai d'auto-inflammation.

Le délai d'auto-inflammation d'un carburant est le temps nécessaire à ce carburant pour s'enflammer dans des conditions de température et de pression données. C'est le facteur principal déterminant l'augmentation rapide de pression dans l'étape initiale de combustion et dans les étapes suivantes (Miwa et col. [1]). Il n'affecte pas directement les performances du moteur mais joue un rôle important au niveau de la formation des polluants.

Il a été étudié au moyen de différents dispositifs expérimentaux : moteur Diesel classique, machine à compression rapide, chambre de combustion à volume constant ...

I.2.1 - Définitions

Le délai d'auto-inflammation total est la durée qui s'écoule entre le moment où l'on commence à injecter le combustible dans la chambre de combustion et l'instant où la combustion débute.

Si le début de l'injection est facilement repérable par la levée brutale de l'aiguille de l'injecteur, il est en revanche plus difficile de définir le début de la combustion. Plusieurs concepts de délai sont employés, selon la définition adoptée pour le caractériser :

- *délai d'élévation de la pression* : il est défini par l'apparition d'un brutal accroissement de la pression dans le cylindre qui s'éloigne rapidement de la pression sans combustion (moteur entraîné). Cette augmentation de pression est mesurée au moyen d'un capteur piézo-électrique.
- *délai de dégagement de chaleur* : il est caractérisé par le commencement d'un dégagement de chaleur ($\frac{dQ_n}{dt}$) quantifiable. On le calcule à partir de l'enregistrement de la courbe de pression, en écrivant le premier principe de la thermodynamique (cf. annexe 1).
- *délai d'illumination* : il est caractérisé par l'apparition d'une flamme visible, détectée à l'aide d'un capteur optique.
- *délai d'allumage* : il est défini par l'inflammation en masse, détectée grâce à un capteur optique.

Ces différentes définitions du délai d'auto-inflammation conduisent, pour des conditions expérimentales identiques, à des valeurs différentes. Herrier [2] a ainsi remarqué que le délai d'illumination est généralement plus court que le délai d'élévation de la pression déterminé dans

les mêmes conditions. L'augmentation de pression n'est en effet détectable qu'après combustion d'une faible fraction du carburant alors que le signal optique correspond exactement à l'apparition de la flamme. Ces résultats ont été confirmés par Siebers [3].

Parmi ces différents concepts de délai d'auto-inflammation, le plus souvent utilisé est le délai d'élévation de la pression. La figure {I.2} permet de visualiser cette définition dans le cas d'une chambre de combustion à volume constant. Néanmoins, au sein même de ce concept, des variantes apparaissent selon les auteurs. Certains considèrent comme début de combustion le moment où la pression reprend sa valeur initiale après la diminution provoquée par l'évaporation du combustible [4]. D'autres prennent en compte l'instant où elle reprend sa valeur initiale à laquelle a été ajoutée une faible variation de pression (de l'ordre de 0,25 bar par exemple) afin de s'assurer que la combustion a bien débuté [3].

Il convient donc, pour toutes les mesures de délai d'auto-inflammation réalisées, de définir clairement quel est le critère adopté, les comparaisons entre les différentes valeurs relevées dans la littérature ne pouvant être effectuées qu'à cette condition.

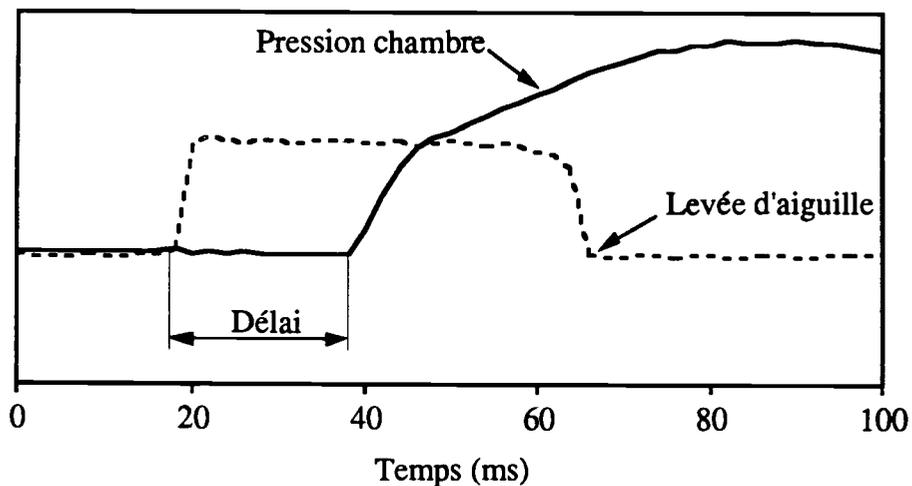


Figure {I.2} : Définition du délai d'élévation de la pression dans une chambre de combustion à volume constant

I.2.2 - Délai physique et délai chimique

Le délai d'auto-inflammation total (τ) est généralement séparé en deux périodes distinctes (Miwa et col. [1]). Au cours de la première période, le combustible est "préparé" pour la combustion. Après l'injection, des processus physiques se succèdent : atomisation du jet de gazole liquide, échauffement et évaporation des gouttelettes de carburant puis mélange avec l'air présent dans la chambre de combustion. Cet intervalle de temps est appelé délai physique (τ_{ph}). Il semblerait, d'après Miwa et col. [1], que ce délai soit composé d'une partie fixe (de l'ordre

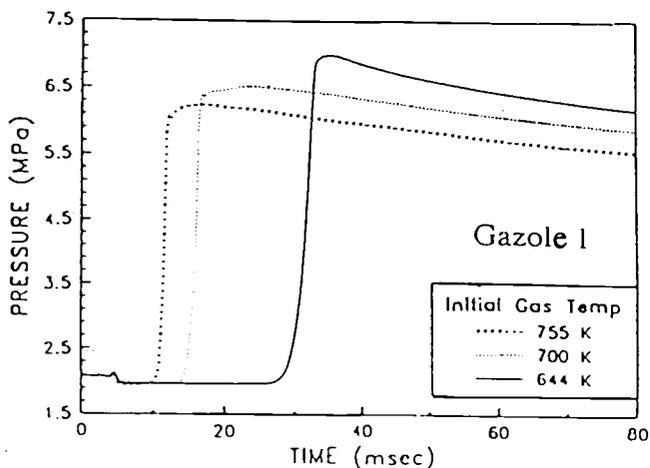
de 0,5 ms), indépendante de tout paramètre, et d'une partie variable en fonction des conditions moteur notamment. Après ce délai physique, vient une période pendant laquelle des radicaux libres, formés dans le mélange combustible-air, déclenchent un mécanisme de réactions en chaîne conduisant à l'inflammation du mélange : c'est le délai chimique (τ_{ch}). Ces trois délais sont liés par la relation suivante :

$$\tau = \tau_{ph} + \tau_{ch} \tag{I.1}$$

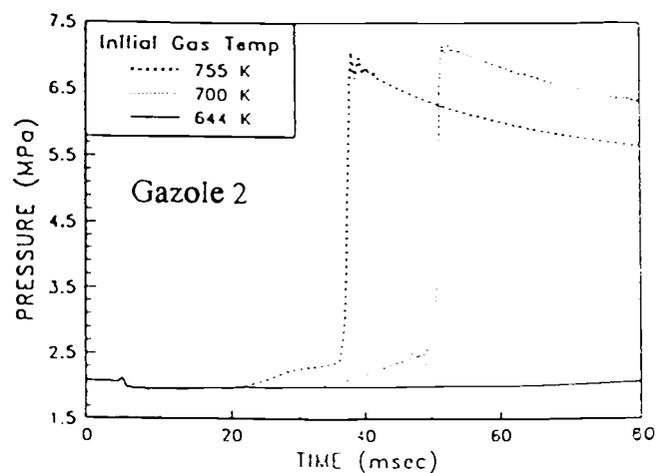
A basse température, les réactions chimiques ont lieu lentement et jouent un rôle dominant. On a par conséquent : $\tau_{ph} \ll \tau_{ch}$. A haute température, l'étape la plus lente du processus d'inflammation est l'évaporation du combustible et son mélange avec l'air car les réactions chimiques sont très fortement accélérées par les températures élevées. On a alors : $\tau_{ph} \gg \tau_{ch}$.

I.2.3 - Différents types d'inflammation

Les études concernant le délai d'auto-inflammation ont permis de mettre en évidence deux types d'inflammation, apparaissant selon un critère de température et selon la nature du combustible (Siebers [3]) : l'inflammation en un seul stade et l'inflammation en deux stades successifs. Les figures {I.3} et {I.4} (Ryan et col. [4]) décrivent ces deux catégories d'inflammation. Elles correspondent à des enregistrements de pression réalisés pendant la combustion de deux gazoles de composition très différente.



*Figure {I.3} : Inflammation en un stade
(Ryan et col. [4])*



*Figure {I.4} : Inflammation en deux stades
(Ryan et col. [4])*

Lors d'une inflammation en un stade, la diminution de pression après l'injection due à l'évaporation du combustible est suivie par une augmentation brutale de cette pression. C'est le

cas d'auto-inflammation le plus simple à analyser car le délai est alors clairement défini. Dans le cas d'une inflammation en deux stades, souvent observée à basse température, le premier stade correspond à une faible augmentation de la pression après la baisse initiale due à l'évaporation. Cette première étape précède l'étape principale d'inflammation, pour laquelle on observe une forte hausse de la pression. Dans ce type d'inflammation, la définition du délai est plus délicate. En effet, la première étape est suffisamment significative pour indiquer que la combustion a débuté mais, d'un point de vue moteur, cette définition n'a probablement pas de sens puisque l'augmentation de pression principale, la plus importante dans le cas d'un moteur, a lieu plus tard.

D'après Hoskin et col. [5], ces différents régimes d'inflammation sont caractérisés par des réactions d'initiation différentes, dépendant notamment de la température, qui seront détaillées dans les chapitres III et VII.

I.2.4 - Paramètres influençant le délai d'auto-inflammation

Le délai d'auto-inflammation dépend de deux groupes de paramètres : les uns sont liés au moteur, les autres au carburant.

Les paramètres liés au moteur peuvent à leur tour être séparés en deux catégories :

- les conditions de fonctionnement du moteur, qui sont en fait les conditions aérothermiques : température et pression régnant dans la chambre de combustion, taux de swirl ...
- les caractéristiques de l'injection : la pression d'injection, le type de l'injecteur (à trou, à téton), la géométrie de l'injecteur.

Les paramètres liés au carburant sont également de deux types :

- la composition du combustible : contenu aromatique et oxygéné, additif procétane, détergents, ...
- les propriétés physico-chimiques qui en résultent : notamment l'indice de cétane, la viscosité, la masse volumique ...

Le chapitre suivant présente de façon détaillée le rôle joué par ces différents paramètres sur le délai d'auto-inflammation d'un carburant.

CHAPITRE II

INFLUENCE DES PARAMETRES MOTEUR ET DES CARACTERISTIQUES DU CARBURANT SUR LE DELAI D'AUTO-INFLAMMATION

Le délai d'auto-inflammation d'un carburant est influencé à la fois par les conditions de fonctionnement et d'injection et par les caractéristiques du carburant. Les dispositifs expérimentaux utilisés pour étudier les effets de ces différents paramètres sont variés. Des travaux ont en effet été réalisés sur des moteurs ([2], [11], [12], [14]), sur des chambres à volume constant ([3], [4], [5], [9]) ou dans des machines à compression rapide [1]. Si, dans certains cas particuliers, les résultats obtenus diffèrent suivant le dispositif considéré, les effets observés sont dans la plupart des cas identiques quel que soit le type de banc d'essai utilisé. L'étude qui suit présente donc des travaux réalisés sur différents supports expérimentaux.

Nous allons dans un premier temps traiter le cas des conditions de fonctionnement du moteur, en observant le rôle joué par la température et la pression régnant dans la chambre de combustion avant l'injection. Nous étudierons ensuite l'influence des conditions d'injection : pression d'injection, nombre de trous, diamètre et type d'injecteur. Nous terminerons enfin par les relations existant entre le délai d'auto-inflammation d'un carburant et les caractéristiques de ce carburant (composition, volatilité, additivation, indice de cétane ...).

II.1 - INFLUENCE DES PARAMETRES MOTEUR

Ces paramètres comprennent :

- d'une part les conditions aérothermiques de fonctionnement, qui décrivent l'état physique de l'air présent dans la chambre de combustion ;
- d'autre part les conditions d'injection, qui caractérisent quant à elles l'état du carburant.

II.1.1 - Influence des conditions de fonctionnement

En 1966, Lyn et col., cités par Kamimoto et col. [6], ont étudié les effets d'un certain nombre de facteurs physiques sur le délai d'auto-inflammation d'un carburant à l'aide d'un moteur. Ils ont constaté que, dans des conditions normales de fonctionnement, les paramètres

les plus importants sont la pression et la température régnant dans la chambre de combustion. Au démarrage cependant, la vitesse à laquelle se forme le mélange combustible-air, liée à la turbulence, devient elle aussi un facteur non négligeable.

Nous allons donc nous attacher maintenant à décrire l'influence de ces trois paramètres principaux sur le délai d'auto-inflammation. Nous observerons également l'effet de grandeurs secondaires telles que la concentration en oxygène.

II.1.1.1 - Température

Parmi les différents paramètres moteur influençant le délai d'auto-inflammation, celui qui joue le rôle le plus important est certainement la température de l'air présent dans la chambre de combustion avant l'injection. Cette température intervient au niveau des processus physiques, tels que l'échauffement et l'évaporation du combustible, ainsi qu'au niveau des processus chimiques.

Les auteurs ayant étudié l'influence de la température sur le délai d'auto-inflammation n'ont pas tous considéré dans leurs travaux la même température. Certains ont en effet pris en compte la température initiale régnant dans la chambre de combustion avant l'injection ou avant l'inflammation. D'autres ont fait intervenir la température moyenne pendant le délai ou bien encore la température minimale atteinte pendant la phase d'évaporation du combustible (Ryan et col. [4]).

Néanmoins, malgré la diversité des températures considérées, tous ont observé la même évolution : le délai d'auto-inflammation d'un gazole diminue lorsque la température du gaz augmente. La relation existant entre ces deux grandeurs est du type Arrhénius (Ryan et col. [4], Spadaccini et col. [7], Pischinger et col. [8]).

En 1988, Miwa et col. [1] ont étudié les effets de la température sur l'évolution du délai d'auto-inflammation à l'aide d'une machine à compression rapide. Ils ont vérifié que le délai augmente lorsque la température diminue. Ils ont de plus montré que le délai d'inflammation n'évolue pas de la même façon sur tout l'intervalle de température considéré : l'influence de la température est moins importante à haute température qu'à basse température comme le montre la figure {II.1}. Sur cette figure, on peut en effet observer un changement de pente pour les différentes pressions à une température voisine de 800 K. Miwa et col. [1] ont interprété ce phénomène de la façon suivante :

- pour des températures de gaz inférieures à 800 K, on a un effet dominant des réactions chimiques ;

- pour des températures de gaz supérieures à 800 K, ce sont les processus physiques qui jouent un rôle prépondérant.

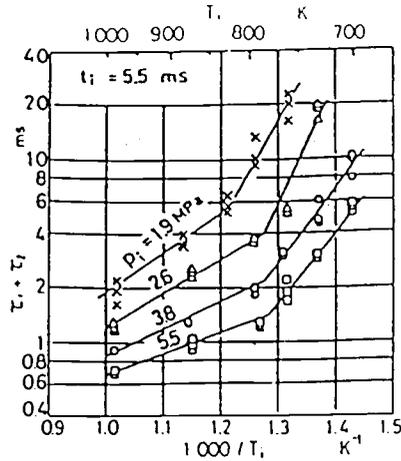


Figure {II.1} : Effet de la température T_i régnant dans la chambre de combustion d'un moteur sur le délai d'auto-inflammation à différentes pressions initiales (Miwa et col. [1])

Miwa et col. [1] ont également étudié séparément l'influence de la température sur le délai physique et sur le délai chimique. Le délai physique a été défini comme étant l'intervalle de temps séparant le début de l'injection du commencement d'un dégagement de chaleur mesurable, qui intervient dès que la pression commence à ré-augmenter après la baisse due à l'évaporation du gazole. Le délai chimique est quant à lui égal à l'intervalle de temps séparant ce délai physique de l'instant où la pression reprend sa valeur initiale avant injection. Miwa et col. [1] ont constaté que le délai physique semble être moins influencé par la température que le délai chimique, comme le montrent les figures {II.2} et {II.3}.

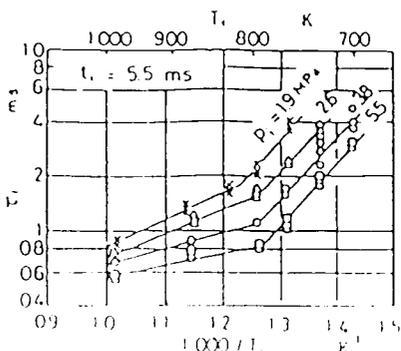


Figure {II.2} : Evolution du délai physique en fonction de la température (Miwa et col. [1])

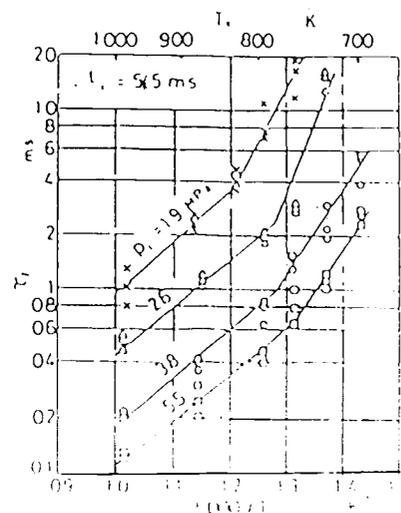


Figure {II.3} : Evolution du délai chimique en fonction de la température (Miwa et col. [1])

Ils ont également remarqué que l'influence de la température sur le délai physique et sur le délai total semble diminuer lorsque la pression augmente (figures {II.1} et {II.2}).

II.1.1.2 - Pression

La pression a en théorie un effet direct sur le délai d'auto-inflammation puisqu'elle intervient sur les processus physiques tels que l'atomisation du gazole et la pénétration du jet, ainsi que sur les processus chimiques par l'intermédiaire de la pression partielle d'oxygène.

Siebers [3] a cependant observé, lors d'essais réalisés à différentes températures dans une chambre à volume constant, à des pressions comprises entre 20 et 50 bar, que l'effet de la pression est minime par rapport à celui de la température.

S'il est généralement admis que la pression joue un rôle beaucoup moins important sur le délai d'auto-inflammation que la température (Miwa et col. [1], Ryan et col. [4]), les études qui ont été menées jusqu'à présent ne permettent pas de dégager une évolution nette du délai en fonction de la pression. Certains auteurs ont observé que le délai augmente avec la pression alors que d'autres travaux montrent le contraire.

Ainsi, Ryan et col. [4] ont observé dans une chambre à volume constant et sur un moteur que le délai augmente légèrement avec la densité de l'air. Ce phénomène est d'autant plus visible que la quantité de combustible injectée est importante. Une injection d'une grande quantité de gazole nécessite une pression d'injection élevée et implique donc un taux de pénétration important. La densité du gaz présent dans la chambre de combustion joue alors un rôle significatif, le jet atteignant ou non la paroi selon la valeur de la pression d'air. L'effet de la densité sur le délai d'auto-inflammation observé par Ryan et col. [4] dans le cas de l'injection d'une masse importante de gazole s'explique donc par les interactions à la paroi. Ceci est confirmé par le fait qu'à faible quantité injectée, les effets de parois étant négligeables, aucun effet de la densité sur le délai d'auto-inflammation n'a été observé.

Igura et col., cités par Kong et col. [9], ont en revanche observé qu'une augmentation de la pression initiale régnant dans la chambre de combustion à volume constant de 11 à 31 bar provoquait une diminution du délai d'auto-inflammation de 3 à 5 ms selon la température à laquelle a été effectué l'essai.

Miwa et col. [1] se sont plus particulièrement attachés à décrire l'influence de la pression sur les délais physiques et chimiques séparément. Ils ont montré qu'à haute température (870 K environ), la pression n'a qu'un faible effet sur le délai physique. Son influence est en revanche très importante sur le délai chimique.

Les figures {II.4} et {II.5} permettent de mettre en évidence différentes évolutions. Sur la figure {II.4} on remarque que l'influence de la température sur le délai physique est d'autant moins marquée que la pression est élevée. Pour des pressions supérieures à 30 bar, l'influence de la température sur le délai chimique ne semble pas dépendre de la pression. En revanche, à basse pression (inférieure à 30 bar), la température joue un rôle beaucoup plus important.

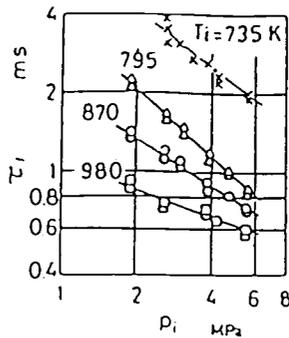


Figure {II.4} : Evolution du délai physique en fonction de la pression (Miwa et col. [1])

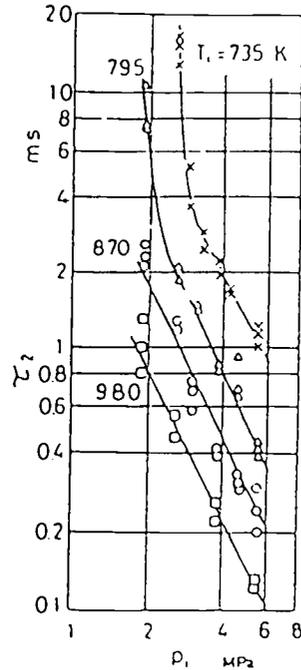


Figure {II.5} : Evolution du délai chimique en fonction de la pression (Miwa et col. [1])

II.1.1.3 - Vitesse des gaz

Taux de tourbillon

Le taux de tourbillon (swirl) intervient directement sur les processus d'évaporation du combustible et de mélange air / carburant. En affectant également le transfert de chaleur aux parois pendant la phase de compression du cycle Diesel, il modifie la température de l'air présent dans la chambre de combustion au moment de l'injection (Heywood [10]) et par suite le délai d'auto-inflammation.

De nombreux auteurs ont étudié l'influence du taux de tourbillon sur le délai d'auto-inflammation. Les conclusions auxquelles ils sont parvenus sont très variées.

Siebers [3] et Heywood [10] ont observé que le swirl a un effet négligeable sur le délai d'auto-inflammation. Siebers [3] a étudié l'influence de ce swirl dans une chambre de combustion à volume constant équipée d'un ventilateur à vitesse de rotation variable. Il a constaté, comme le montre la figure {II.6}, que l'effet de la vitesse de l'hélice semble apparaître uniquement au niveau du processus de combustion du jet : plus la vitesse est élevée, plus l'augmentation de pression dans la chambre est rapide et importante. Heywood [10] a quant à lui remarqué que l'influence du swirl est beaucoup plus marquée dans des conditions de démarrage à froid, lorsque la vitesse de rotation est faible, du fait du meilleur mélange air / combustible obtenu avec swirl.

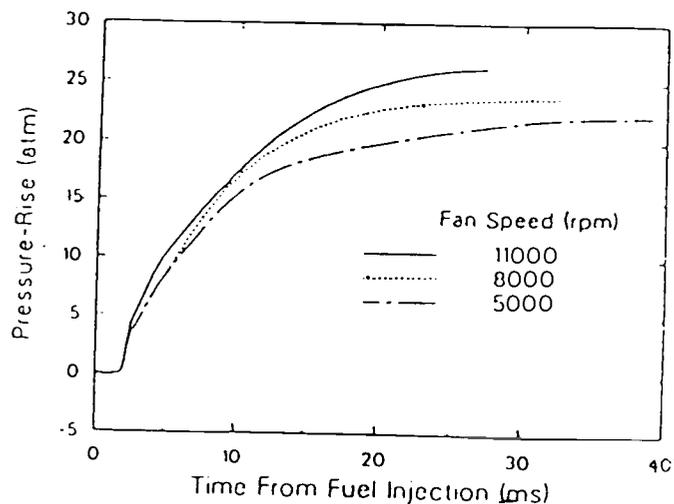


Figure {II.6} : Influence de la vitesse de l'air sur la combustion (Siebers [3])

D'autres auteurs ont en revanche mis à évidence des évolutions inverses. Ainsi, Spicher et col., cités par Kamimoto et col. [6], ont observé que plus le taux de swirl est important, plus le délai d'auto-inflammation est long. Cette augmentation du délai s'explique par une diminution locale de la température, due à une meilleure évaporation, provoquée par le taux de swirl important.

Le swirl accentue en outre les effets de la température sur le délai. Ceci a été mis en évidence par les travaux de Ryan et col. [4] et de Spadaccini et col. [7]. Ryan et col. [4] ont observé que ces effets étaient beaucoup moins importants lors de leurs essais en chambre à volume constant en atmosphère calme, que lors des tests réalisés par Spadaccini et col. [7] dans un dispositif avec écoulement.

Vitesse de rotation

Heywood [10] a observé qu'une augmentation de la vitesse de rotation du vilebrequin à charge constante entraînait une diminution du délai d'auto-inflammation. Ceci s'explique par le fait que les pertes de chaleur pendant la phase de compression sont moins importantes à vitesse de rotation élevée, ce qui permet d'obtenir en fin de compression une température dans la chambre de combustion plus favorable à l'inflammation. De plus, une augmentation de la vitesse de rotation améliore le mélange air / carburant, ce qui provoque une réduction considérable du délai physique.

Les essais réalisés par Herrier [11] dans un moteur Diesel à préchambre confirment ces résultats.

II.1.1.4 - Concentration en oxygène

Les travaux de Ryan et col. [4] ont permis de déterminer le rôle joué par la concentration moyenne en oxygène sur l'évolution du délai d'auto-inflammation. Considérant l'effet de la concentration en oxygène indépendamment des effets de la pression (en modifiant la composition du comburant), ils ont constaté, et cela a été confirmé par Heywood [10], que le délai d'auto-inflammation augmente lorsque la concentration en oxygène diminue (cf. figure {II.7}).

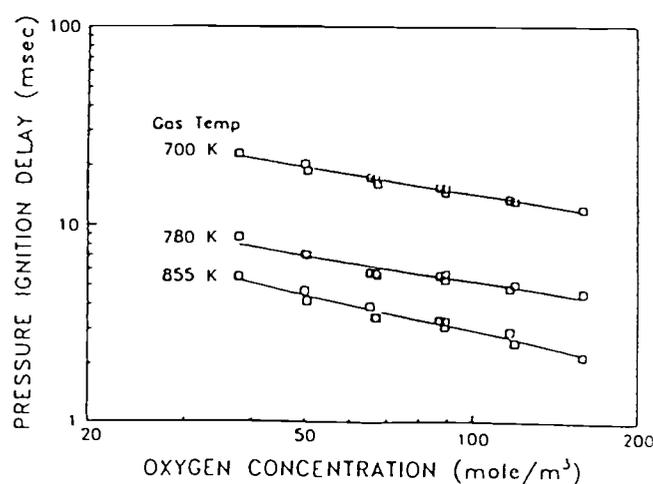


Figure {II.7} : Effet de la concentration en oxygène sur le délai d'auto-inflammation (Ryan et col. [4])

II.1.2 - Influence des conditions d'injection

Bien qu'elles aient une influence moins importante que la température initiale régnant dans la chambre de combustion, les caractéristiques de l'injection interviennent également sur le délai d'auto-inflammation en déterminant l'état physique du gazole pendant la période de pré-combustion.

II.1.2.1 - Atomisation des gouttes

Nakakita et col. [12] ont étudié sur un moteur monocylindre les effets d'une pression d'injection élevée sur le délai d'auto-inflammation. Ils ont observé que lorsque la pression d'injection augmente de 380 à 800 bar, les délais sont notablement raccourcis. Ceci est confirmé par Minami et col. [13] et s'explique par une meilleure atomisation des gouttelettes à pression d'injection élevée, cette meilleure atomisation modifiant l'effet de l'impact du jet à la paroi. En effet, à basse pression d'injection, les gouttelettes sont peu atomisées, excepté dans la périphérie du jet de gazole, et celles qui atteignent les parois ne sont pratiquement pas évaporées. Cet impact du jet à la paroi ralentit le mélange air / carburant et c'est donc dans la zone périphérique du jet que se produit l'inflammation. En revanche, à haute pression d'injection, l'atomisation des gouttelettes de gazole et par suite leur évaporation sont améliorées. Le gazole qui atteint la paroi se présente alors sous forme de vapeur. L'impact permet dans ce cas d'accélérer le mélange air / carburant. L'inflammation a alors lieu près de la paroi, avant que les conditions requises pour l'auto-inflammation ne soient atteintes dans la zone périphérique du jet, qui ne dépendent pratiquement pas de la pression d'injection.

Alors que Minami et col. [13] ont observé ce phénomène jusqu'à une pression d'injection de 2000 bar, Nakakita et col. [12] ont constaté qu'au dessus de 800 bar, l'effet de la pression d'injection semble s'atténuer. Ils considèrent en effet qu'au dessus d'une certaine pression d'injection, l'atomisation des gouttelettes de gazole ne peut plus être améliorée, leur diamètre ne pouvant diminuer indéfiniment. La diminution du délai physique favorisée par un meilleur mélange air / combustible est de plus compensée par l'augmentation du délai chimique. Cette augmentation s'explique par la baisse locale de température provoquée par l'évaporation d'une quantité importante de carburant injectée pendant un intervalle très court.

Il faut noter que Pischinger et col. [8], lors d'études à basse pression d'injection (inférieure à 300 bar), ont observé une évolution inverse du délai d'auto-inflammation. Cette évolution serait due à une diminution locale de température consécutive à une évaporation importante, comme l'ont fait remarquer Nakakita et col. [12], mais, pour Pischinger et col. [8], cette diminution joue un rôle prépondérant.

II.1.2.2 - Distribution spatiale du gazole

La distribution spatiale du gazole dans la chambre de combustion est déterminée par les dispositions géométriques adoptées pour l'injecteur : diamètre et nombre de trous, téton, ... La vitesse des gaz frais contribue ensuite à assurer l'uniformité de la répartition des gouttes.

Des études menées sur des injecteurs présentant des géométries différentes (mono ou multi-trous, rapport longueur sur diamètre du trou variable, ...) ont montré que ces caractéristiques n'influençaient que très peu le délai d'auto-inflammation. Heywood [10] a ainsi constaté qu'à pression d'injection constante, dans des conditions de fonctionnement normales, un doublement du diamètre de l'injecteur, bien que provoquant une augmentation du débit de combustible et du diamètre des gouttes, n'a pas d'effet significatif sur le délai d'auto-inflammation.

II.1.2.3 - Distribution temporelle du gazole

Avance à l'injection

Les études réalisées par Herrier [11] et Claude [14] sur moteur Diesel à préchambre ont permis de montrer que le délai d'auto-inflammation décroît lorsque l'avance à l'injection diminue (cf. figure {II.8}). Ceci s'explique aisément par le fait que, lorsque l'on injecte plus tôt, les conditions de température et de pression régnant dans la chambre de combustion sont moins favorables à l'inflammation et allongent donc le délai.

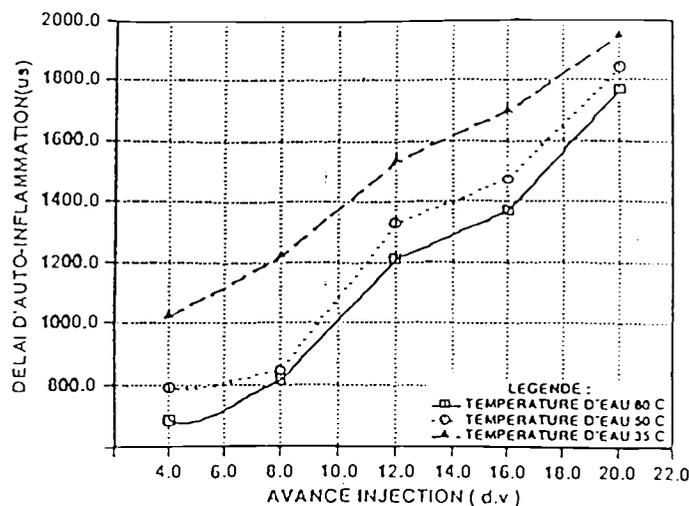


Figure {II.8} : Influence de l'avance à l'injection sur le délai d'auto-inflammation (Claude [14])

Néanmoins, l'injection ne doit pas avoir lieu trop près du point mort haut. En effet,

comme les températures et pressions initiales diminuent légèrement juste avant ce point mort haut (2 à 3 ° vilebrequin avant) du fait des pertes thermiques, les conditions régnant dans la chambre de combustion sont alors moins favorables et provoquent une augmentation du délai (Heywood [10]). Les conditions les plus favorables se situent d'après Heywood [10] 10 à 15 ° vilebrequin avant le point mort haut.

Taux d'introduction

Claude [14] a étudié sur un moteur Diesel à préchambre l'influence du taux d'introduction sur le délai d'auto-inflammation. Il a utilisé dans ce but trois injecteurs à téton différents. L'un présente un faible taux d'introduction. Les autres présentent un plus fort taux d'introduction, l'un d'entre eux est un injecteur à téton divergent. Claude [14] a obtenu avec les deux injecteurs ayant un fort taux d'introduction des résultats identiques (cf. figure {II.9}). Ceci confirme les observations d'Heywood [10] concernant l'effet négligeable de la géométrie de l'injecteur sur le délai. Les délais d'auto-inflammation observés pour le premier injecteur cité sont beaucoup plus longs. Le taux d'introduction semble donc jouer un rôle non négligeable sur le délai. A un taux d'introduction important correspond une vitesse de pénétration du jet élevée. Plus cette vitesse est grande, meilleure est la pulvérisation du carburant. La vaporisation s'en trouve facilitée et une augmentation du taux d'introduction revient donc en fait à réduire le délai physique.

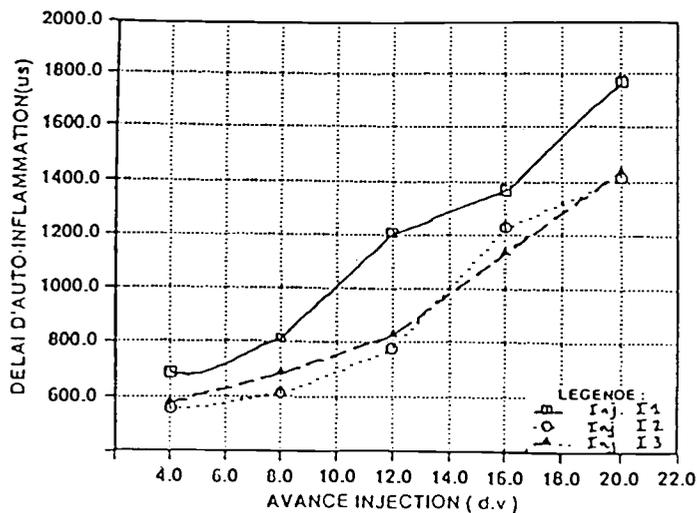


Figure {II.9} : Influence du taux d'introduction sur le délai d'auto-inflammation (Claude [14])

Pré-injection

En 1989, Wakuri et col., cité par Kamimoto et col. [6], ont remarqué qu'en pré-injectant 6 à 7 % du combustible 5° vilebrequin avant l'injection principale à haute pression, on pouvait

diminuer le délai d'auto-inflammation ainsi que la durée de la combustion. Cette observation a également été faite par Bouthenet et col. [15].

II.1.2.4 - Quantité injectée

Les différents auteurs ayant étudié l'influence de la quantité injectée sur le délai d'auto-inflammation ont abouti à la même conclusion : le rôle joué par la quantité injectée est relativement faible mais néanmoins non négligeable.

Miwa et col. [1] (en machine à compression rapide), Siebers [3] et Ryan et col. [4] (en chambre à volume constant) ainsi que Pischinger et col. [8] (en chambre à haute pression) ont observé qu'une augmentation de la quantité injectée entraîne une augmentation du délai d'auto-inflammation. Cette évolution correspond à l'effet "extincteur" d'une injection de combustible liquide plus longue. En effet, si on augmente la quantité de combustible injectée, la chute locale de température provoquée par l'évaporation du gazole est importante et provoque une diminution de pression également non négligeable. Le délai d'auto-inflammation est alors plus long.

L'influence de la quantité injectée sur le délai d'auto-inflammation semble dépendre de l'intervalle de température dans lequel on se trouve (Miwa et col. [1]). La figure {II.10} montre qu'à haute température, la quantité injectée ne semble pas jouer un rôle important sur le délai (son influence est surtout marquée au niveau de la pression maximale atteinte pendant la combustion : cette pression augmente avec la quantité injectée). En revanche, à basse température, une augmentation de la quantité injectée provoque une augmentation du délai due à l'effet "extincteur" plus marqué dans le cas des faibles températures.

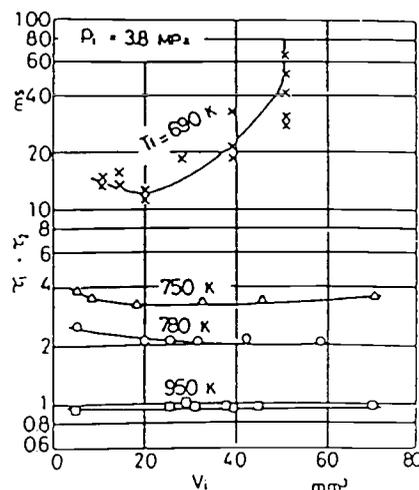


Figure {II.10} : Evolution du délai d'auto-inflammation en fonction de la quantité injectée (Miwa et col. [1])

Siebers [3] a en outre observé que la quantité injectée semble avoir un effet plus important sur l'inflammation lorsque la durée d'injection est faible devant le délai.

Il convient enfin de noter (Pischinger et col. [8], Heywood [10]) que l'évolution du délai en fonction de la quantité injectée est inversée sur moteur réel. En effet, comme la quantité de carburant brûlé est plus importante, on observe une augmentation de la température des parois due à un plus grand dégagement de chaleur. Ceci provoque une diminution du délai (par amélioration des conditions thermiques).

II.1.2.5 - Impact à la paroi

Selon Heywood [10], l'impact du jet à la paroi influence de façon évidente les processus d'évaporation du combustible et de mélange avec l'air.

Des études menées sur chambre de combustion à volume constant ont permis de montrer que le délai d'auto-inflammation est réduit lorsque le jet de gazole touche une paroi, dans les domaines de basse pression et de basse température. Dans les conditions de fonctionnement normales d'un moteur Diesel (température et pression plus élevées), l'effet de l'impact à la paroi n'est pas significatif.

II.2 - INFLUENCE DES CARACTERISTIQUES DU CARBURANT

Le délai d'inflammation d'un carburant est directement lié à son indice de cétane, à sa composition chimique et à ses propriétés physico-chimiques. Il est difficile de faire varier une de ces caractéristiques indépendamment de toute autre et il conviendra de garder à l'esprit ce fait durant toute l'étude qui va suivre.

II.2.1 - Indice de cétane

L'indice de cétane est un repère permettant de situer les carburants par rapport à une référence. C'est une valeur globale, traduisant en un seul nombre la capacité d'un carburant à s'auto-enflammer dans des conditions physico-chimiques pré-définies. L'utilisation de cet indice est limitée à certains carburants dont la composition est proche des carburants de référence.

II.2.1.1 - Définition

L'aptitude d'un carburant à s'auto-enflammer est caractérisée par son indice de cétane. Il

s'agit d'une comparaison entre le carburant étudié et un carburant de référence constitué d'un mélange :

- de n-cétane (ou hexadécane normal), dont l'inflammabilité est bonne et auquel on affecte l'indice 100 ;
- d'heptaméthylnonane, dont l'inflammabilité est mauvaise et auquel on affecte l'indice 15 ;

dans des conditions expérimentales rigoureusement fixées.

L'indice de cétane est défini par le standard ASTM D-613 (Siebers [3]). Il est déterminé selon un processus normalisé sur un moteur de référence CFR à taux de compression variable fonctionnant dans des conditions données. Le début de l'injection du gazole a lieu 13 degrés avant le point mort haut et le taux de compression est ajusté jusqu'à ce que l'inflammation, détectée par le début de l'augmentation de pression, ait lieu au point mort haut. Avec une vitesse de rotation fixée à 900 tr / min, ces conditions entraînent un délai d'auto-inflammation de 2,41 ms. L'indice de cétane est alors égal à l'indice de cétane d'un mélange de n-cétane et d'heptaméthylnonane, qui présente la même qualité d'auto-inflammation dans des conditions moteur identiques. L'indice de cétane d'un mélange de n-cétane et d'heptaméthylnonane est quant à lui déterminé d'après le pourcentage volumique de chaque combustible dans le mélange à l'aide de la relation suivante :

$$\text{indice de cétane} = \% (\text{n-cétane}) + 0,15 \cdot \% (\text{heptaméthylnonane}) \quad (\text{II.1})$$

Le moteur CFR utilisé lors de la détermination de l'indice de cétane est un moteur à injection indirecte, la forme et la taille de la chambre de combustion impliquent un impact du jet de gazole à la paroi. Enfin, il convient de noter que le moteur tourne à bas régime (900 tr / min).

La procédure utilisée pour la détermination de l'indice de cétane d'un combustible peut être remise en cause aujourd'hui car le moteur utilisé n'est pas représentatif des moteurs courants, les conditions de fonctionnement ne sont pas représentatives des conditions typiques de démarrage ou de marche normale et les combustibles de référence ont une composition chimique différente de celles des carburants classiques (de plus en plus d'aromatiques et d'additifs, non présents dans les carburants de référence, sont ajoutés dans les gazoles utilisés de nos jours).

II.2.1.2 - Influence de l'indice de cétane

Il est difficile de parler d'influence de l'indice de cétane sur le délai d'auto-inflammation, ces deux caractéristiques sont en effet directement liées puisque l'indice de cétane est déterminé

au moyen d'une norme basée sur la mesure du délai. Quelques évolutions inattendues ont toutefois été observées et méritent une attention particulière.

Par définition, plus l'indice de cétane d'un carburant est élevé, plus son délai d'auto-inflammation est court. La figure {II.11}, donnée à titre d'exemple, représente l'évolution du délai en fonction de la température initiale pour des mélanges de cétane et d'heptaméthylnonane purs, qui sont les carburants de référence utilisés dans la détermination de l'indice de cétane. Si de nombreux auteurs ([3], [8], [10]) ont observé cette évolution logique, les travaux de Siebers [3] ont cependant mis en évidence un point fondamental : l'indice de cétane ne permet de caractériser un carburant qu'à la condition expresse que sa composition soit proche de celle des carburants de référence utilisés pour le déterminer. Pour illustrer ce point, considérons la figure {II.12}. Celle-ci montre les évolutions de différents carburants d'indice de cétane connus.

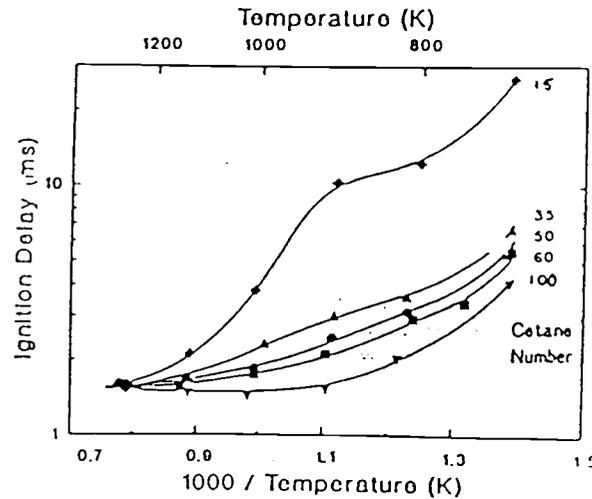


Figure {II.11} : Evolution du délai d'auto-inflammation en fonction de la température pour les combustibles de référence (Siebers [3])

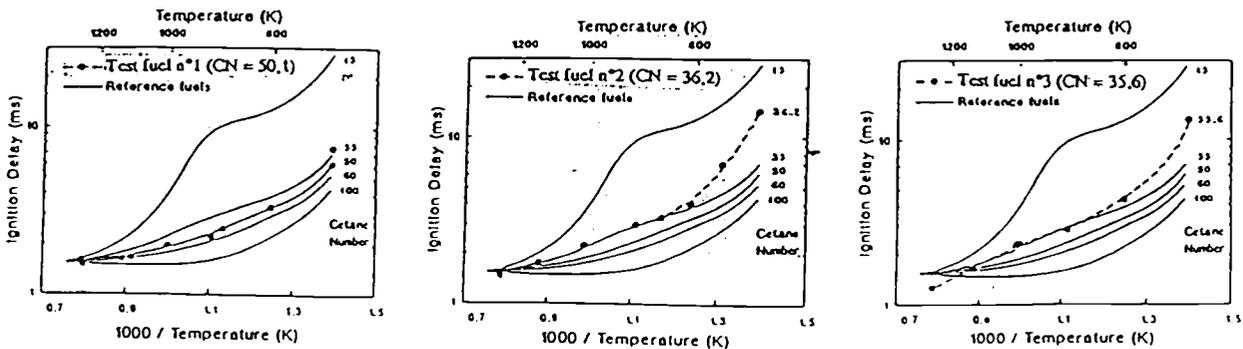


Figure {II.12} : Evolution du délai en fonction de la température pour les combustibles testés (Siebers [3])

Le combustible n°1 a un indice de cétane égal à 50,1 et ses caractéristiques sont proches de celles des carburants de référence. Les résultats obtenus pour ce combustible sont très satisfaisants puisque les points se trouvent sur la courbe correspondant au combustible de référence ayant un indice de cétane de 50. En revanche, pour les deux autres combustibles testés, les points obtenus ne suivent pas les courbes correspondant à leur indice de cétane sur tout le domaine de température.

Siebers [3] en a donc déduit que l'indice de cétane ne permet pas de prédire de façon exacte l'aptitude à l'auto-inflammation d'un combustible, les mélanges réalisés avec les corps purs (n-cétane et heptaméthylnonane) ne pouvant représenter tous les carburants existants. Pour avoir de bonnes indications, les combustibles testés doivent présenter des caractéristiques proches de celles des combustibles de référence, comme on l'a observé avec le combustible n°1.

Les études de Ryan et col. [4], Hoskin et col. [5], Pischinger et col. [8], Kirsch et col. [16] ont confirmé les conclusions de Siebers [3]. Il s'avère donc impossible de caractériser un gazole par son seul indice de cétane. Il est nécessaire de tenir compte d'autres paramètres tels que la viscosité ou la volatilité.

II.2.2 - Composition chimique

Les gazoles utilisés actuellement présentent des compositions chimiques très différentes. Ils résultent de mélanges d'hydrocarbures paraffiniques (C_nH_{2n+2}), naphténiques (C_nH_{2n}) et aromatiques (dérivés du benzène). Ils contiennent également différents additifs qui permettent d'améliorer essentiellement leur indice de cétane, leur stabilité au stockage, leur inertie chimique vis-à-vis des métaux, leurs propriétés détergentes, leur combustion afin de réduire la formation des fumées et leur point d'écoulement. Les caractéristiques moyennes d'un gazole commercial sont résumées dans l'annexe 2. L'annexe 3 présente les additifs les plus couramment utilisés.

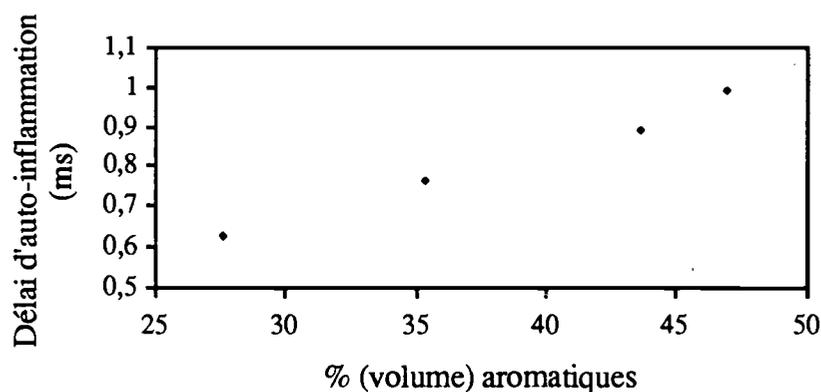


Figure {II.13} : Influence de la teneur en aromatiques sur le délai d'auto-inflammation (Claude [14])

Claude [14] a étudié sur un moteur à préchambre l'influence de l'aromaticité des carburants sur le délai d'auto-inflammation. Les trois gazoles qu'il a testés présentent une concentration en composés aromatiques variant entre 27 et 47 %. Ceci se traduit par un indice de cétane compris entre 50 et 38. Claude [14] a constaté qu'une teneur en aromatique importante conduisait à des caractéristiques d'auto-inflammation mauvaises (cf. figure {II.13}).

Les travaux de Hoskin et col. [5] réalisés sur une chambre à volume constant avec des carburants paraffiniques, naphténiques et aromatiques, ont montré que trois combustibles ayant le même indice de cétane mais contenant l'un un composé aromatique, l'autre un composé paraffinique, et le dernier un composé naphténiq, ne présentent pas des caractéristiques d'auto-inflammation identiques sur tout le domaine de température étudié (de 570 K à 1300 K). Le gazole paraffinique possède un délai d'inflammation plus court que le gazole aromatique, lui-même s'enflammant plus rapidement que le gazole naphténiq. La différence entre les trois délais est d'autant plus importante que la température initiale est faible, comme le montre la figure {II.14}. Ces résultats confirment ceux obtenus par Kirsch et col. [16] et montrent qu'un gazole contenant des composés paraffiniques sera plus performant lors d'un démarrage à froid.

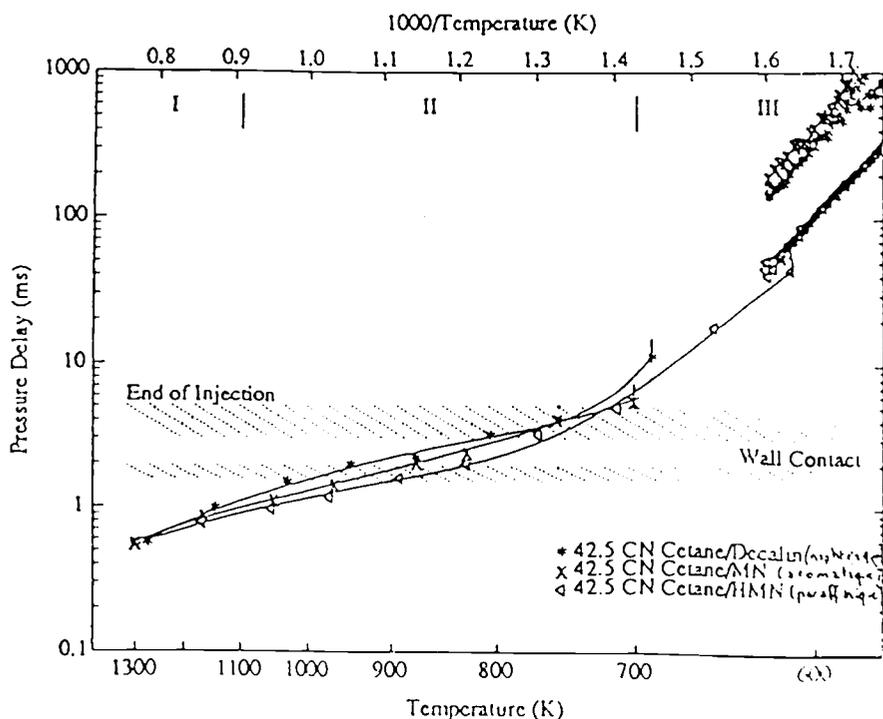


Figure {II.14} : Influence de la nature du carburant sur le délai d'auto-inflammation (Hoskin et col. [5])

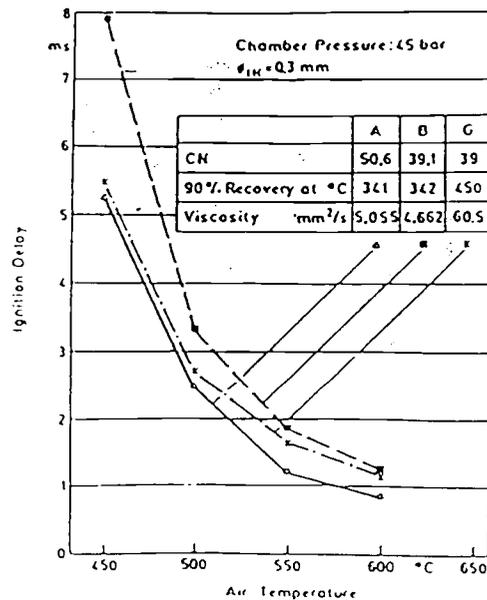
Gülder et col. [17] ont cherché à lier la structure chimique même du combustible (hydrocarbure mono ou polyaromatique, position sur un cycle d'un groupe particulier : H, CH₂, CH₃, ...) au délai d'auto-inflammation. Ils ont constaté qu'un ajout de différents produits

à un gazole de référence entraînait une évolution du délai d'auto-inflammation :

- ajout d'un alcane normal (ou paraffine), de formule générale C_nH_{2n+2} : les qualités d'inflammation du gazole sont meilleures, et ce d'autant plus que le nombre d'atomes de carbone de l'alcane ajouté est important ;
- ajout d'un iso-alcane (alcane ramifié) : l'addition d'un tel composé augmente le délai d'auto-inflammation, excepté si les ramifications sont concentrées à une extrémité d'une longue chaîne de carbone ;
- ajout d'un cycloalcane, de formule générale C_nH_{2n} ou d'un aromatique, de formule générale C_nH_{2n-6} (hydrocarbure dérivé du benzène C_6H_6) : en général, on observe une diminution de l'indice de cétane, qui se traduit par une augmentation du délai d'auto-inflammation, à moins que le noyau ajouté possède une longue chaîne d'alcane normal.

II.2.3 - Viscosité

Pischinger et col. [8] ont observé dans une chambre à haute pression l'effet de la viscosité sur le délai d'auto-inflammation. Ils ont considéré trois gazoles dont les caractéristiques sont indiquées sur la figure {II.15}.



*Figure {II.15} : Influence de la viscosité sur le délai d'auto-inflammation
(Pischinger et col. [8])*

Les carburants A et B présentent une viscosité comparable à celle des gazoles couramment utilisés alors que le troisième combustible testé a une viscosité beaucoup plus élevée. Ils ont observé que la viscosité semblait jouer un rôle surtout à basse température, le délai du gazole G étant alors proche de celui du gazole A, qui a néanmoins un indice de cétane supérieur de

11 points environ. A haute température, les valeurs des délais des carburants B et G (qui ont le même indice de cétane) sont sensiblement identiques. La viscosité ne semble donc plus jouer de rôle significatif. Heywood [10] a également fait cette constatation sur moteur chaud.

II.2.4 - Additifs

Nous nous attacherons à décrire dans ce paragraphe uniquement l'effet des additifs procétane sur le délai d'auto-inflammation d'un carburant.

Afin d'améliorer les qualités d'auto-inflammation des gazoles, de nombreux additifs leur sont ajoutés. Il s'agit de peroxydes organiques, de nitrates, de nitrites et de divers composés soufrés. Les plus souvent utilisés sont les nitrates d'alkyles (nitrates d'iso-propyle, d'octyle, d'hexyle). 0,5 % en volume d'additif augmente d'environ 10 points l'indice de cétane d'un combustible, bien que l'efficacité d'une additivation dépende de la composition du gazole initial (Heywood [10]).

Il est généralement admis que ces additifs agissent par la création de radicaux libres pendant la phase de pré-combustion. La présence de ces radicaux libres accélère les réactions en chaîne conduisant à l'auto-inflammation. Leur action sur le délai physique semble être négligeable. Le mécanisme exact par lequel ils interviennent sur le délai d'auto-inflammation est encore mal connu. Il semble néanmoins que la vitesse à laquelle se décompose la plupart de ces additifs et la quantité de radicaux libres formés ne jouent pas de rôle important dans ce mécanisme (Clothier et col. [18]). L'inflammation serait plutôt influencée par des produits de décomposition secondaires, de type peroxyde RO_2 ou aldéhyde $RCOH$ (R représentant un radical alkyl C_nH_{2n+1}).

Effet de différents additifs sur un même carburant

Clothier et col. [18] ont considéré l'effet de cinq additifs sur le délai d'auto-inflammation d'un combustible présentant un indice de cétane de 43. Les additifs testés sont : le nitrate d'iso-octyle, le peroxyde de di-t-butyle, le perbenzoate de t-butyle, le di-t-butylperoxy-cyclohexane et le di-t-butylperoxy, triméthyl cyclohexane, leur teneur variant entre 1 et 10 % en volume. Les résultats obtenus avec ces différents additifs sont semblables : une teneur de plus en plus importante en additif permet de diminuer progressivement le délai d'auto-inflammation du combustible. L'effet du peroxyde de di-t-butyle est donné à titre d'exemple dans le tableau {II.1}.

Tous les additifs ne présentent pas la même efficacité. D'après Clothier et col. [18], les additifs les plus performants sont, par ordre croissant : le di-t-butylperoxy, triméthyl

cyclohexane, le di-t-butylperoxy-cyclohexane, le perbenzoate de t-butyle, le peroxyde de di-t-butyle et le nitrate d'iso-octyle.

% peroxyde de di-t-butyle	délai d'auto-inflammation
0	de 8 à 10 ms
1	7 ms
2	5 ms
10	2,8 ms

Tableau {II.1} : Effet de la teneur en peroxyde de di-t-butyle sur le délai d'auto-inflammation d'un combustible (Clothier et col. [18])

Comparaison des qualités d'auto-inflammation de deux carburants additivé et non additivé de même indice de cétane

Pischinger et col [8] ont considéré deux combustibles ayant des indices de cétane différents (50,6 et 39,1 respectivement). Ils ont ajouté dans le combustible ayant l'indice de cétane le plus bas un additif (mélange de nitrates d'octyle à 0,57 % en volume) afin de porter cet indice à 50,6. Pischinger et col [8] ont alors comparé les délais d'auto-inflammation des deux combustibles dans une chambre à haute pression. Les délais obtenus pour les deux combustibles sont identiques à basse température (≤ 425 °C) et à haute température (≥ 525 °C) (cf. figure {II.16}). En revanche, lorsque la température est comprise entre 425 et 525 °C, le délai d'auto-inflammation du combustible additivé est légèrement inférieur à celui du combustible sans additif.

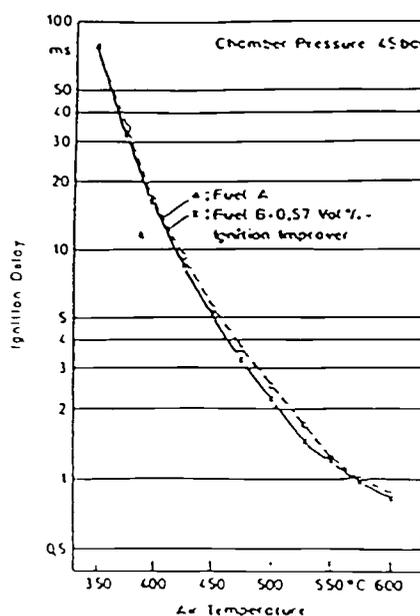


Figure {II.16} : Influence d'un additif (nitrate d'alkyle) sur le délai d'auto-inflammation [8]

Pischinger et col. [8] ont observé que les additifs n'ont sur moteur qu'une influence relative sur le délai à très basse température (dans les conditions de démarrage par exemple). Ceci peut être attribué aux effets de parois, qui ne sont pas présents dans les expériences effectuées dans la chambre à haute pression.

Effet d'un même additif procétane sur des carburants différents

Hoskin et col. [5] ont comparé l'effet d'un additif pro-cétane, le nitrate d'octyle, sur le délai d'auto-inflammation de plusieurs carburants de composition différente. Les tests ont été menés sur un gazole paraffinique, un gazole aromatique et un gazole naphénique. Ils ont permis de tirer les conclusions suivantes :

- la présence de l'additif dans chacun des trois types de gazole permet de diminuer sensiblement le délai d'auto-inflammation du combustible ;
- le rôle joué par l'additif n'est pas identique sur tout le domaine de température considéré (de 570 K à 1300 K). Dans le cas du carburant paraffinique notamment, l'effet de l'additif est beaucoup plus important à basse température ($T < 700$ K). Pour le carburant naphénique, c'est dans la zone intermédiaire ($700 \text{ K} < T < 1100 \text{ K}$) que l'amélioration est la plus importante ;
- les trois combustibles testés présentent une sensibilité différente à l'additif pro-cétane utilisé. Ce dernier améliore considérablement les qualités d'auto-inflammation du gazole naphénique, qui, comme nous l'avons vu dans le paragraphe II.2.2, présente les délais d'inflammation les plus longs, alors que les résultats obtenus avec le gazole paraffinique sont beaucoup moins probants. Ceci apparaît également au niveau des teneurs en additif. Les délais d'auto-inflammation du gazole paraffinique sont identiques que l'on ait ajouté 0,2 ou 0,45 % d'additif. En revanche, une augmentation identique de la teneur en additif dans le cas des combustibles aromatique et naphénique provoque une amélioration graduelle des qualités d'inflammation de ces combustibles. Chaque gazole présente donc une sensibilité à un additif dépendant de sa composition initiale. Ceci est d'ailleurs confirmé par Claude [14]. En travaillant sur un carburant présentant une composition très éloignée de celle des carburants commerciaux, il a constaté que l'ajout de 0,74 % de nitrate d'isooctyle n'entraîne qu'une faible diminution du délai d'auto-inflammation du carburant (baisse de 10 % pour un indice de cétane passant de 40,5 à 54).

CHAPITRE III

MODELISATION DU DELAI D'AUTO-INFLAMMATION

De nombreuses études ont été menées afin de mieux connaître les différentes étapes de la combustion dans les moteurs Diesel : injection et évaporation du carburant, délai d'auto-inflammation, combustion en elle-même, formation des polluants. Les modélisations de ces différentes phases permettent ainsi de simuler un cycle moteur complet dans des conditions de fonctionnement variées, dans un souci d'optimisation du rendement et de réduction des émissions de polluants. Trois grands groupes de modélisation peuvent être considérés : les modèles empiriques, les modèles chimiques détaillés et les modèles semi-globaux.

III.1 - LES DIFFERENTES APPROCHES POSSIBLES

Différentes approches peuvent être utilisées afin de prédire le délai d'auto-inflammation d'un combustible.

La première approche consiste en la recherche d'une relation empirique relativement simple, permettant d'évaluer le délai d'auto-inflammation d'un carburant, à partir des seules conditions expérimentales essentielles telles que la température et la pression de l'air présent dans la chambre de combustion avant l'inflammation. Cette approche présente l'avantage de donner rapidement la valeur du délai d'auto-inflammation et elle peut être considérée comme satisfaisante dans un premier temps.

Néanmoins, lorsque l'on désire connaître de façon précise le délai d'auto-inflammation d'un combustible, une relation empirique ne suffit plus pour décrire le mécanisme complexe qu'est l'inflammation spontanée d'un gazole. Pour cette raison, des modèles phénoménologiques plus complets ont été envisagés. Ils comportent plusieurs centaines de réactions chimiques et permettent ainsi de décrire les différentes étapes conduisant à l'auto-inflammation. Initialement, ces mécanismes ont été développés pour étudier le cliquetis dans les moteurs à allumage commandé.

Bien que cette approche extrêmement détaillée de la modélisation de l'inflammation d'un carburant soit la plus exacte actuellement, elle est toutefois difficile à mettre en oeuvre dans un code de calcul tridimensionnel. En effet, le nombre important de réactions chimiques entrant en jeu implique des temps de calcul très longs ce qui limite en fait l'utilisation de tels modèles dans

le cadre d'une simulation complète d'un cycle moteur, comportant déjà lui-même une modélisation de l'injection et de la vaporisation du combustible, de la combustion, ... Ceci a conduit plusieurs auteurs à proposer une troisième approche : la prédiction du délai d'auto-inflammation à l'aide d'un mécanisme semi-global, dans lequel on ne considère alors plus qu'une dizaine de réactions chimiques judicieusement choisies. Ces modèles sont beaucoup plus faciles à implanter dans les codes de calcul tridimensionnels et permettent d'obtenir des résultats satisfaisants.

III.2 - LOIS EMPIRIQUES

Les lois empiriques rencontrées dans la littérature permettent de déterminer le délai d'auto-inflammation d'un carburant dans un domaine de température et de pression limité. De nombreux auteurs ont adopté cette approche et ont proposé différentes formulations.

III.2.1 - Relation de Wolfer

La première étude concernant le délai d'auto-inflammation et ses relations avec certains paramètres a été effectuée en 1938 par Wolfer [19].

III.2.1.1 - Formulation générale

Wolfer a utilisé une chambre à volume constant et a exprimé le délai en fonction de la température et de la pression. Il a proposé la formule suivante [20] :

$$\tau = A.P^{-m}.\exp\left(\frac{B}{T}\right) \quad (\text{III.1})$$

où : τ : délai d'auto-inflammation total (en ms)
 P : pression moyenne dans la chambre de combustion pendant le délai (en bar)
 T : température moyenne dans la chambre de combustion pendant le délai (en K)
 A, m, B : constantes dépendant du combustible et du dispositif expérimental

Cette relation tire son origine de l'expression de la vitesse de réaction. On peut en effet supposer que l'auto-inflammation a lieu quand un radical particulier, noté X, créé pendant le délai, est présent en quantité suffisante dans la chambre de combustion. Si la vitesse d'apparition de ce radical X est définie par :

$$\frac{d[X]}{dt} = k.\exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (\text{III.2})$$

la concentration critique $[X_0]$ atteinte au moment de l'inflammation se calcule en intégrant la relation suivante :

$$[X_0] = \int_0^{\tau} \frac{d[X]}{dt} \cdot dt = \int_0^{\tau} k \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \cdot dt \quad (\text{III.3})$$

D'où :

$$[X_0] = k \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \cdot \tau \quad (\text{III.4})$$

Le délai d'auto-inflammation τ s'exprime alors par la relation suivante, à partir de laquelle on peut déduire la relation de Wolfer (III.1) :

$$\tau = \frac{[X_0]}{k} \cdot \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right) \quad (\text{III.5})$$

Dans la relation de Wolfer (III.1), le terme B est donc proportionnel à l'énergie d'activation apparente du combustible :

$$B = E_a / R \quad (\text{III.6})$$

où : E_a : énergie d'activation apparente
 R : constante des gaz parfaits

Le terme de pression P^{-m} est quant à lui représentatif de la pression partielle d'oxygène dans la chambre de combustion.

III.2.1.2 - Valeurs des différentes constantes

Les paramètres A , B et m de la relation (III.1) sont identifiés à l'aide de résultats expérimentaux. Wolfer [20] a obtenu, après des essais en chambre à volume constant, l'expression suivante :

$$\tau = 0,44 \cdot P^{-1,19} \cdot \exp(4650/T) \quad (\text{III.7})$$

Par la suite, de nombreux auteurs ont utilisé la relation (III.1) et ont proposé de nouvelles valeurs pour les constantes A , B et m , correspondant à leurs conditions expérimentales. Le tableau {III.1} présente quelques résultats que l'on peut trouver dans la littérature.

Auteur	Conditions				Coefficients		
	Dispositif expérimental	Carburant	Domaine d'utilisation		m	A	B
			P (bar)	T (K)			
Woschni, cité par Thelliez et col. [21]					1,19	0,44	4650
Watson et col. [22]	Moteur Diesel à injection directe				1,02	3,45	2100
Shroff et col., cités par Thelliez et col. [21]					0,727	0,22	5500
Spadaccini et col. [7]	Écoulement permanent	Diesel n°2	10-30	650-900	2	$2,43 \cdot 10^{-9}$	20926
Spadaccini et col. [7]	Écoulement permanent	Diesel n°2	10-30	650-900	1	$4 \cdot 10^{-10}$	20080
Stringer, cité par Heywood [10]	Écoulement permanent	Diesel (IC 45 à 50)	30-60	770-980	0,757	0,0405	5473
Wolfer, cité par Heywood [10]	Chambre à volume constant	IC > 50	8-48	590-782	1,19	0,44	4650
Hiroyasu et col., cités par Heywood [10]	Chambre à volume constant	Kérosène	1-30	673-973	1,23	0,0276	7280
Pischinger et col. [8]	Chambre à volume constant				1,14	0,0081	7813
Ryan et col. [4]	Chambre à volume constant	IC 41,8	20,6	644-755			8904
		IC 44,4					8730
		IC 48,7					7182

Tableau {III.1} : Valeurs des constantes de la relation de Wolfer obtenues par différents auteurs

On remarque sur ce tableau que les valeurs obtenues par les différents auteurs sont relativement dispersées. Les écarts observés s'expliquent à deux niveaux différents :

- au point de vue expérimental : les dispositifs expérimentaux diffèrent en effet d'une étude à l'autre. Les pressions et températures apparaissant dans l'équation (III.1) et considérées par les auteurs ne sont pas toujours identiques (Craven et col. [23]). Wolfer [20], qui a travaillé sur chambre à volume constant, a proposé de considérer les grandeurs moyennes pendant le délai d'auto-inflammation alors que lors d'autres études menées sur moteur, ce sont les grandeurs au moment de l'injection qui ont été prises en compte. Des divergences dans la définition même du délai d'auto-inflammation ont elles aussi une influence sur les valeurs des paramètres de la relation (III.1).
- au niveau de l'identification des coefficients : généralement, ils sont obtenus à partir d'un ensemble de résultats expérimentaux, à l'aide d'une procédure de régression multidimensionnelle. L'utilisation de telles procédures ne permet pas de parvenir à une solution unique mais à plusieurs triplets de valeurs correspondant aux données expérimentales (Craven et col. [23]). Il est donc nécessaire, dans la plupart des cas, de donner aux coefficients des valeurs initiales les plus proches possibles des valeurs finales, qui doivent permettre de minimiser les écarts mesure - calcul sur tout le domaine étudié.

III.2.1.3 - Modifications apportées à la relation de Wolfer

Gülder et col. [17] ont utilisé la relation proposée par Wolfer sans la transformer mais en considérant que le terme B, dans lequel intervient l'énergie d'activation apparente E_a , n'est pas constant pour un combustible donné mais varie en fonction de la pression et de la température.

Pischinger et col. [8], après des études menées sur moteur et en chambre à volume constant, a constaté que l'on pouvait notablement améliorer la relation (III.1) de Wolfer en remplaçant le terme T de la formule de Wolfer par une différence de température $(T-T_0)$ où T_0 correspond à une température pour laquelle on n'a pas inflammation :

$$\tau = A \cdot P^{-m} \cdot \exp (B/(T-T_0)) \quad (\text{III.8})$$

Après identification des coefficients, Pischinger et col. [8] ont abouti à la relation :

$$\tau = 6,97 \cdot P^{-1,14} \cdot \exp (763,75/(T-538)) \quad (\text{III.9})$$

D'autres auteurs ont proposé de modifier plus fortement la relation de Wolfer. Fujimoto et col., cités par Thelliez et col. [21], ont ainsi distingué deux relations différentes selon la valeur de la pression initiale régnant dans la chambre de combustion avant injection. Pour une pression inférieure à 40 bar, ils ont utilisé la formulation de Wolfer [20]. Ils ont en revanche, pour les pressions supérieures à 40 bar, considéré que la pression n'intervenait plus :

$$P \leq 40 \text{ bar} : \quad \tau = A \cdot P^{-m} \cdot \exp\left(\frac{B}{T}\right) \quad (\text{III.1})$$

$$P > 40 \text{ bar} : \quad \tau = A \cdot \exp\left(\frac{B}{T}\right) \quad (\text{III.10})$$

En adoptant cette formulation, Zhu, cité par Thelliez et col. [21], a obtenu à l'aide d'essais réalisés sur un moteur Diesel à injection directe les relations suivantes :

$$P \leq 40 \text{ bar} : \quad \tau = 7,31 \cdot 10^{-3} \cdot P^{-0,55} \cdot \exp(5500/T) \quad (\text{III.11})$$

$$P \geq 40 \text{ bar} : \quad \tau = 9,01 \cdot 10^{-4} \cdot \exp(5500/T) \quad (\text{III.12})$$

Certains auteurs ont également proposé des formules plus complexes introduisant un délai physique et un délai chimique, ce dernier étant lui-même séparé en un délai de flamme froide et un délai de flamme bleue :

$$\tau = \tau_p + A_1 \cdot P^{-m_1} \cdot \exp(B_1/T) + A_2 \cdot P^{-m_2} \cdot \exp(B_2/T) \quad (\text{III.13})$$

Dans cette relation, le premier terme (τ_p) représente un délai physique permanent, évalué généralement à 0,5 ms, caractéristique de la formation du jet et indépendant de la pression, de la température et des conditions d'injection. Les résultats obtenus après identification varient d'un auteur à l'autre :

Woschni et col., cités par Thelliez et col. [21], proposent la loi suivante :

$$\tau = 0,5 + 0,135 \cdot P^{-0,7} \cdot \exp(7800/T) + 4,8 \cdot P^{-1,8} \cdot \exp(7800/T) \quad (\text{III.14})$$

alors que Miwa et col. [1] sont parvenus à :

$$\tau = 0,5 + 1,61 \cdot 10^{-4} \cdot P^{-1,10} \cdot \exp(7750/T) + 0,967 \cdot P^{-1,96} \cdot \exp(6090/T) \quad (\text{III.15})$$

Notons que cette relation (III.15) est valable pour des pressions comprises entre 19 et 55 bar, dans l'intervalle de température [750 K, 1000 K].

Thelliez et col. [21] ont légèrement simplifié la formule (III.13) en considérant

globalement le délai chimique. Ils sont parvenus à la relation suivante :

$$\tau = 0,5 + 5,06 \cdot 10^{-6} \cdot P^{-0,36} \cdot \exp(10150/T) \quad (\text{III.16})$$

III.2.1.4 - Introduction de paramètres supplémentaires

Afin de mieux prendre en compte les conditions moteur dans l'expression (III.1), certains auteurs ont introduit au niveau de la constante A de la relation de Wolfer un ou plusieurs paramètres supplémentaires.

C'est ainsi que Nikpour, cité par Thelliez et col. [21], a proposé la formulation suivante dans laquelle N représente la vitesse de rotation du moteur :

$$\tau = A \cdot P^{-0,469} \cdot (N/1000)^{-0,95} \cdot \exp(1005/T) \quad (\text{III.17})$$

Ahmed, cité par Thelliez et col. [21], a quant à lui fait intervenir, en plus de la vitesse de rotation N, la température de l'air de suralimentation T_s :

$$\tau = 9,426 \cdot P^{-0,482} \cdot (N/1000)^{-0,94} \cdot (T_s/300)^{-2,89} \cdot \exp(878/T) \quad (\text{III.18})$$

Hiroyasu et col. [24] ont introduit la richesse R_i :

$$\tau = 4 \cdot 10^{-3} \cdot P^{-2,5} \cdot R_i^{-0,4} \cdot \exp(4000/T) \quad (\text{III.19})$$

III.2.2 - Autres lois

III.2.2.1 - Approche intégrale

Heywood [10] a proposé une approche intégrale de la relation de Wolfer afin de prédire le délai d'auto-inflammation, de sorte que les variations de pression et de température ayant lieu pendant le délai soient prises en compte :

$$\int_{t_i}^{t_i+\tau} \frac{dt}{\tau(t)} = 1 \quad (\text{III.20})$$

avec : t_i : instant de début d'injection
 τ : délai d'auto-inflammation

τ (t) : délai exprimé en fonction du temps, obtenu à partir de la relation (III.1) dans laquelle on remplace P et T par leur expression en fonction du temps, en supposant un moteur idéal sans perte de chaleur et sans perte à travers les segments

La relation (III.20) présente l'avantage de prendre en compte l'effet des mouvements du piston sur le délai d'auto-inflammation, par variation de l'évolution de la température et de la pression pendant la phase de compression (Craven et col. [23]).

III.2.2.2 - Prise en considération des concentrations en oxygène et en carburant

Ryan et col. [4] ont proposé en 1988 de relier le délai d'auto-inflammation d'un combustible aux paramètres suivants : la température et la pression (ou la densité) de l'air ainsi que les concentrations en O₂ et en gazole du mélange. Ces paramètres sont considérés comme des variables indépendantes. La relation liant ces différentes variables est alors la suivante :

$$\tau_d = b_0 \cdot [O_2]^{b_1} \cdot [Fuel]^{b_2} \cdot \rho^{b_3} \cdot \exp\left(\frac{b_4}{T}\right) \quad (III.21)$$

avec :

- τ_d : délai d'auto-inflammation (en ms)
- $[O_2]$: concentration en O₂ (en mol / m³)
- $[Fuel]$: concentration en combustible (en mol / m³)
- ρ : densité du gaz (en kg / m³)
- T : température du gaz (en K)
- b_i : coefficients

Pour un combustible composé de 70 % d'hexadécane et de 30 % d'heptaméthylnonane, présentant un indice de cétane de 40,5, Ryan et col. [4] ont obtenu pour les différents coefficients b_i les valeurs suivantes :

$$\begin{aligned} b_0 &= 0,0221 \\ b_1 &= - 0,5324 \\ b_2 &= 0,0511 \\ b_3 &= 0,1346 \\ b_4 &= 5914 \end{aligned}$$

III.2.2.3 - Prise en considération du déplacement du piston et de l'indice de cétane du carburant

Hardenberg et col., cités par Heywood [10], ont proposé, après des essais réalisés sur moteur Diesel à injection directe, la formulation suivante :

$$0,006 \cdot N \cdot \tau = (0,36 + 0,22 Sp) \cdot \exp [E_a (1/RT - 1/17190)(21,2/(P-12,4))^{0,63}] \quad (\text{III.22})$$

- avec :
- τ : délai d'auto-inflammation (en ms)
 - T : température (en K)
 - P : pression (en bar)
 - Sp : vitesse moyenne du piston (en m / s)
 - R : constante des gaz parfaits ($R = 8,3143 \text{ J / mol.K}$)
 - N : vitesse de rotation du moteur (en tr / min)
 - E_a : énergie d'activation du carburant (en J / mol). $E_a = 618840 / (IC + 25)$

T et P peuvent être calculées à partir des relations :

$$T = T_i \cdot r_c^{\gamma-1} \quad (\text{III.23})$$

$$P = P_i \cdot r_c^{\gamma} \quad (\text{III.24})$$

où T_i et P_i sont les températures et pressions à l'admission, r_c le taux de compression et γ le coefficient polytropique.

Cette relation est valable dans un large domaine de température.

III.2.3 - Conclusions

Cette étude montre que de nombreux auteurs ont proposé une loi empirique pour déterminer le délai d'auto-inflammation d'un carburant. Cette approche, qui est la plus simple des trois et que nous décrivons dans ce chapitre, est toutefois, de par sa nature corrélatrice, d'un emploi limité. En effet, et la grande dispersion des valeurs obtenues pour les coefficients de ces lois en témoignent, il est très difficile d'extrapoler les résultats d'une identification donnée à un autre dispositif expérimental ou dans un domaine de température ou de pression plus étendu.

Cet inconvénient majeur a amené d'autres auteurs à orienter leur recherche vers une description plus fondamentale, basée sur la chimie du délai d'auto-inflammation, que nous allons maintenant aborder.

III.3 - MECANISMES CHIMIQUES DETAILLES

Ces mécanismes comportent toutes les réactions susceptibles d'être rencontrées lors de l'oxydation d'un hydrocarbure dans le domaine de température considéré. Les premiers mécanismes chimiques détaillés ayant été élaborés sont des mécanismes de haute température prenant en compte la chimie des flammes mais négligeant la chimie des radicaux peroxydes qui est à la base des mécanismes semi-globaux. Actuellement, des mécanismes plus complets sont développés. Ils permettent de prendre en compte à la fois les réactions de basse et de haute température.

Le nombre important de réactions (plusieurs centaines de réactions élémentaires peuvent en effet intervenir) et les nombreuses espèces chimiques considérées rendent ces mécanismes détaillés d'un emploi beaucoup plus lourd que les mécanismes réduits. Ils sont néanmoins plus précis et permettent notamment de tenir compte de la nature exacte du carburant (mélange d'hydrocarbures, ajout d'additifs, ...).

III.3.1 - Mécanisme de haute température de Westbrook

Les mécanismes développés par Westbrook et col. [25] permettent de décrire l'oxydation de divers hydrocarbures : méthane, propane, butane, n-pentane, iso-octane, ... Plus la molécule initiale est complexe, plus le nombre de réactions chimiques intervenant dans le mécanisme est important.

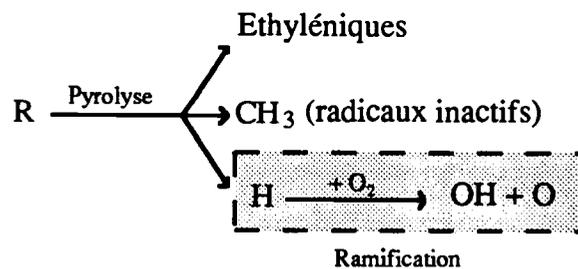


Figure {III.1} : Réactions à la base des mécanismes détaillés

A la base de ces mécanismes se trouve la réaction de pyrolyse des radicaux alkyles R formés pendant l'étape d'initiation [26], comme le montre le schéma de la figure {III.1}.

Ces réactions sont importantes pour des températures supérieures à 1100 K. En effet, pour des températures inférieures, les atomes H sont essentiellement consommés selon la réaction :



où M représente une espèce quelconque.

Dans le domaine des températures intermédiaires ($850 \text{ K} < T < 1000 \text{ K}$), la ramification intervient par la décomposition du peroxyde d'hydrogène [27] :



III.3.2 - Mécanisme de haute température de Warnatz

Le mécanisme proposé par Warnatz [28] en 1984 a été écrit de façon à pouvoir décrire l'auto-inflammation d'hydrocarbures de plus en plus lourds.

Pour les hydrocarbures comportant moins de cinq atomes de carbone, Warnatz [28] considère que l'étape initiale permettant l'obtention de radicaux alkyles par abstraction d'un atome d'hydrogène au carburant de départ est suivie par une succession de réactions transformant ces radicaux alkyles en radicaux de plus en plus petits, pour parvenir finalement aux radicaux CH_3 et C_2H_5 , dont l'oxydation est aujourd'hui relativement bien décrite.

Selon Warnatz [28], les hydrocarbures comportant cinq atomes de carbone au minimum se décomposeraient directement en CH_3 et C_2H_5 puis subiraient alors le même processus d'oxydation que les hydrocarbures plus légers.

III.3.3 - Mécanismes de haute et basse température

Les recherches récentes ont permis d'aboutir à des mécanismes applicables dans un large domaine de température [29]. Ils correspondent donc mieux aux conditions expérimentales rencontrées dans les moteurs à combustion interne. Ces modèles comportent de nombreuses réactions permettant de décrire les phénomènes ayant lieu dans les différents domaines de température. Des procédures automatiques ont été développées pour générer de tels mécanismes détaillés [30].

III.4 - MECANISMES SEMI-GLOBAUX

Les mécanismes semi-globaux utilisés actuellement comportent un nombre restreint de réactions globales permettant de représenter les divers types de réactions élémentaires ayant lieu réellement : initiation, propagation, ramification et rupture.

III.4.1 - Le modèle Shell

Le premier mécanisme proposé est celui développé dès 1975 par Halstead et col. [31] au Shell Research Center. Il est connu sous le nom de "modèle Shell". Il a été élaboré pour étudier le cliquetis dans les moteurs à allumage commandé et permet de décrire les différentes étapes de l'auto-inflammation.

Ce modèle est basé sur le mécanisme de ramification dégénérée de Semenov. Il incorpore un modèle thermique simplifié. Le mécanisme chimique comprend cinq espèces chimiques :

- RH : combustible, de formule générale C_nH_{2m}
- R : radical formé à partir du combustible
- B : agent de ramification
- Q : espèce intermédiaire
- P : produits de la combustion (CO , CO_2 , H_2O)

L'auto-inflammation est décrite à l'aide de huit réactions chimiques :

- une réaction d'initiation :



- deux réactions décrivant la propagation principale :



- deux réactions de propagation formant l'agent de ramification dégénéré :



- une réaction de ramification :



- deux réactions de rupture, l'une linéaire, l'autre quadratique :



Ce mécanisme relativement simple a donné de bons résultats dans différents environnements expérimentaux (machine à compression rapide, appareillage basse pression, ...). Il a été utilisé par la suite dans de nombreuses études : Natarajan et col. [32],

Kong et col. [9], ... Certains auteurs l'ont modifié afin de l'insérer dans un code de calcul (Schäpertöns et col., cités par Theobald [33]) et afin de l'adapter au cas de l'auto-inflammation Diesel (Theobald [33]).

III.4.2 - Modifications apportées par Schäpertöns au modèle Shell

Afin d'insérer le modèle développé par Halstead et col. [31] dans un code de calcul, Schäpertöns et col., cités par Theobald [33], lui ont apporté quelques modifications. Ils ont tout d'abord équilibré en masse les huit réactions chimiques et ont ensuite fourni un certain nombre de règles à observer en vue de l'application du modèle dans un code tridimensionnel.

Pour équilibrer en masse les équations (III.30) à (III.33), ils ont défini les masses molaires des espèces B, R, Q et P :

$$M_R = (M_{RH} + M_{O_2}) / 2 \quad (III.37)$$

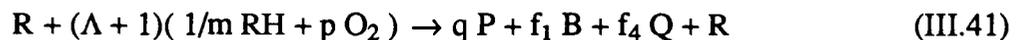
$$M_B = 2 \cdot M_R \quad (III.38)$$

$$M_Q = M_B \quad (III.39)$$

$$M_P = (n/m \cdot l \cdot M_{CO} + n/m \cdot (1 - l) \cdot M_{CO_2} + M_{H_2O}) / q \quad (III.40)$$

où : M_X : masse molaire de l'espèce X
 l est tel que $[CO]/[CO_2] = l / (1 - l)$
 $q = n/m + 1$

La matière utilisée pour former ces espèces chimiques provenant obligatoirement du combustible initial et de l'oxygène présent dans la chambre de combustion, les réactions (III.30), (III.31) et (III.32) ont par conséquent été remplacées par la réaction suivante :



avec : $\Lambda = (f_1 M_B + f_4 M_Q) / (M_{RH} / m + p M_{O_2})$
 $p = (n(2 - l) + m) / 2m$
 f_i : coefficient intervenant dans les vitesses de réaction

Schäpertöns et col., cités par Theobald [33], ont donc obtenu un modèle à six réactions permettant de simuler le cliquetis d'un moteur à allumage commandé. Pour une application au moteur Diesel, quelques modifications supplémentaires sont nécessaires en vue de l'insertion du modèle dans un code tridimensionnel. Ces changements ont été décrits par Theobald [33].

III.4.3 - Modifications apportées par Theobald au modèle Shell

Le modèle d'auto-inflammation élaboré par Halstead et col. [31] a été développé pour étudier le cliquetis dans les moteurs à allumage commandé. Bien que le mécanisme chimique conduisant à l'auto-inflammation dans les moteurs Diesel puisse s'apparenter à celui décrivant le cliquetis dans les moteurs à essence, quelques modifications ont dû être apportées au modèle initial d'Halstead et col. [31] pour qu'il puisse être appliqué au cas des moteurs à allumage par compression.

Theobald [33] a donc considéré le mécanisme d'Halstead et col. [31] modifié par Schäpertöns et col., cités par Theobald [33], et a proposé d'effectuer des modifications à deux niveaux différents. Contrairement au cas du moteur à allumage commandé où l'on est en présence d'un mélange homogène d'air et de carburant avant l'inflammation, la chambre de combustion d'un moteur Diesel se caractérise par une hétérogénéité de la température et des concentrations. Cette hétérogénéité a amené Theobald [33] à limiter le nombre de cellules considérées pour les différents calculs à chaque pas de temps. Si, à un pas de temps donné, le mélange dans une cellule est pauvre, si la concentration en oxygène est très faible ou bien si la température est trop basse par exemple, aucun calcul ne sera effectué dans cette cellule à ce pas de temps. Le deuxième ensemble de modifications envisagées concerne les combustibles. Les carburants utilisés dans les deux types de moteurs n'étant pas identiques, il est donc nécessaire d'intervenir au niveau de l'équilibre massique des réactions chimiques ainsi qu'au niveau des constantes de vitesse de réaction.

III.4.4 - Modèle de Cox

Le modèle Shell [31] est à la base du modèle développé par Cox et col. [34] en 1985. Le mécanisme chimique que ces derniers ont considéré est plus détaillé que celui décrit initialement par Halstead et col. [31] et tient compte de nouvelles données cinétiques concernant l'oxydation des hydrocarbures dans des domaines de basse température.

Le mécanisme chimique comporte quinze réactions et dix espèces chimiques, les espèces B, Q et R du modèle Shell étant en partie identifiées. Il est représenté de façon schématique sur la figure {III.2}.

La réaction d'initiation permet la création de deux radicaux :



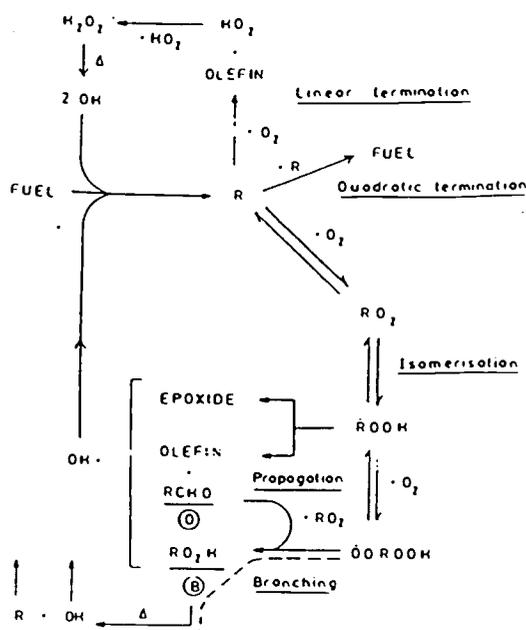


Figure {III.2} : Schéma du mécanisme chimique proposé par Cox et col. [34]

La propagation s'effectue par l'intermédiaire des réactions suivantes :



Cette dernière est suivie par une réaction d'isomérisation du radical RO_2 en ROOH° . Les réactions transformant ROOH° en OH et en différents produits d'oxydation constituent la chaîne de propagation principale.

L'agent de ramification B du modèle Shell est identifié comme étant un hydroperoxyde RO_2H . L'espèce intermédiaire Q est quant à elle explicitée sous la forme d'un aldéhyde RCOH . Elle est à l'origine du second stade de l'inflammation.

Cox et col. [34] ont également inséré dans leur mécanisme des réactions faisant intervenir le peroxyde d'hydrogène H_2O_2 , qui semble jouer un rôle important au niveau du deuxième stade de l'inflammation.

On retrouve enfin des réactions de rupture linéaire et quadratique.

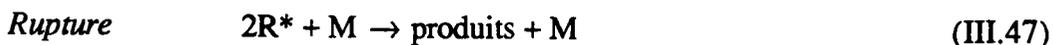
III.4.5 - Modèle de Keck

Le mécanisme auquel sont parvenus Keck et col [35] comprend 19 réactions et 19 espèces chimiques. Il est basé sur les études de Benson [36] et est similaire à celui de Cox et col. [34]. Il permet de reproduire l'auto-inflammation en deux stades d'hydrocarbures lourds à haute pression et basse température.

III.4.6 - Modèle de Zellat

Contrairement au modèle Shell [31] qui a été élaboré pour étudier le cliquetis dans les moteurs à allumage commandé et qui a ensuite été adapté au cas des moteurs Diesel, le modèle de Zellat et col. [37] a été développé directement pour les moteurs à allumage par compression.

Le mécanisme chimique comporte quatre réactions :



avec les notations suivantes :

- RH : combustible
- R* : radical formé à partir du combustible
- M : molécule quelconque
- ΔQ : énergie dégagée par la réaction de propagation

L'étape d'initiation crée un nombre réduit de radicaux R*. L'étape de propagation permet de transformer le carburant et l'oxygène en produits finaux de la combustion CO₂ et H₂O, tout en régénérant le radical R*. L'étape de ramification augmente la quantité de radicaux alors que l'étape de rupture se caractérise par leur disparition.

Ce modèle a notamment été utilisé par Pinchon [38] et Néraud et col. [39].

CONCLUSIONS DE LA PREMIERE PARTIE

Nous avons vu dans les chapitres I et II que le délai d'auto-inflammation d'un carburant est influencé par deux types de paramètres : les paramètres de fonctionnement et les paramètres carburants.

Parmi les paramètres de fonctionnement, les études réalisées jusqu'à présent ont permis de montrer le rôle prépondérant joué par la température initiale régnant dans la chambre de combustion avant l'injection du carburant. L'effet de paramètres secondaires tels que la concentration en oxygène et l'impact à la paroi est également bien défini.

Si tous les auteurs s'accordent sur ces points, il n'en est pas de même pour d'autres paramètres tels que la pression chambre, la vitesse de l'air ou la pression d'injection. Les observations faites par les différents chercheurs sont en effet parfois contradictoires et d'autres études sont donc nécessaires afin de déterminer le rôle exact joué par ces trois paramètres sur le délai d'auto-inflammation.

Le dispositif expérimental utilisé dans ce travail est une chambre de combustion à volume constant. Ce dispositif ne permet pas d'observer l'effet des mouvements d'air sur le délai d'auto-inflammation. Il est en revanche tout à fait adapté à l'étude de l'influence de la pression chambre et de la pression d'injection. Nous tenterons donc de confirmer ou d'infirmer les résultats issus de la littérature.

Le délai d'auto-inflammation est également fortement influencé par les caractéristiques du carburant. L'étude bibliographique semble indiquer que l'indice de cétane ne permet pas de caractériser complètement un gazole. Il est en effet nécessaire de tenir compte des propriétés physico-chimiques, ou de la composition, du carburant. L'influence de la composition d'un carburant sur son délai n'est pas encore totalement connue. Nous nous attacherons donc à l'étudier de façon précise, en utilisant une douzaine de carburants différents.

L'étude bibliographique a fait apparaître des lacunes au niveau des travaux antérieurs. En effet, il est difficile de comparer les résultats des différents auteurs car ces derniers omettent souvent de préciser des conditions expérimentales essentielles, nécessaires si l'on veut pouvoir effectuer un rapprochement entre deux études. Nous décrirons donc le plus précisément

possible les conditions expérimentales dans lesquelles les essais ont été réalisés.

Le chapitre III a permis de recenser les différentes approches utilisées actuellement pour modéliser le délai d'auto-inflammation. L'approche la plus simple, celle de Wolfer, consiste en l'établissement d'une loi empirique. Elle peut être considérée comme satisfaisante dans un premier temps. Son inconvénient majeur est son domaine d'utilisation restreint : elle n'est en effet valable que dans des conditions expérimentales données, et uniquement pour le carburant ayant servi à déterminer les coefficients de la loi empirique. Les approches détaillées, dans lesquelles interviennent des mécanismes chimiques plus ou moins importants, sont beaucoup plus précises mais sont soit lourdes à mettre en œuvre quand elles comportent plus de cent réactions, soit trop générales lorsqu'il s'agit de mécanismes semi-globaux tels ceux de Halstead ou Zellat.

Nous proposerons ici deux modélisations différentes du délai d'auto-inflammation. Il nous a tout d'abord semblé intéressant d'introduire dans la loi empirique proposée par Wolfer des termes supplémentaires, afin notamment de pouvoir prédire le délai d'auto-inflammation de différents gazoles. Un modèle plus détaillé sera ensuite utilisé. Ce modèle, intermédiaire entre les mécanismes globaux et semi-globaux, comporte 34 réactions chimiques et permet de prendre en compte la composition du carburant. Ce modèle sera comparé aux modèles semi-globaux de Westbrook et de Zellat.

DEUXIEME PARTIE

ETUDE EXPERIMENTALE

CHAPITRE IV

DISPOSITIF EXPERIMENTAL

L'étude bibliographique qui vient d'être menée montre que de nombreux paramètres influencent le délai d'auto-inflammation d'un carburant. Il faut en effet considérer tout d'abord toutes les caractéristiques du carburant en lui-même : volatilité, viscosité, indice de cétane ... Il convient ensuite de prendre en compte les conditions d'injection et les conditions de fonctionnement : température et pression régnant dans la chambre de combustion avant injection, taux de swirl ... Si l'étude de l'influence des caractéristiques des carburants et des conditions d'injection peut être facilement réalisable directement sur moteur, l'effet des conditions de fonctionnement est plus délicat à mettre en évidence, les différents paramètres intervenant simultanément et de façon interdépendante. C'est pourquoi de nombreuses recherches ont été menées sur des chambres de combustion à volume constant ([3], [4], [5], [9]). Celles-ci permettent de recréer les conditions existant dans la chambre de combustion d'un moteur Diesel et de mieux maîtriser les différents facteurs intervenant sur le délai.

Afin d'étudier le délai d'auto-inflammation de différents carburants, une chambre de combustion à volume constant a donc été conçue et réalisée. Son diamètre intérieur (80 mm) a été déterminé de façon à approcher les diamètres de cylindre habituellement utilisés sur moteur réel. Afin de s'affranchir des effets provoqués par l'impact du jet à la paroi, la longueur intérieure de la chambre a été choisie égale à 260 mm. L'injection de carburant est effectuée au moyen d'un système d'injection monocoup. Un système d'acquisition permet de relever les grandeurs caractéristiques d'un essai.

IV.1 - DESCRIPTION

Les caractéristiques des différents éléments composant le dispositif expérimental sont décrites de façon précise dans l'annexe 4.

IV.1.1 - Chambre de combustion

La chambre à volume constant, représentée sur la figure {IV.1}, est constituée de trois éléments principaux : un manchon cylindrique **1** fermé à ses extrémités par les brides **2** et **3**. La bride **2** supporte un porte-injecteur **4** et un injecteur **5**. Cette bride est équipée d'un système de refroidissement par eau **6**. Ce système de refroidissement permet de maintenir l'injecteur et le

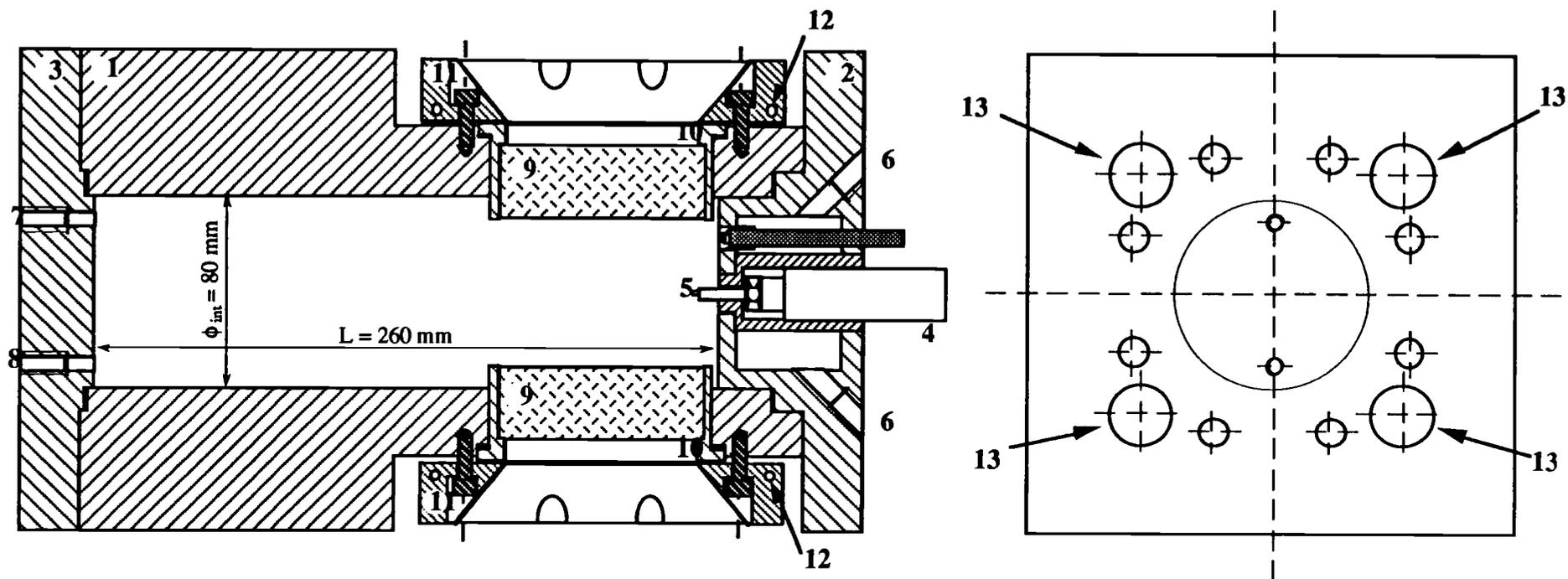


Figure {IV.1} : Schéma de la chambre de combustion à volume constant

gazole qu'il contient à des températures proches de 80 °C, afin d'empêcher l'évaporation du carburant dans l'injecteur. La bride 3 reçoit les raccords d'admission d'air frais 7 et d'échappement des gaz brûlés 8.

Afin de visualiser la pulvérisation du gazole et la combustion lors des essais, deux hublots 9 ont été montés sur le manchon cylindrique 1. Ces deux hublots sont diamétralement opposés et disposés près du nez de l'injecteur 5. Ils permettent ainsi de suivre l'évolution du jet de carburant depuis son introduction dans la chambre jusqu'à la fin de la combustion. Ils sont soumis à des contraintes sévères. La température des parois de la chambre de combustion peut en effet s'élever jusqu'à près de 900 K et la pression dans la chambre peut quant à elle atteindre 65 bar. Afin de résister à de telles contraintes expérimentales, ces hublots ont été réalisés en Pyrex. Ils sont montés par collage dans les porte-hublots 10. Le collage des hublots dans les porte-hublots pose un problème important concernant le choix du type de colle. La colle choisie doit en effet être utilisable à haute température (de l'ordre de 900 K). Elle doit également permettre l'étanchéité à haute pression (65 bar). Il existe dans le commerce des colles résistant aux hautes températures. Il s'agit principalement de colles céramiques qui résistent jusqu'à 1800 K environ. Après une série de tests, ces colles ne se sont pas avérées satisfaisantes, ne permettant pas d'assurer une étanchéité à pression élevée. Une colle silicone a alors été testée. Sa limite d'utilisation en température est nettement inférieure aux colles céramiques mais elle résiste convenablement aux pressions élevées. Les essais réalisés avec cette colle ont montré qu'elle rend la chambre de combustion étanche jusqu'à une température de l'ordre de 550 K. Au dessus de cette température, la colle se détériore et devient inutilisable. Néanmoins, aucune colle ne permettant à la fois de répondre aux contraintes de température et de pression existant dans la chambre de combustion, c'est cette colle silicone qui a été utilisée dans ce travail. Pour limiter la température et éviter qu'elle ne se détériore, les brides 11 maintenant l'ensemble hublot - porte-hublot sur la bombe sont refroidies par une circulation d'eau 12.

IV.1.2 - Dispositif de chauffage

Afin de réaliser les conditions de température existant dans un moteur Diesel, huit résistances chauffantes ont été placées dans la masse même de la bombe. Ces résistances cylindriques ont été disposées dans des alésages 13 répartis de façon uniforme autour de la chambre de combustion (cf. figure {IV.1}). Afin de limiter les pertes thermiques avec le milieu ambiant, un isolant a été disposé tout autour de la chambre de combustion. Il s'agit d'un papier céramique dont les caractéristiques sont décrites dans l'annexe 4.

IV.1.3 - Systèmes d'injection

Deux systèmes d'injection sont installés sur le dispositif expérimental. Ces deux systèmes

peuvent être utilisés indifféremment et permettent l'injection monocoup nécessaire dans le cadre de notre étude.

Le premier système est constitué par une pompe monocoup à armement manuel. Le schéma de la figure {IV.2} montre son principe de fonctionnement. Après que la pompe monocoup ait été armée manuellement par l'opérateur (par l'intermédiaire d'un circuit hydraulique), l'ouverture de l'électrovanne, commandée à partir du pupitre de contrôle, permet d'actionner le vérin pneumatique qui déclenche l'injection. La quantité injectée avec ce système et la durée d'injection sont constantes.

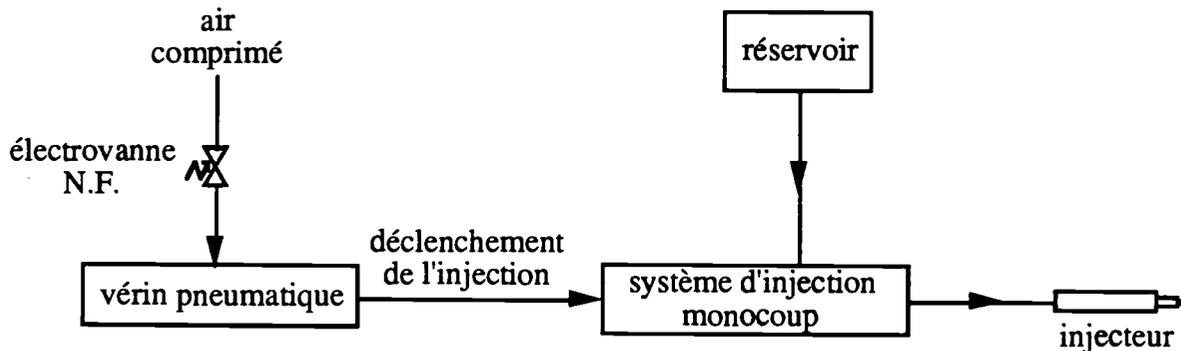


Figure {IV.2} : Schéma du système d'injection monocoup

Le second système repose sur une pompe d'injection classique. Il est décrit sur la figure {IV.3}. La pompe d'injection débite en permanence dans l'injecteur secondaire, dont le tarage est inférieur à celui de l'injecteur principal. Lorsque l'on désire injecter dans la chambre de combustion, on alimente l'électrovanne normalement ouverte pendant un intervalle de temps correspondant à la durée d'injection. L'électrovanne étant fermée, le gazole est alors dirigé vers l'injecteur principal. La quantité injectée et la durée d'injection sont constantes.

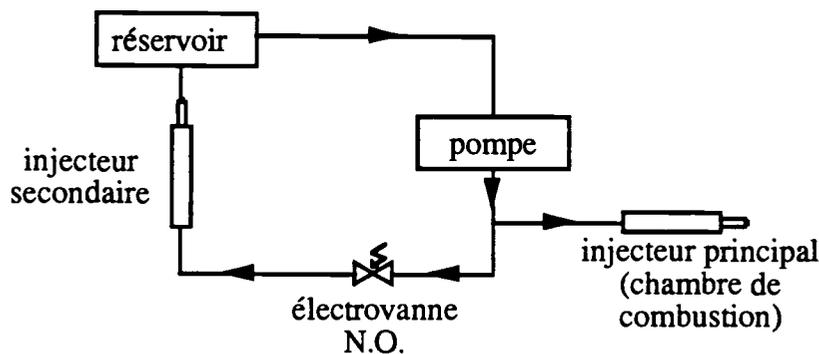


Figure {IV.3} : Circuit d'injection (pompe classique)

IV.2 - INSTRUMENTATION

Le schéma de la figure {IV.4} présente le dispositif expérimental complet, avec les différents systèmes d'acquisition, de mesure et de commande mis en place.

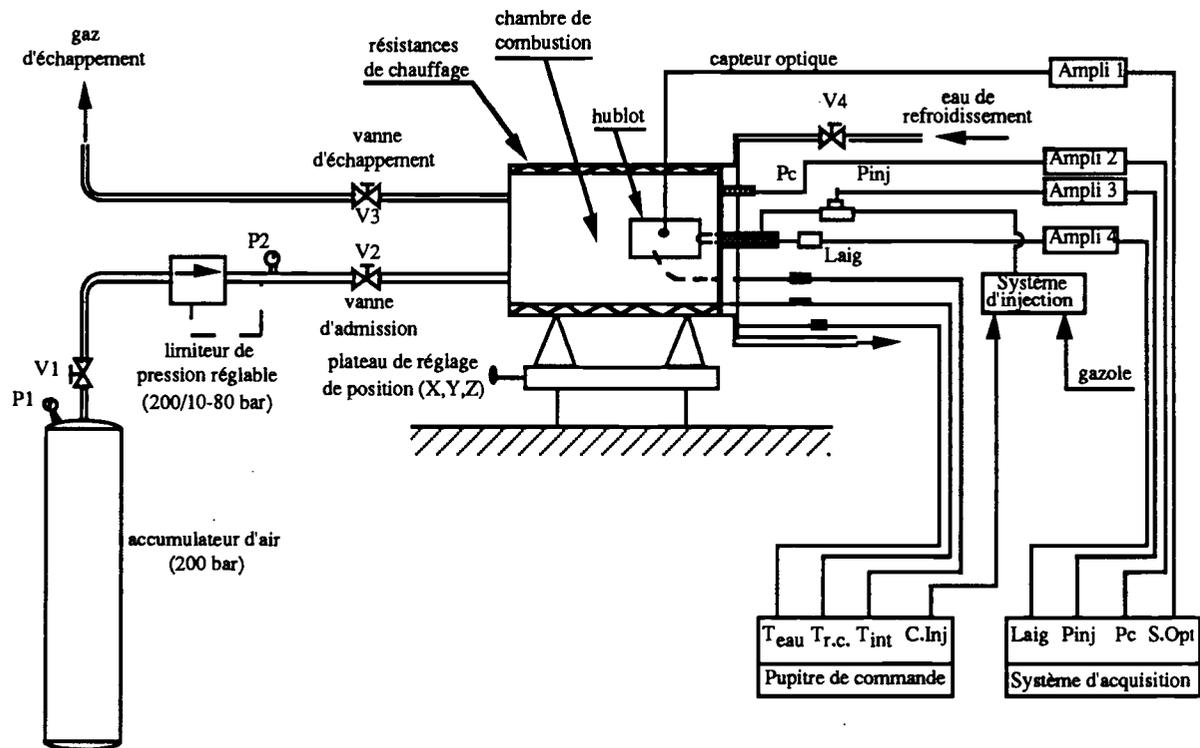


Figure {IV.4} : Synoptique des systèmes d'acquisition, de mesure et de commande du dispositif expérimental

Le banc d'essais utilisé est équipé de façon à permettre la détermination de différents délais d'auto-inflammation : délai de pression, délai optique et délai de dégagement de chaleur apparent. Pour mesurer ces trois délais, il est nécessaire d'enregistrer pour chaque essai l'évolution de la pression dans la chambre pendant la combustion, l'instant où la flamme apparaît et les caractéristiques de l'injection :

- la pression dans la chambre de combustion est mesurée à l'aide d'un capteur piézo-électrique miniaturisé relié à un amplificateur de charge ;
- l'apparition d'une flamme visible est détectée par un capteur optique placé en face d'un des hublots ;
- un capteur à jauges de contrainte placé sur le porte-injecteur et relié à un pont amplificateur permet d'accéder à la pression d'injection ;
- la levée d'aiguille de l'injecteur est enregistrée à l'aide d'un capteur inductif relié à un amplificateur.

Les capteurs utilisés sont décrits dans l'annexe 5.

Les différents signaux sont enregistrés à l'aide d'un système d'acquisition constitué par un micro-ordinateur sur lequel est implantée une carte d'acquisition rapide. La fréquence maximale d'acquisition utilisée est égale à 10 kHz.

En plus de ces quatre caractéristiques, nous relevons pour chaque point expérimental, une fois qu'elles sont stabilisées, deux grandeurs indispensables :

- la température initiale régnant dans la chambre de combustion avant l'injection : elle est mesurée grâce à un thermocouple type J placé au centre de la chambre de combustion au niveau des hublots ;
- la pression initiale : elle est relevée sur le manodétendeur disposé sur l'accumulateur d'air.

La température au niveau des résistances chauffantes est contrôlée à l'aide d'un thermocouple de type J, placé au contact d'une des résistances et associé à un système de régulation électronique.

IV.3 - PROCEDURE EXPERIMENTALE ET TRAITEMENT DES DONNEES

IV.3.1 - Mode opératoire

Le dispositif expérimental ne permet pas directement de fixer la température à l'intérieur de la chambre. Celle-ci est en effet fonction de la température au niveau des résistances chauffantes. Ceci impose certaines précautions lors de la réalisation d'un essai. Il convient donc de respecter le mode opératoire précis suivant.

Lorsque la température au niveau des résistances chauffantes a atteint la valeur désirée, la vanne d'échappement est fermée et la chambre de combustion est alors remplie d'air à la pression souhaitée à l'aide de l'accumulateur. L'air se réchauffe progressivement au contact des parois chauffées. Il est nécessaire d'attendre quelques instants que sa température se stabilise avant de procéder à l'injection du gazole. Une fois que cette stabilisation est atteinte, la température à l'intérieur de la chambre est relevée. Le programme d'acquisition est ensuite chargé. Dans le cas où le système d'injection utilisé est la pompe monocoup, il convient d'armer alors manuellement ce système. L'ouverture (ou la fermeture, selon le système d'injection utilisé) de l'électrovanne permet de déclencher l'injection et l'acquisition. On procède enfin à l'évacuation des gaz brûlés en ouvrant la vanne d'échappement.

IV.3.2 - Traitement des données

Nous disposons pour chaque essai des grandeurs relevées manuellement : température et pression initiales, ainsi que des paramètres enregistrés : levée d'aiguille de l'injecteur, pression d'injection, pression chambre et réponse du capteur optique. Un enregistrement typique est donné sur la figure {IV.5}.

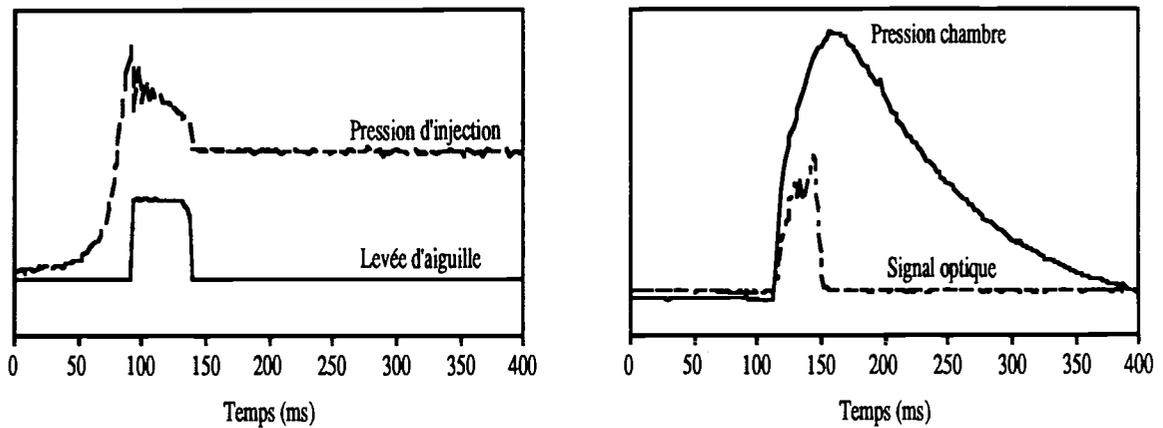


Figure {IV.5} : Enregistrements caractéristiques d'un essai

Les fichiers d'acquisition sont alors traités. Ils permettent d'accéder à la durée d'injection, à la pression d'injection et aux différents délais d'auto-inflammation.

CHAPITRE V

RESULTATS EXPERIMENTAUX

Ce chapitre présente les résultats expérimentaux obtenus avec la chambre de combustion à volume constant. Ces résultats ont permis d'étudier l'influence qu'ont sur le délai d'auto-inflammation les conditions expérimentales d'une part, les caractéristiques du carburant d'autre part.

V.1 - DETERMINATION DU DELAI D'AUTO-INFLAMMATION

Différentes définitions de délai d'auto-inflammation sont utilisées dans la littérature. Ces définitions diffèrent par la façon dont est déterminé le début de la combustion (cf. chapitre I). Selon le concept de délai adopté, le dépouillement des enregistrements expérimentaux peut faire apparaître des écarts plus ou moins importants au niveau des valeurs de délai.

Le dispositif expérimental utilisé permet de mesurer trois délais d'auto-inflammation : le délai de pression, le délai optique et le délai de dégagement de chaleur apparent. L'objectif de ce paragraphe est de réaliser une étude comparative de ces trois délais.

V.1.1 - Rappels

Les différents délais étudiés sont définis comme étant l'intervalle de temps qui sépare le début de l'injection, repérée par la levée brutale de l'aiguille de l'injecteur, de l'instant où :

- la pression reprend sa valeur initiale (avant injection) pour le délai de pression ;
- le signal optique augmente brusquement pour le délai optique ;
- le dégagement de chaleur apparent atteint 5 ‰ du dégagement de chaleur total dû à la combustion, pour le délai de dégagement de chaleur apparent.

Cette dernière définition est délicate à mettre en œuvre. S'il peut être facile d'exprimer a priori le dégagement total de chaleur, en l'approchant par l'énergie apportée par le carburant et réduite par le rendement de combustion (égal à 0,98 selon Heywood [10]), la fraction définissant le délai (5 ‰) peut être occultée par des oscillations parasites qui se superposent aux signaux expérimentaux. Aussi, selon Thelliez et col. [21], il s'avère plus judicieux de poursuivre le dépouillement jusqu'à atteindre 2 ‰ du dégagement de chaleur total puis de

revenir en arrière jusqu'à la première valeur définitivement positive du taux instantané de dégagement de chaleur. Cette méthode laisse supposer qu'un enregistrement de pression puisse éventuellement conduire à des valeurs négatives du dégagement de chaleur, dues à la baisse de pression provoquée par l'évaporation du carburant. On montre (cf. annexe 1) que le taux apparent de dégagement de chaleur est proportionnel à la variation de pression $\frac{dP}{dt}$.

Nous avons adopté pour le délai de dégagement de chaleur la définition proposée par Thelliez et col. [21], correspondant à la première valeur définitivement positive du taux de dégagement de chaleur. La figure {V.1} permet de visualiser cette définition.

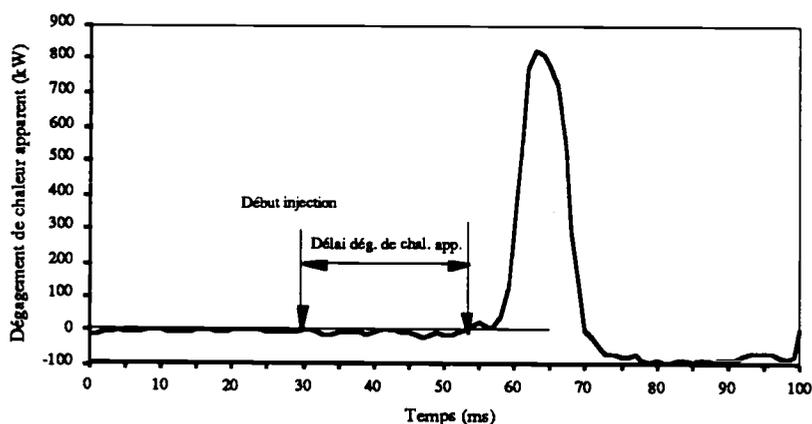


Figure {V.1} : Définition du délai de dégagement de chaleur apparent dans une chambre de combustion à volume constant selon Thelliez et col. [21]

V.1.2 - Conditions expérimentales

L'étude a été réalisée pour une pression initiale dans la chambre avant injection égale à 20 bar. Le carburant considéré est le n-dodécane. L'injection est effectuée à l'aide de la pompe monocoup, l'injecteur monotrou utilisé a une pression de tarage de 225 bar et un diamètre de 0,25 mm.

V.1.3 - Résultats

La figure {V.2} permet de comparer les mesures de délai d'auto-inflammation réalisées selon les trois définitions. Cette figure montre que le délai de dégagement de chaleur apparent est inférieur au délai de pression. Le délai optique est légèrement supérieur aux deux autres délais, ce qui est en désaccord avec les résultats issus de la littérature. Ceci peut s'expliquer par le fait que le capteur optique placé devant le hublot ne détecte pas l'inflammation en elle-même, cette inflammation ayant lieu en dehors du champ de vision délimité par les hublots. Il enregistre seulement le moment où la flamme arrive devant les hublots, après le début de la

combustion.

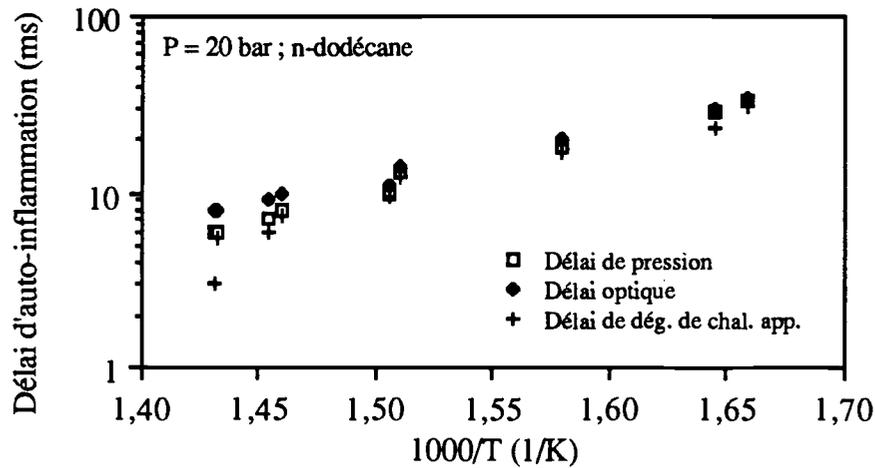


Figure {V.2} : Comparaison entre les différents délais mesurés (n-dodécane, P = 20 bar)

V.1.4 - Conclusions

Le capteur optique ne permettant pas de détecter l'inflammation, le délai optique ne sera pas considéré dans cette étude. Pour éviter de trop filtrer les signaux, afin de pouvoir calculer correctement les dérivées, et pour ne pas risquer de perdre des informations, nous avons préféré retenir le délai de pression. Ainsi, les délais sont déterminés par lecture directe sur l'enregistrement de pression.

L'intervalle de confiance à 95 % sur les mesures de délai d'auto-inflammation a été déterminé, en supposant que le délai suit une loi normale, à probabilité symétrique. Cet intervalle est défini de la façon suivante :

$$\left[\bar{\tau} - 1,96 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} ; \bar{\tau} + 1,96 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right] \quad (V.1)$$

où $\bar{\tau}$ représente la valeur moyenne du délai d'auto-inflammation en un point expérimental, σ l'écart-type et n le nombre de points expérimentaux. Les calculs effectués ont permis d'évaluer cet intervalle à +/- 6 % de la valeur moyenne du délai d'auto-inflammation.

V.2 - INFLUENCE DES CONDITIONS EXPERIMENTALES

Le dispositif expérimental utilisé permet de réaliser des essais dans des conditions de pression et de température données. L'influence de ces deux paramètres a donc pu être étudiée de façon indépendante. En plus de ces deux paramètres essentiels, le rôle joué par les principales caractéristiques de l'injection a également été considéré.

V.2.1 - Influence de la température régnant dans la chambre de combustion

Afin d'observer l'influence de la température initiale régnant dans la chambre de combustion sur le délai d'auto-inflammation des carburants, des essais ont été réalisés dans l'intervalle de température [573 K ; 773 K]. Douze carburants ont été utilisés lors de cette étude. Leurs caractéristiques sont présentées dans l'annexe 6.

Les résultats obtenus pour les différents carburants sont identiques et montrent que le délai d'auto-inflammation diminue lorsque la température initiale croît. En effet, une augmentation de température permet de réduire le délai physique, en améliorant notamment le processus d'évaporation du combustible, et le délai chimique, en accélérant les réactions conduisant à l'auto-inflammation.

L'ensemble des résultats expérimentaux correspondant aux différents carburants testés est présenté dans l'annexe 7. Les courbes des figures {V.3} à {V.5}, données à titre d'exemple, permettent d'observer un changement d'évolution du délai d'auto-inflammation en fonction de la température aux environs de $T = 645 \text{ K}$ ($1000/T = 1,55$). Ce phénomène, qui apparaît pour tous les carburants utilisés, est d'autant plus marqué que la pression initiale dans la chambre de combustion ou l'indice de cétane du carburant sont élevés.

C'est sur la courbe de la figure {V.5} correspondant à une pression initiale de 40 bar que l'on peut observer ce phénomène de la façon la plus nette. Deux zones de température sont clairement définies :

- pour $1000/T < 1,55$: on a une évolution linéaire du délai d'auto-inflammation en fonction de la température ;
- pour $1000/T > 1,55$: l'évolution n'est plus linéaire.

Une première hypothèse a été proposée afin d'expliquer cette évolution. On peut en effet considérer que le changement d'évolution observé correspond à l'instant où le jet de carburant atteint la paroi située à l'extrémité de la chambre à volume constant (ce qui laisserait supposer que la longueur de la chambre n'est pas suffisante pour s'affranchir des effets de parois). L'impact du jet à la paroi provoquerait alors l'augmentation du délai d'auto-inflammation que l'on remarque sur les figures {A7.1} à {A7.12}.

L'évolution du délai en fonction de la température serait donc dans ce cas séparée en deux zones suivant qu'il y ait ou non impact du jet à la paroi. La limite entre les deux zones serait en fait une limite temporelle, correspondant au temps nécessaire au jet pour atteindre la paroi. Cet

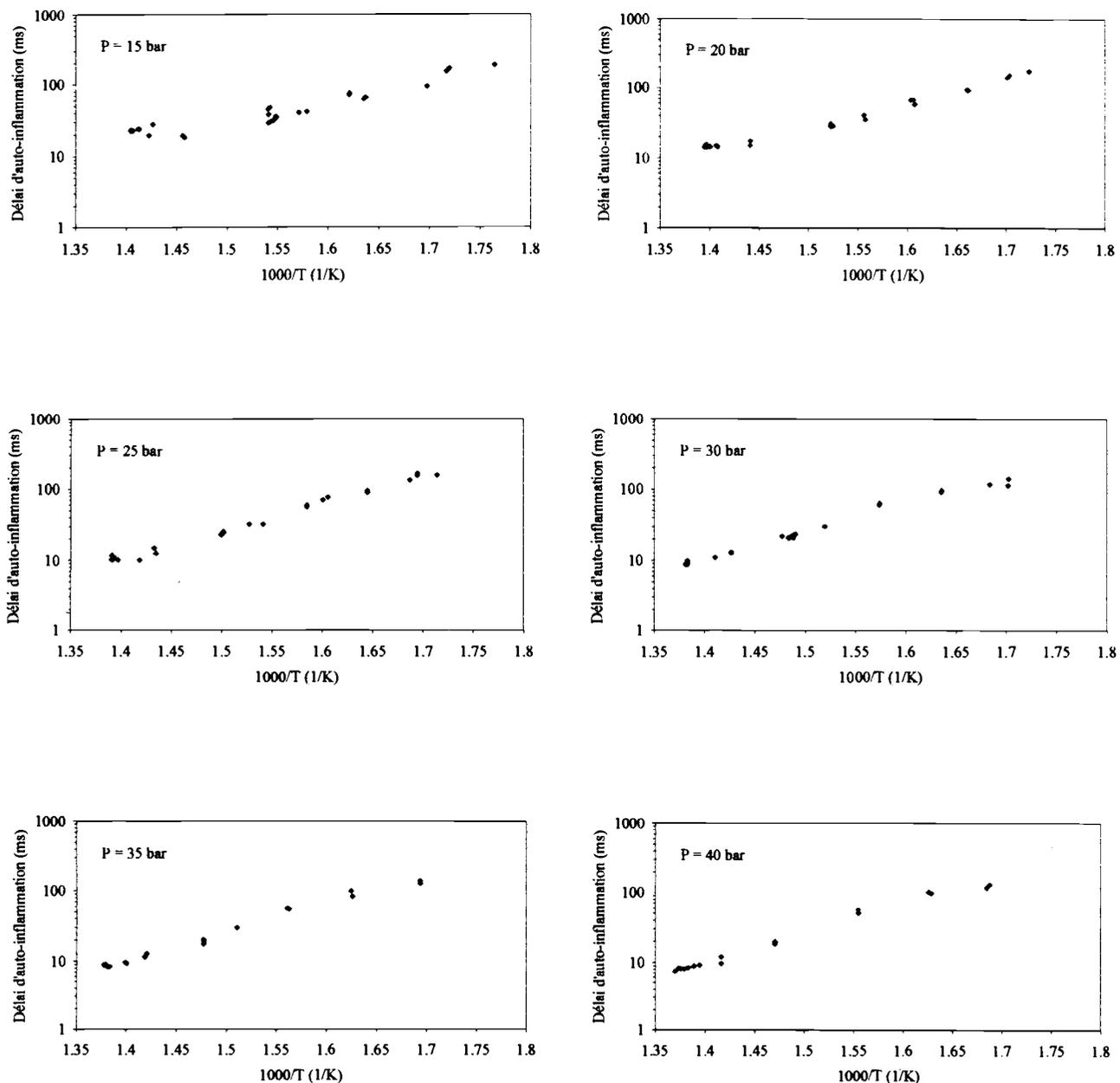


Figure {V.3}: Evolution du délai d'auto-inflammation de Bach ($IC = 20,1$) en fonction de la température pour différentes pressions initiales

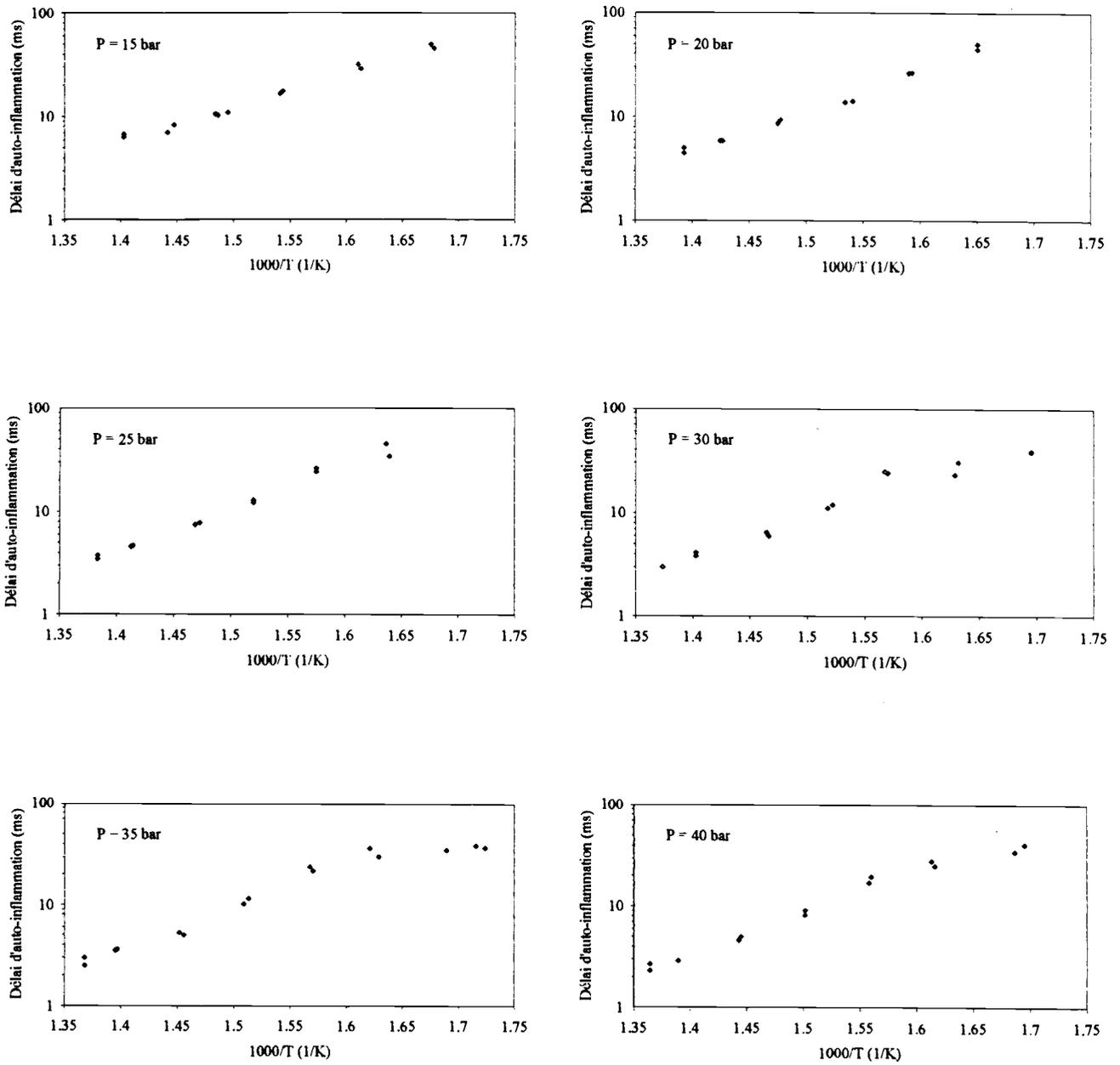


Figure {V.4}: Evolution du délai d'auto-inflammation de Mozart (IC = 42,8) en fonction de la température pour différentes pressions initiales

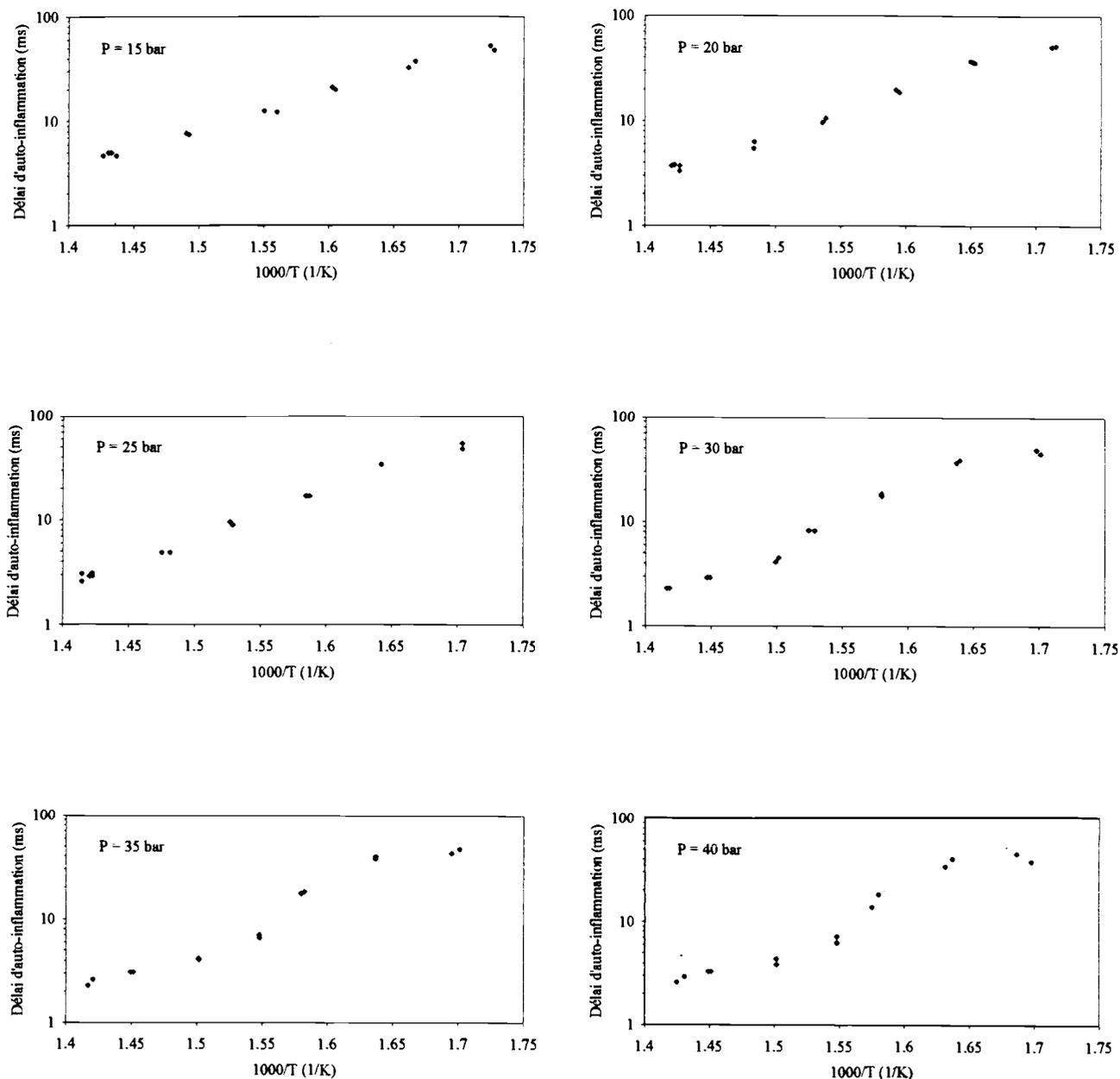


Figure {V.5} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Häendel (IC = 60,1) en fonction de la température pour différentes pressions initiales

intervalle de temps dépend de la vitesse du jet, qui s'exprime de la façon suivante :

$$V_0 = c_d \cdot \sqrt{\frac{2(P_{inj} - P)}{\rho_f}} \quad (V.2)$$

avec :

- V_0 : vitesse d'injection (m / s)
- ρ_f : masse volumique du carburant (kg / m³)
- P_{inj} : pression d'injection (Pa)
- P : pression dans la chambre de combustion (Pa)
- c_d : coefficient de perte de charge (constante pour un injecteur donné)

La pression d'injection P_{inj} étant constante dans tous les essais et le même injecteur ayant été utilisé, la vitesse d'injection des différents carburants ne dépend que de la pression initiale régnant dans la chambre de combustion et de la masse volumique du gazole utilisé. Les variations de masse volumique étant faibles dans le cas des gazoles testés (cf. annexe 6), il semble possible de les négliger. La vitesse d'injection est alors uniquement fonction de la pression régnant dans la chambre de combustion.

Considérons les deux carburants présentant des indices de cétane extrêmes : Bach et Häendel, d'indice de cétane respectif 20,1 et 60,1. Si l'on se place à une pression initiale de 40 bar, la courbe de la figure {V.5} indique que l'évolution du délai d'auto-inflammation de Häendel n'est plus linéaire lorsque ce délai dépasse 7 ms. Le jet atteindrait donc la paroi 7 ms après l'injection. Observons maintenant la courbe {V.3} relative à Bach, pour une pression initiale identique ($P = 40$ bar). Comme on a supposé que la vitesse d'injection ne dépendait que de la pression d'injection, le temps nécessaire au jet pour atteindre la paroi doit être le même que dans le cas de Häendel, c'est-à-dire égal à 7 ms. Or, Bach ayant un indice de cétane très inférieur à celui de Häendel, aucun délai n'est inférieur à 7 ms alors que l'évolution du délai en fonction de la température est identique à celle observée pour Häendel.

Cette première hypothèse semble donc devoir être rejetée. Une seconde hypothèse plus probable expliquerait le changement d'évolution du délai d'auto-inflammation en fonction de la température par une modification de la cinétique chimique menant à l'inflammation.

Selon la nature du carburant et les conditions de température et de pression dans lesquelles on travaille, plusieurs mécanismes chimiques conduisant à l'auto-inflammation ont en effet été mis en évidence ([40], [41]). Ils permettent notamment d'expliquer les phénomènes de flammes froides et d'inflammation en un, deux, voire trois stades.

L'auto-inflammation est généralement décrite à l'aide d'un mécanisme de réactions en

chaîne comportant quatre étapes : initiation, propagation, ramification et rupture. C'est au niveau des réactions de ramification que différents mécanismes chimiques sont considérés selon la température à laquelle on se trouve. Les différents auteurs s'accordent pour séparer le domaine de température en trois zones dans lesquelles interviennent différentes réactions de ramification :

- une zone de basse température ;
- une zone de température intermédiaire ;
- une zone de haute température.

Les espèces chimiques impliquées dans les réactions de ramification sont différentes selon chacune de ces zones :

- dans la zone de basse température, l'isomérisation des radicaux peroxydes RO_2 et la formation des hydroperoxydes $ROOH$ semblent être prédominantes. Après l'étape d'initiation (V.3), dans laquelle RH représente le carburant, la réaction de ramification (V.6) conduit à une auto-accélération du phénomène. Le processus étant exothermique, il peut mener à une auto-inflammation.



- dans la zone de température intermédiaire, les radicaux intervenant dans les réactions de ramification sont essentiellement les radicaux hydroperoxydes HO_2 et le peroxyde d'hydrogène H_2O_2 . Leurs réactions de formation sont les suivantes, P représentant un produit intermédiaire :



- dans la zone des plus hautes températures, la présence de radicaux extrêmement réactifs tels que H est à l'origine de la dégradation de l'hydrocarbure initial en produits de combustion CO_2 et H_2O .

Les valeurs données aux températures délimitant ces trois zones diffèrent selon les auteurs (cf. tableau {V.1}). Bien que les températures proposées par Corre [40] soient distinctes, les trois domaines ne sont pas en pratique aussi clairement séparés et le passage d'un mécanisme à

l'autre se fait donc progressivement. Les valeurs proposées par Sahetchian et col. [41] pour le n-dodécane permettent de mieux prendre en compte cette observation, les différentes réactions de ramification considérées pouvant dans certaines conditions de température avoir lieu simultanément. Des phénomènes très particuliers (flammes froides, inflammation en plusieurs stades notamment) [40] ont été observés dans les intervalles communs aux différents domaines de température déterminés.

Domaine de température	Corre [40]	Sahetchian et col. [41]
Basse température	$T < 600 \text{ K}$	$300 \text{ K} < T < 900 \text{ K}$
Zone intermédiaire	$650 \text{ K} < T < 900 \text{ K}$	$700 \text{ K} < T < 1100 \text{ K}$
Haute température	$1000 \text{ K} < T$	$800 \text{ K} < T$

Tableau {V.1} : Domaines de température considérés par différents auteurs

Le tableau {V.1} semble indiquer que le passage de la zone de basse température à la zone de température intermédiaire s'effectue au voisinage de 650 à 700 K. Or, sur les courbes des figures {A7.1} à {A7.12}, le changement d'évolution du délai d'auto-inflammation en fonction de la température se produit aux environs de $T = 650 \text{ K}$. Il pourrait donc s'expliquer par le fait que l'on se trouve dans une zone où le mécanisme de ramification n'est pas clairement défini, puisqu'on se situe juste à la limite entre deux types de processus chimiques.

V.2.2 - Influence de la pression régnant dans la chambre de combustion

L'influence de la pression initiale sur le délai d'auto-inflammation ne semble pas très marquée. On peut observer sur la figure {V.6} que le rôle joué par la pression à basse température est négligeable. En revanche, pour des températures supérieures à 660 K environ, une augmentation de la pression permet de diminuer légèrement le délai d'auto-inflammation. Ceci peut s'expliquer par le fait qu'une pression élevée provoque une augmentation de la pression partielle d'oxygène qui entraîne une diminution du délai [4].

V.2.3 - Influence des caractéristiques de l'injection

V.2.3.1 - Diamètre de l'injecteur

Afin d'étudier l'influence du diamètre de l'injecteur sur le délai d'auto-inflammation d'un carburant, des essais ont été réalisés en utilisant quatre injecteurs différents. Ces injecteurs sont des injecteurs monotrou, ils présentent des géométries identiques, seul le diamètre du trou d'injection diffère d'un injecteur à l'autre. Les diamètres testés sont 0,20 mm, 0,25 mm, 0,30 mm et 0,35 mm. Le carburant utilisé lors de ces essais est un gazole commercial.

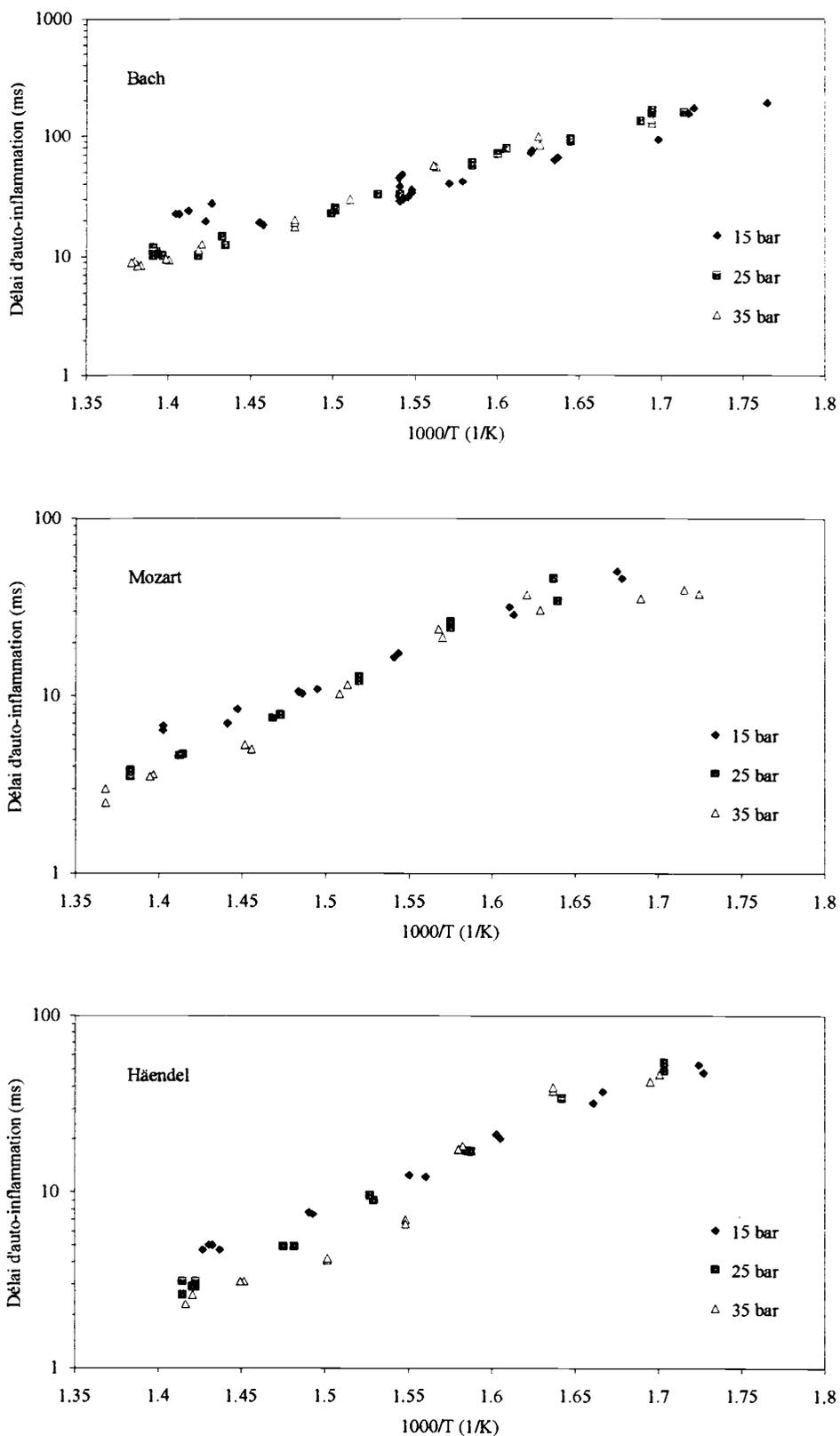


Figure {V.6} : Evolution du délai d'auto-inflammation de différents carburants en fonction de la pression initiale régnant dans la chambre de combustion

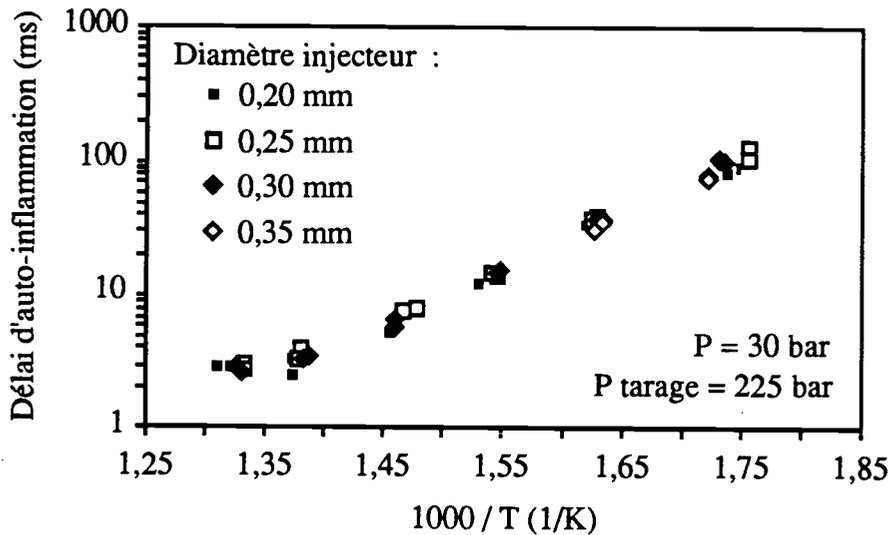


Figure {V.7} : Influence du diamètre de l'injecteur sur le délai d'auto-inflammation d'un carburant

Les résultats obtenus ont permis de montrer qu'une variation importante du diamètre du trou d'injecteur n'a pratiquement pas d'influence sur le délai d'auto-inflammation d'un carburant, et ceci quelle que soit la pression initiale régnant dans la chambre de combustion. La figure {V.7}, donnée à titre d'exemple, illustre cette non-dépendance du délai d'auto-inflammation en fonction du diamètre de l'injecteur. Cette observation a également été faite par Heywood [10].

V.2.3.2 - Type d'injecteur

L'influence du type d'injecteur sur le délai d'auto-inflammation a également été étudiée. Deux types d'injecteurs ont pour cela été considérés : les injecteurs à trous considérés dans le paragraphe précédent et un injecteur à téton. Le carburant utilisé est un gazole commercial.

La figure {V.8} indique les résultats obtenus pour trois pressions initiales différentes. Les observations suivantes peuvent être faites :

- pour les plus basses températures ($T \leq 645$ K) et dans le cas où les pressions initiales sont élevées ($P \geq 35$ bar), l'utilisation d'un injecteur téton semble permettre une réduction du délai d'auto-inflammation ;
- toujours pour des températures inférieures à 645 K mais pour des pressions initiales plus faibles ($P \leq 30$ bar), les délais d'auto-inflammation obtenus avec des injecteurs de type différent sont pratiquement identiques ;

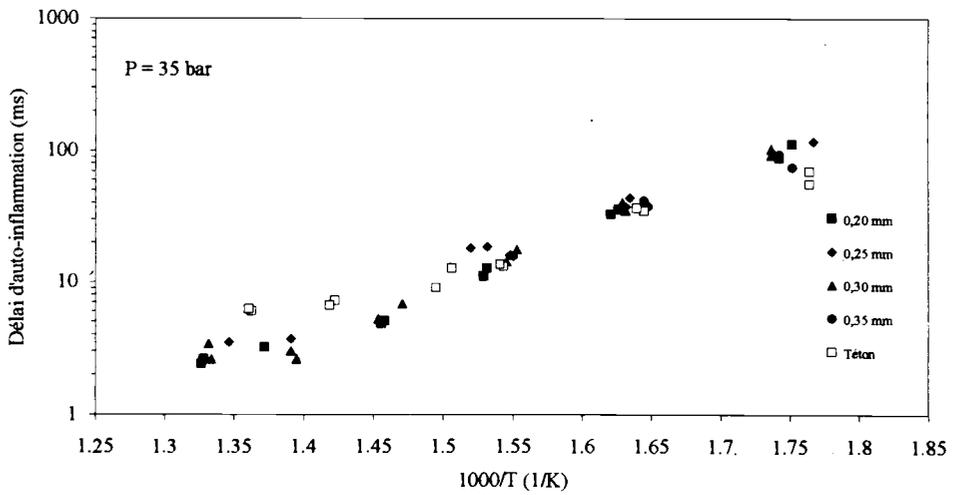
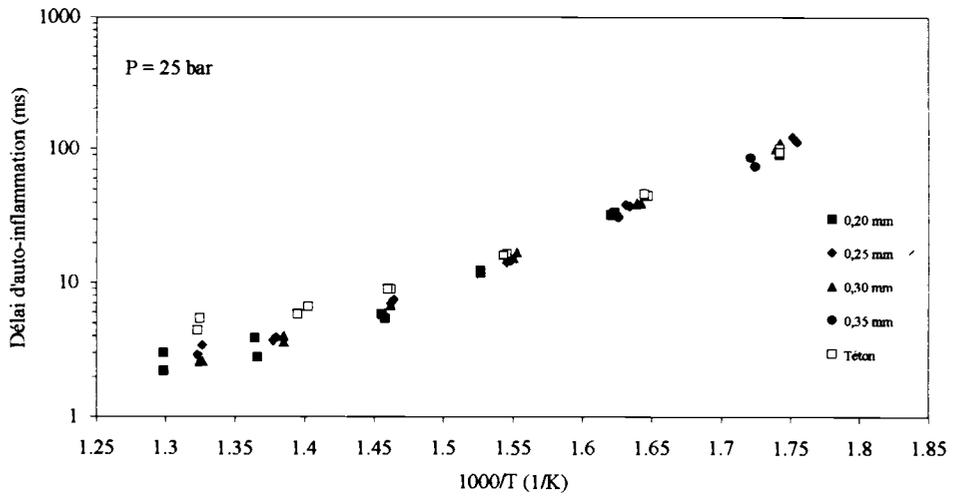
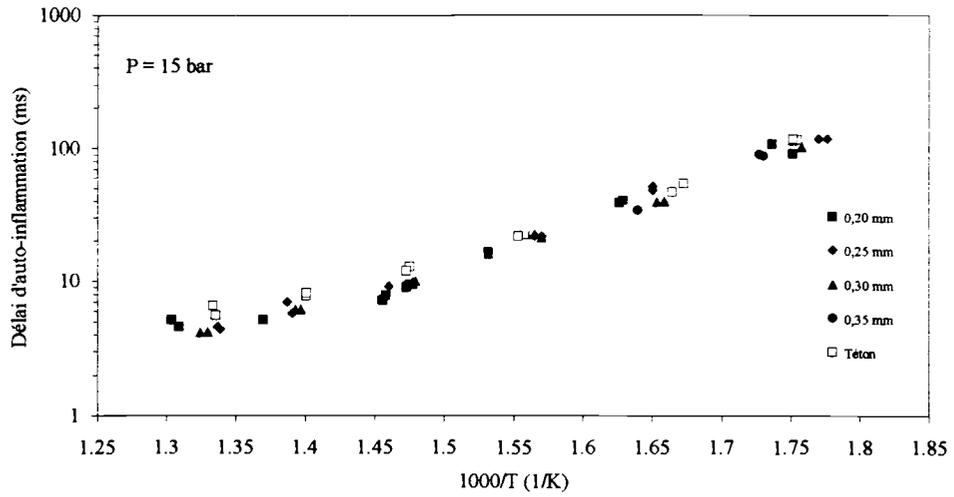


Figure {V.8} : Influence du type d'injecteur sur le délai d'auto-inflammation d'un carburant

- pour les températures les plus élevées ($T \geq 645$ K), les délais d'auto-inflammation obtenus avec l'injecteur à téton sont supérieurs à ceux obtenus avec les injecteurs monotrou, et ceci pour toutes les pressions initiales considérées. L'écart existant entre ces deux délais semble être par ailleurs d'autant plus important que la pression initiale est élevée. Le tableau {V.2} permet de comparer les délais d'auto-inflammation relatifs à l'injecteur à téton et ceux concernant l'injecteur monotrou de diamètre 0,20 mm.

Pression initiale (bar)	Délai d'auto-inflammation à 714 K (ms)		Augmentation du délai suite à l'utilisation de l'injecteur à téton
	Injecteur 0,20 mm	Injecteur à téton	
15	7,6	8	5 %
20	4,6	6,2	35 %
≥ 25	$\approx 3,5$	$\approx 6,6$	≥ 80 %

Tableau {V.2} : Evolution du délai d'auto-inflammation en fonction du type d'injecteur

V.2.3.3 - Pression d'injection

Les études de Nakakita et col. [12] et de Minami et col. [13] ont mis en évidence l'influence de la pression d'injection sur le délai d'auto-inflammation. Les essais qu'ils ont réalisés à fortes pressions d'injection (supérieures à 300 bar) ont permis de montrer que le délai d'auto-inflammation est fortement réduit lorsque cette pression d'injection augmente. Pischinger et col. [8] a observé une évolution inverse dans le domaine des basses pressions d'injection (inférieures à 300 bar).

Afin de confirmer ou d'infirmer les résultats de Pischinger et col. [8], des essais ont été réalisés à différentes pressions d'injection. Les caractéristiques expérimentales relatives à ces essais sont résumées dans le tableau {V.3}.

Carburant		Gazole commercial
Injection	Injecteur	monotrou, $\phi_{inj} = 0,25$ mm $P_{tarage} = 225$ bar
	Système d'injection	Quantité injectée : 320 mg Durée d'injection : 60 ms
Conditions initiales	Température	de 573 K à 773 K
	Pression	de 20 à 30 bar

Tableau {V.3} : Conditions expérimentales relatives à l'étude de l'influence de la pression d'injection

L'étude a été menée pour deux pressions d'injection différentes. La figure {V.9} indique l'allure des courbes d'injection correspondantes. Ces deux pressions d'injection sont caractérisées par leur valeur moyenne pendant le délai d'auto-inflammation, définie par l'expression suivante :

$$P_{inj\,moy} = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} P(t).dt \quad (V.9)$$

Ces valeurs moyennes sont respectivement voisines de 208 et 243 bar.

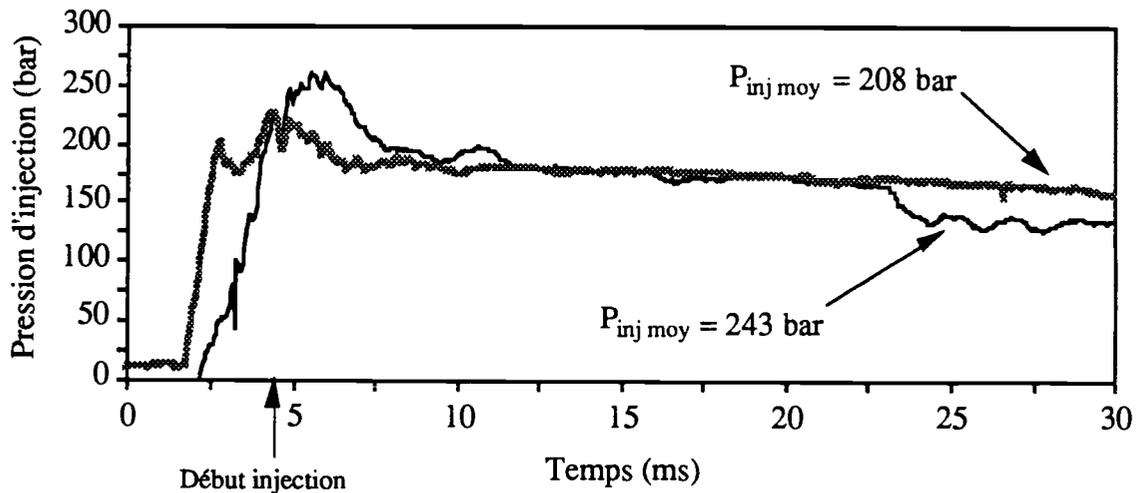


Figure {V.9} : Evolution de la pression d'injection en fonction du temps

Les résultats obtenus pour deux pressions initiales dans la chambre de combustion ($P = 20$ bar et $P = 30$ bar) montrent que le délai d'auto-inflammation varie peu en fonction de la pression d'injection. Sur la figure {V.10}, donnée à titre d'exemple, on remarque en effet que les résultats correspondant aux deux conditions d'injection sont pratiquement identiques.

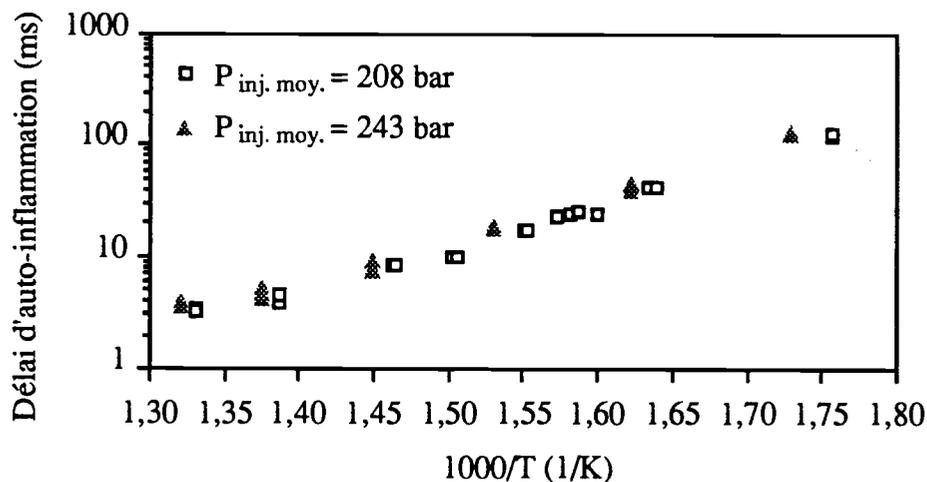


Figure {V.10} : Evolution du délai d'auto-inflammation en fonction de la température pour différentes pressions d'injection (gazole commercial, $P = 20$ bar)

Les observations qui ont été faites sont différentes de celles de Pischinger et col. [8]. Aucune influence de la pression d'injection sur le délai d'auto-inflammation n'a en effet été observée sur le domaine considéré [208 bar ; 243 bar]. Il convient toutefois de remarquer que le domaine de variation de la pression d'injection considéré dans cette étude est relativement restreint. Ceci est dû aux limites imposées par le dispositif expérimental. L'effet de la pression d'injection a pu être occulté par une modification non significative de cette pression d'injection. Des études complémentaires seraient donc nécessaires.

V.3 - INFLUENCE DES CARACTERISTIQUES DU CARBURANT

Différents carburants ont été utilisés dans ce travail afin d'étudier le lien existant entre le délai d'auto-inflammation d'un carburant et les caractéristiques de ce carburant. Les caractéristiques considérées sont l'indice de cétane ainsi que la teneur et la nature des additifs présents.

V.3.1 - Caractéristiques des différents carburants testés

Douze carburants ont donc été testés lors des essais. Leurs caractéristiques sont données dans l'annexe 6. Il s'agit d'un gazole commercial, d'un produit pur : le dodécane et d'une série de dix carburants. Cette série est composée de trois produits de référence et de sept mélanges obtenus à partir des produits de référence auxquels ont été ajoutés en teneur variable différents additifs.

V.3.2 - Influence de l'indice de cétane

Seuls les trois carburants de référence, Bach, Mozart et Häendel, sont considérés dans cette étude. Leurs indices de cétane couvrent un intervalle suffisamment vaste (respectivement 20,1, 42,8 et 60,1).

Les résultats obtenus se trouvent sur les courbes de la figure {V.11}.

Ces courbes montrent que le délai d'auto-inflammation d'un carburant est d'autant plus court que son indice de cétane est grand. Ce dernier caractérise en effet l'aptitude d'un combustible à s'auto-enflammer.

V.3.3 - Influence de la teneur en additif

Afin d'améliorer les propriétés d'auto-inflammation d'un carburant donné, il est possible

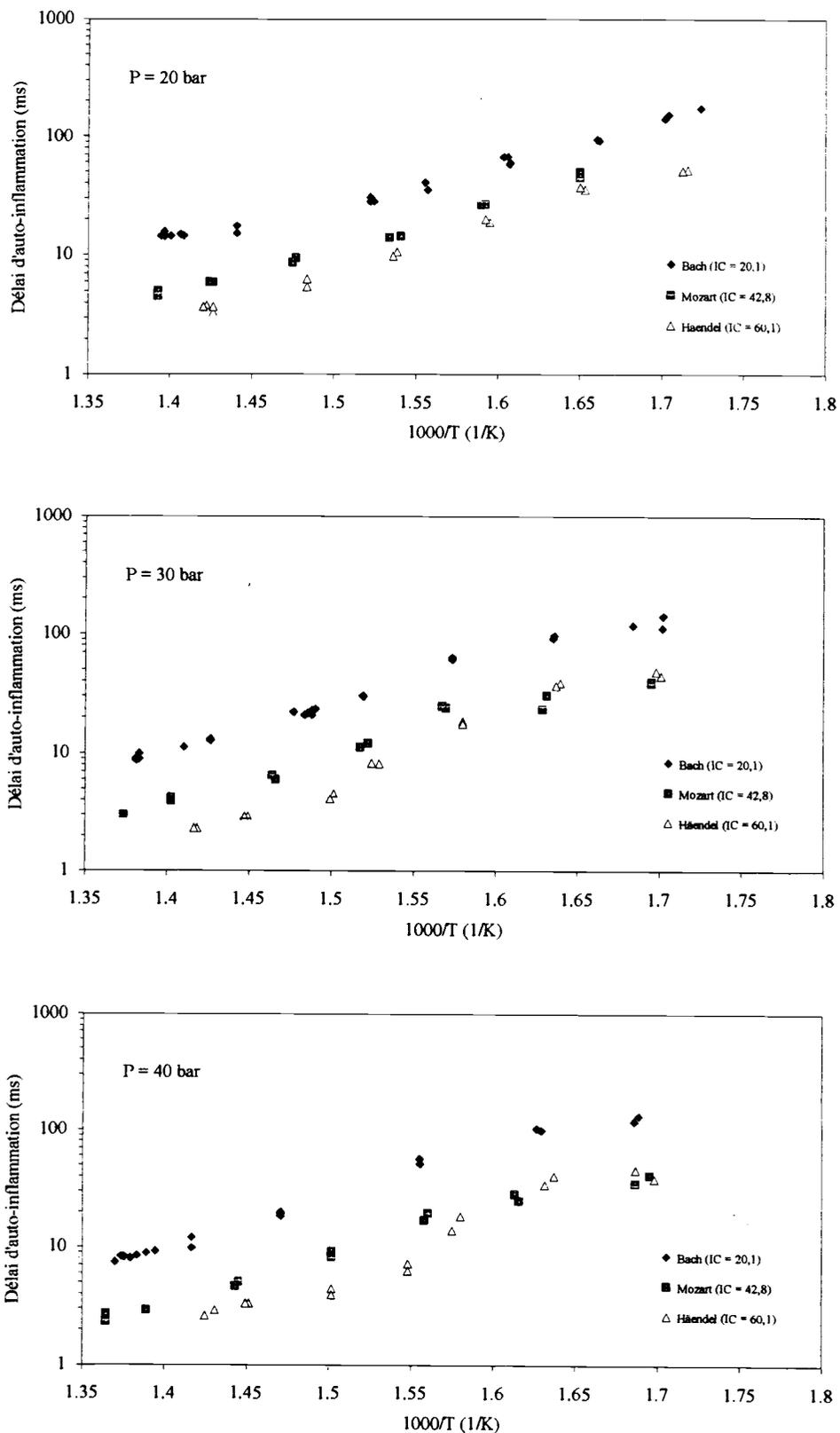


Figure {V.11} : Influence de l'indice de cétane sur le délai d'auto-inflammation

de lui ajouter des additifs. Ces additifs permettent d'augmenter son indice de cétane et, par conséquent, permettent de diminuer, comme l'a montré le paragraphe V.3.2, son délai d'auto-inflammation.

Les additifs procétane les plus généralement employés sont des peroxydes organiques, des nitrates, des nitrites et des composés sulfureux (cf. § II.2.4).

L'efficacité d'un additif est liée à la concentration présente dans le carburant. On ne pourra pas néanmoins diminuer indéfiniment le délai d'auto-inflammation d'un gazole, par ajout d'une quantité de plus en plus importante d'additif. En effet, si l'ajout de quelques ppm d'additif permet de réduire considérablement le délai d'auto-inflammation, il existe toutefois une concentration limite, à partir de laquelle tout ajout supplémentaire d'additif sera inutile.

L'effet d'un additif couramment utilisé sur le délai d'auto-inflammation va maintenant être étudié. L'additif considéré est un nitrate d'alkyle, présent à des teneurs variables dans un carburant de référence. Ce carburant de référence est Schubert. Les deux autres carburants utilisés sont Vivaldi et Messian. Ces deux carburants sont composés du carburant de référence Schubert, auquel on a ajouté dans le cas de Vivaldi 300 ppm de nitrate d'alkyle, et dans le cas de Messian 1000 ppm de ce même nitrate d'alkyle. L'additivation de Schubert a permis d'augmenter son indice de cétane de 2,4 points pour Vivaldi et de 4,3 points pour Messian.

Les résultats obtenus sont reportés sur les graphes de la figure {V.12}, sur laquelle sont représentées les évolutions du délai d'auto-inflammation des trois carburants considérés dans cette étude en fonction de l'inverse de la température, pour différentes pressions initiales.

On observe sur cette figure que l'ajout d'une quantité de plus en plus importante de nitrate d'alkyle permet de réduire notablement le délai d'auto-inflammation du carburant de référence. Un ajout de 300 ppm diminue le délai d'auto-inflammation de 12 % en moyenne alors qu'un ajout de 1000 ppm provoque une réduction de la durée de pré-combustion de l'ordre de 17 %.

Les remarques faites sur les trois carburants testés sont en accord avec les observations que l'on trouve dans la littérature. L'ajout d'un additif procétane dans un carburant permet de réduire son délai d'auto-inflammation. En revanche, cette diminution du délai d'auto-inflammation n'est pas proportionnelle à la teneur en additif. Si 300 ppm de nitrate d'alkyle provoque une réduction de l'ordre de 12 % du délai, on obtient qu'une diminution de 17 % en ajoutant une teneur plus de trois fois supérieure (1000 ppm). Il semble donc exister une concentration maximale au delà de laquelle tout ajout d'additif sera inefficace et donc inutile.

Les courbes de la figure {V.12} indiquent également que l'efficacité du nitrate d'alkyle

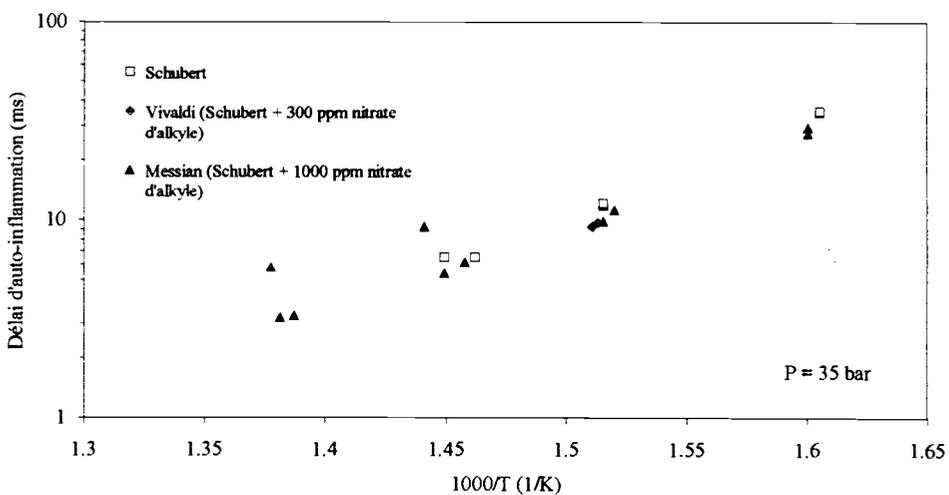
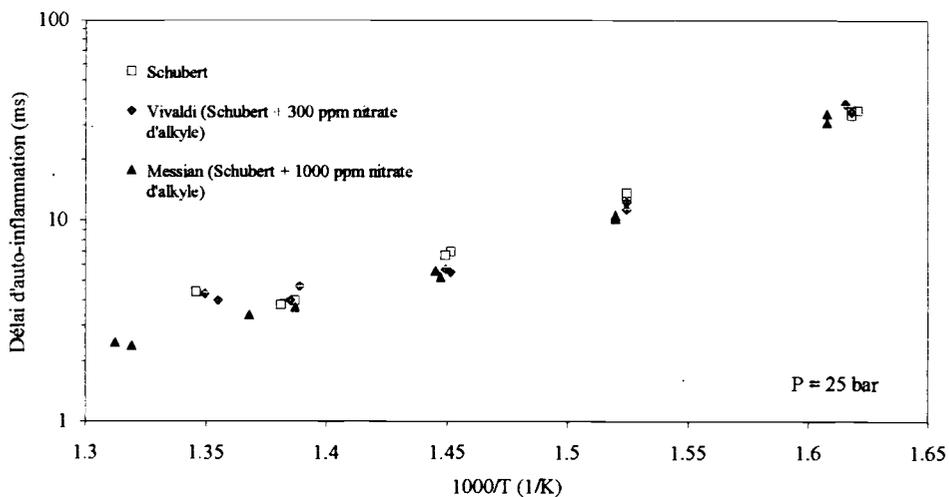
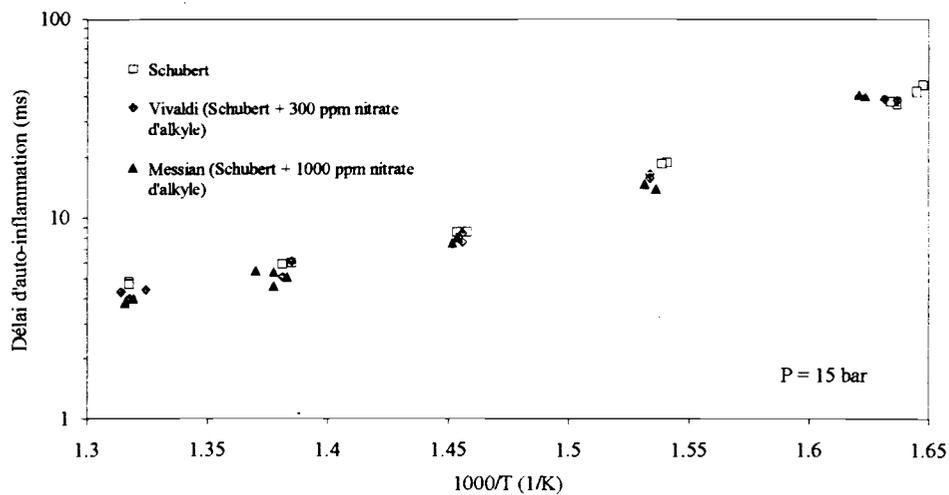


Figure {V.12} : Influence de la teneur en additif sur le délat d'auto-inflammation

utilisé dépend de la température à laquelle on se trouve. Il apparaît en effet sur cette figure que le délai d'auto-inflammation d'un carburant est d'autant plus réduit par ajout de cet additif que la température initiale régnant dans la chambre de combustion avant injection est élevée. Pour les températures les plus basses, l'additivation semble ne présenter qu'un intérêt limité.

V.3.4 - Influence de la nature des additifs

Les différents additifs procétane utilisés pour améliorer les caractéristiques d'auto-inflammation d'un carburant ne présentent pas tous la même efficacité. Les effets de deux additifs couramment employés par les pétroliers, un nitrate d'alkyle et un peroxyde de t-butyle, vont être étudiés maintenant.

Cette étude est menée à l'aide des résultats obtenus avec les trois carburants suivants : Schubert, Messian et Rameau. Schubert sera considéré comme le carburant de référence. Messian a été obtenu en ajoutant à ce carburant de référence 1000 ppm d'un nitrate d'alkyle alors que Rameau correspond à ce carburant de référence additivé de 1000 ppm de peroxyde de t-butyle. L'ajout de ces deux additifs a permis d'augmenter respectivement de 4,3 et de 1,1 points l'indice de cétane de Schubert.

Les résultats obtenus sont indiqués sur la figure {V.13} représentant l'évolution du délai d'auto-inflammation des trois carburants considérés en fonction de l'inverse de la température, pour différentes pressions initiales.

On constate sur ces différentes courbes que les deux additifs utilisés permettent de réduire le délai d'auto-inflammation du carburant de référence. Des deux additifs testés, le nitrate d'alkyle semble être le plus efficace. Pour une même quantité ajoutée (0,1 %), le nitrate d'alkyle permet de réduire en moyenne le délai d'auto-inflammation de l'ordre de 17 % alors que la diminution observée dans le cas du peroxyde de t-butyle est voisine de 8 %. Le nitrate d'alkyle utilisé présente donc une efficacité deux fois plus importante que le peroxyde de t-butyle.

Il convient également de signaler que l'effet de l'additif, quel qu'il soit, est plus important pour les températures les plus élevées. Aux plus basses températures (pour $T < 600$ K), on observe peu de différences entre les délais d'auto-inflammation du carburant de référence et de ceux des carburants additivés.

Les courbes de la figure {V.13} semblent enfin indiquer que l'additivation permet de réduire d'autant plus le délai d'auto-inflammation que la pression initiale régnant dans la chambre de combustion avant injection est grande. Pour les pressions les plus élevées ($P > 25$ bar), il est cependant apparu que le gain obtenu par ajout d'un additif procétane reste

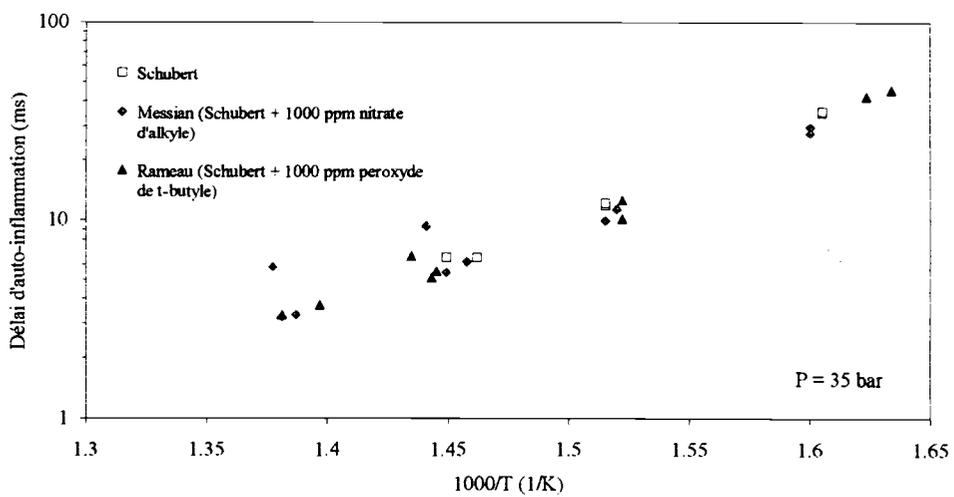
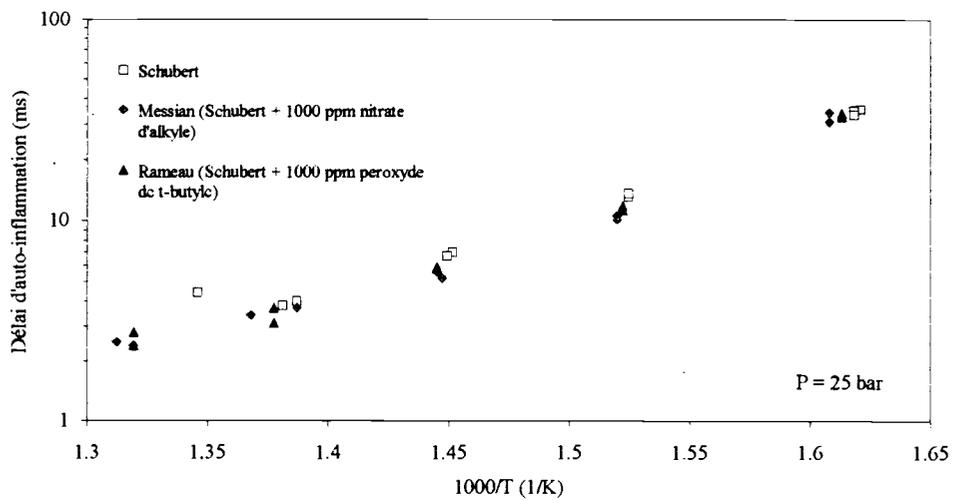
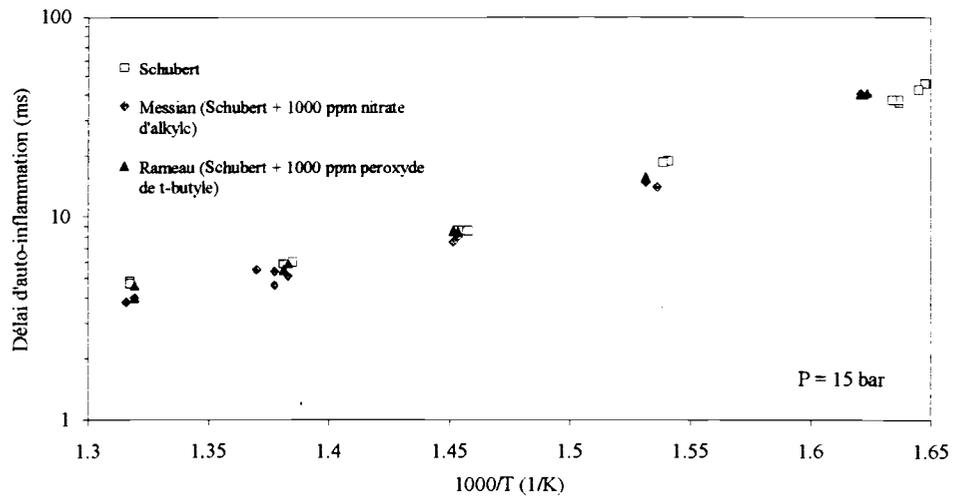


Figure {V.13} : Influence de la nature de l'additif sur le délai d'auto-inflammation

constant.

V.3.5 - Influence d'un même additif sur des carburants différents

Les paragraphes précédents ont montré que la nature de l'additif ajouté à un carburant ainsi que sa teneur influent sur son efficacité. Un dernier paramètre intervient également : la sensibilité d'un carburant donné à un additif. En effet, l'effet d'un additif varie en fonction de la composition chimique du carburant considéré ([5], [14]).

L'effet d'un même additif, un nitrate d'alkyle, sur deux carburants différents a donc été étudié. Les carburants utilisés sont Schubert et Messian (correspondant à Schubert auquel on a ajouté 1000 ppm d'un nitrate d'alkyle) et Berlioz et Scarlatti (correspondant à Berlioz auquel on a ajouté également 1000 ppm du même nitrate d'alkyle). La figure { V.14 } permet d'observer le gain en indice de cétane provoqué par ces additivations.

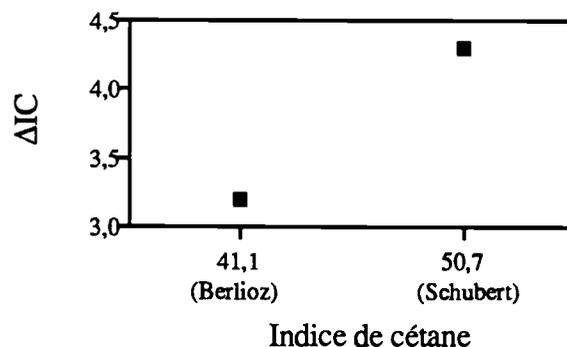


Figure {V.14} : Efficacité d'une additivation au nitrate d'alkyle rapportée au cétane clair du carburant

Les résultats obtenus sont reportés sur les courbes de la figure {V.15}. Ces courbes, représentant l'évolution du délai d'auto-inflammation en fonction de l'inverse de la température, permettent de constater qu'en moyenne, 1000 ppm de nitrate d'alkyle réduisent de 12,5 % le délai de Berlioz contre 17 % dans le cas de Schubert.

L'amélioration plus importante des qualités d'auto-inflammation de Schubert peut s'expliquer par sa composition. En effet, Schubert contient beaucoup plus de composés naphthéniques que Berlioz. Or on a vu [5] que le nitrate d'octyle était beaucoup plus efficace lorsqu'il était ajouté à des carburants naphthéniques que lorsque l'on considérait des carburants aromatiques ou paraffiniques. Schubert présentant une teneur en composés naphthéniques supérieure à celle de Berlioz, il est tout à fait logique d'observer une meilleure efficacité du nitrate d'alkyle utilisé sur Schubert que sur Berlioz.

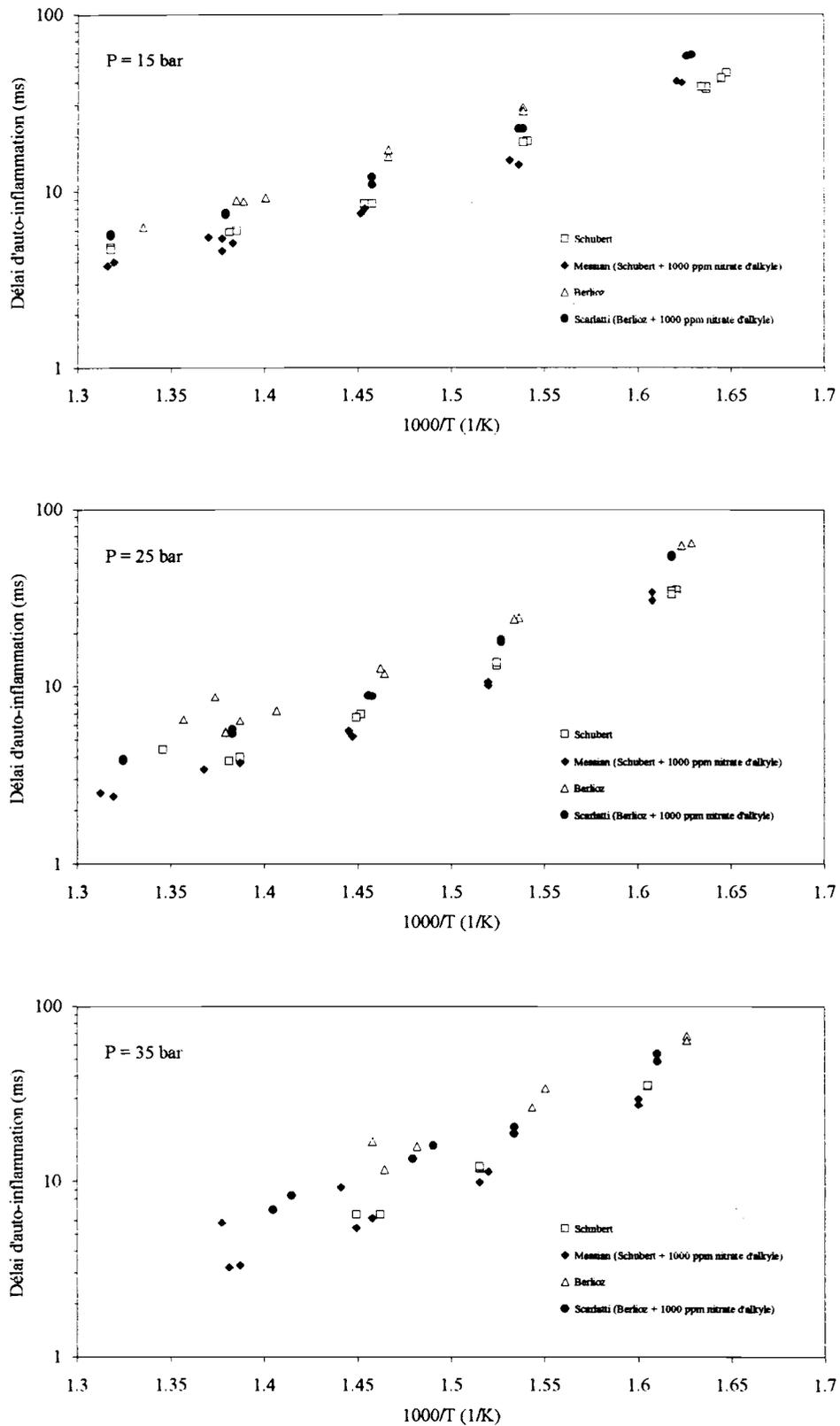


Figure {V.15} : Influence d'un même additif sur le délai d'auto-inflammation de différents carburants

CONCLUSIONS DE LA DEUXIEME PARTIE

Le dispositif expérimental utilisé a permis de réaliser des mesures de délai d'auto-inflammation de différents carburants dans des conditions de température et de pression variées. Les effets de différents paramètres de fonctionnement ou de caractéristiques du carburant ont ainsi pu être mis en évidence.

Les résultats concernant l'influence de la température initiale régnant dans la chambre de combustion avant injection sont en accord avec la littérature : le délai d'auto-inflammation diminue lorsque la température augmente. Une évolution singulière a été mise en évidence pour des températures proches de 650 K. Elle s'explique par une modification des réactions de ramification du processus d'inflammation. La pression initiale régnant dans la chambre de combustion avant injection du carburant a quant à elle un effet mineur sur le délai en comparaison du rôle joué par la température. Un accroissement de cette pression permet, pour les températures les plus élevées, de réduire légèrement le délai d'auto-inflammation.

L'influence des conditions d'injection a également été étudiée. Si le diamètre du trou d'injecteur ne provoque aucune modification du délai, le type d'injecteur a une influence non négligeable. Cette observation infirme les conclusions de Heywood [10]. L'effet de la pression d'injection n'a pas été clairement défini dans la littérature. Le dispositif expérimental utilisé dans ce travail n'a pas permis d'apporter de nouvelles connaissances sur ce sujet, la variation de pression d'injection réalisable sur le banc d'essai n'étant pas suffisamment significative pour pouvoir tirer des conclusions définitives.

Dans la dernière partie de cette étude expérimentale, l'influence de la composition du carburant a été considérée. Il a été observé que le délai d'auto-inflammation diminue lorsque l'indice de cétane augmente. L'effet d'une additivation a également été examiné. Cette additivation, correspondant en fait à une augmentation de l'indice de cétane, permet de réduire le délai d'auto-inflammation dans des proportions plus ou moins importantes, selon l'additif utilisé, le pourcentage ajouté et la nature du carburant additivé.

Les essais réalisés dans le cadre de ce travail ont permis de constituer une base de données conséquente. Ces données expérimentales vont maintenant être utilisées pour modéliser le délai d'auto-inflammation.

TROISIEME PARTIE

MODELISATION

CHAPITRE VI

DETERMINATION D'UNE LOI DE CORRELATION EN MILIEU HOMOGENE

Trois approches différentes peuvent être considérées pour déterminer le délai d'auto-inflammation d'un combustible (cf. chapitre III). Il est en effet possible de prédire le délai à l'aide de relations empiriques, de modèles semi-globaux ou de mécanismes détaillés. Ces derniers mécanismes décrivent de façon très précise les mécanismes chimiques mais ne sont guère utilisables. Ils ne seront donc pas traités ici. Les deux autres approches seront en revanche étudiées.

Ce chapitre est consacré à la détermination d'une loi empirique permettant de prédire le délai d'auto-inflammation lorsque l'on connaît un certain nombre de paramètres de fonctionnement ainsi que les caractéristiques physiques du carburant. Bien qu'une évolution non linéaire du délai d'auto-inflammation en fonction de la température (en coordonnées semi-logarithmiques) ait été mise en évidence dans le chapitre précédent, ce phénomène ne sera pas pris en compte dans la détermination de la loi empirique qui va suivre. En effet, de par sa nature, une loi empirique n'est pas destinée à décrire de façon précise l'auto-inflammation. Elle ne peut donc pas rendre compte de modifications des mécanismes cinétiques d'auto-inflammation qui semblent être à l'origine du phénomène observé. Elle permet seulement de donner une estimation rapide du délai d'auto-inflammation. La formulation adoptée par de nombreux auteurs sera donc conservée ici. Cette formulation, de type Arrhénius, a été proposée par Wolfer en 1950. Nous étendrons cette relation en la rendant notamment utilisable pour différents carburants.

VI.1 - RELATION DE WOLFER

VI.1.1 - Formulation

La loi de Wolfer, introduite au paragraphe III.2, se présente sous la forme suivante :

$$\tau = A \cdot P^{-m} \cdot \exp(B/T) \quad (\text{III.1})$$

où τ représente le délai d'inflammation total (en ms), P la pression moyenne pendant le délai (en bar), T la température moyenne pendant le délai (en K) et où A , B , m sont des constantes.

VI.1.2 - Identification des coefficients

Les trois constantes A, B et m intervenant dans cette relation dépendent des conditions expérimentales (géométrie, injection, ...) et de la nature du carburant. Il s'agit donc en fait ici de déterminer le triplet (A, m, B) correspondant à chaque carburant et relatif aux conditions expérimentales rencontrées. Ces dernières conditions sont identiques pour tous les essais réalisés. Elles sont résumées dans le tableau {VI.1}.

Pression initiale	de 15 à 40 bar
Température initiale	de 573 à 773 K
Injecteur	monotrou ; $\phi_{inj} = 0,25$ mm $P_{tarage} = 225$ bar
Système d'injection	Quantité injectée : 320 mg Durée d'injection : 60 ms

Tableau {VI.1} : Conditions expérimentales

Les différents triplets (A, m, B) ont été identifiées à l'aide du logiciel Matlab, par une méthode des moindres carrés (cf. annexe 8), en considérant pour chacun des douze combustibles testés dans la chambre de combustion l'ensemble des points expérimentaux correspondant aux diverses pressions et températures initiales. Les valeurs obtenues pour les différents coefficients sont reportées dans le tableau {VI.2}.

Carburant	A	m	B
Bach	$1,6615 \cdot 10^{-4}$	0,1034	8208,6
Beethoven	$2,6092 \cdot 10^{-4}$	0,3630	8458,9
Berlioz	$2,6000 \cdot 10^{-4}$	0,1031	9242,8
Mozart	$1,0199 \cdot 10^{-4}$	0,3931	8522,0
Schubert	$2,9397 \cdot 10^{-5}$	0,1467	8965,0
Händel	$2,9245 \cdot 10^{-6}$	0,2965	10380,7
Scarlatti	$4,2470 \cdot 10^{-5}$	0,0776	8792,6
Rameau	$2,8523 \cdot 10^{-4}$	0,3151	9301,5
Vivaldi	$3,8544 \cdot 10^{-5}$	0,2422	8979,4
Messian	$2,5907 \cdot 10^{-5}$	0,3012	9323,8
Dodécane	$5,3017 \cdot 10^{-5}$	0,1144	8269,4
Gazole commercial	$6,9910 \cdot 10^{-5}$	0,1043	8287,6

Tableau {VI.2} : Valeurs des coefficients de la loi de Wolfer (III.1) obtenues pour les différents combustibles

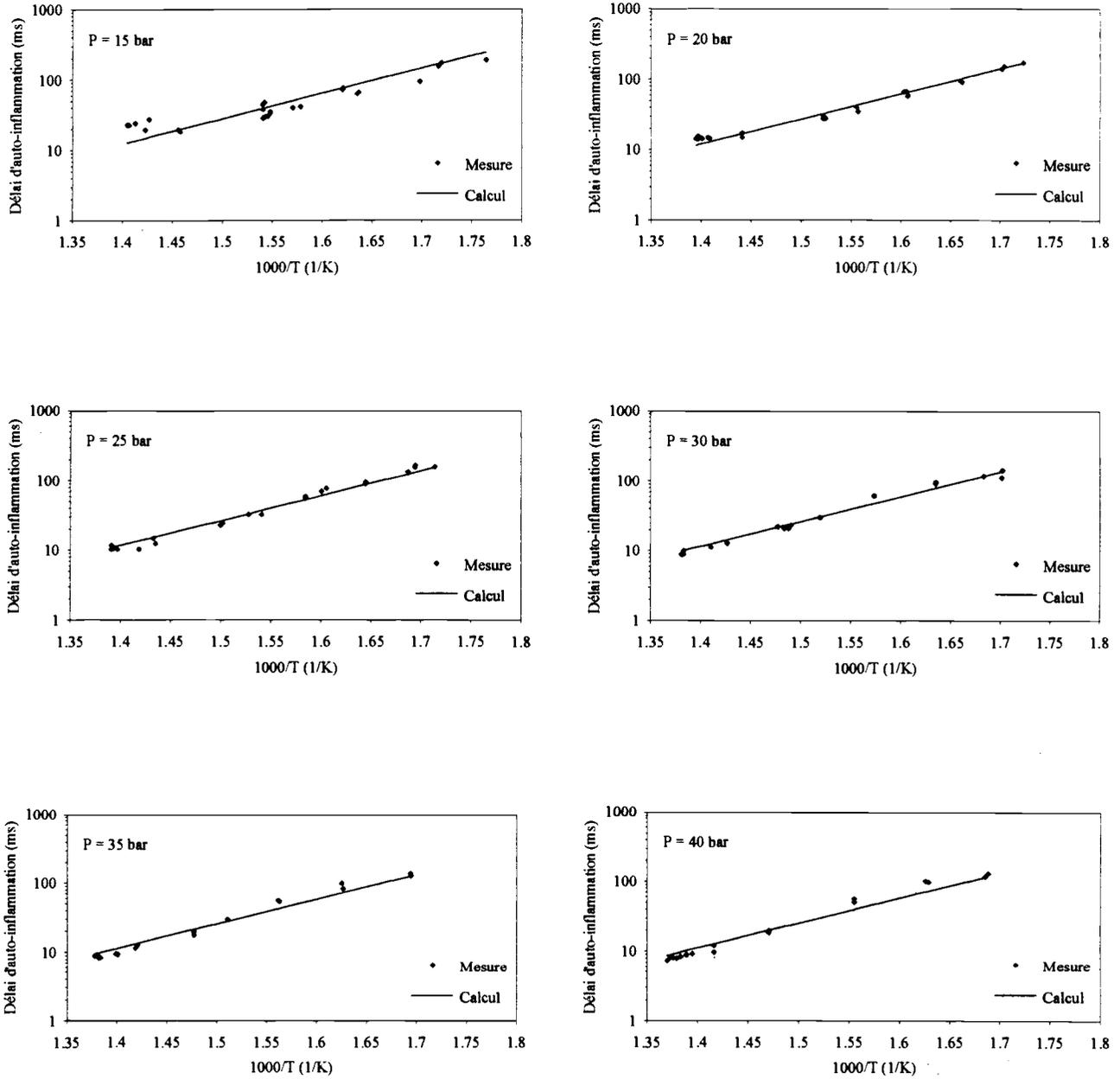


Figure {VI.1} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Bach en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfer (III.1)

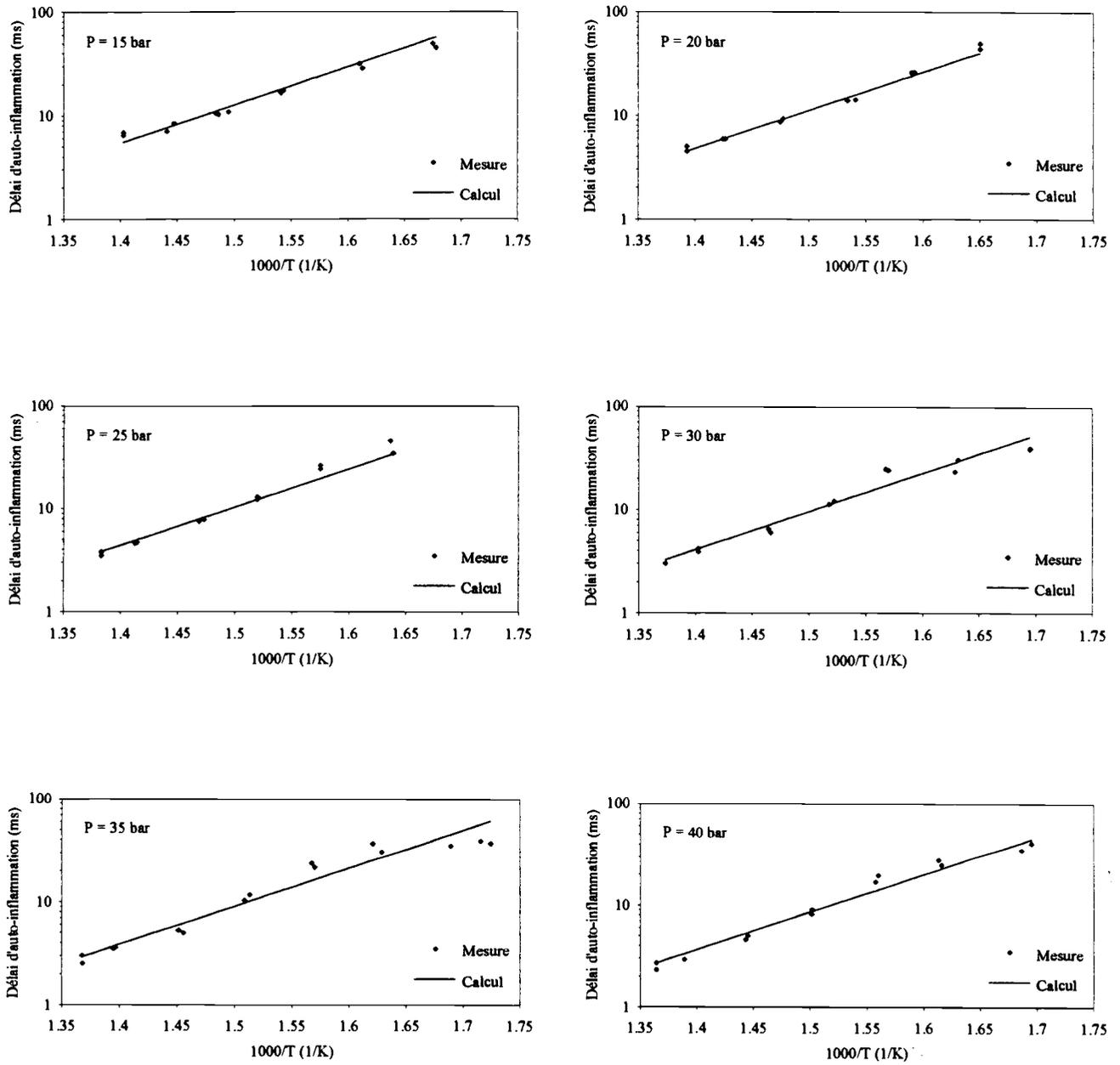


Figure {VI.2} : Evolution du délat d'auto-inflammation de Mozart en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfer (III.1)

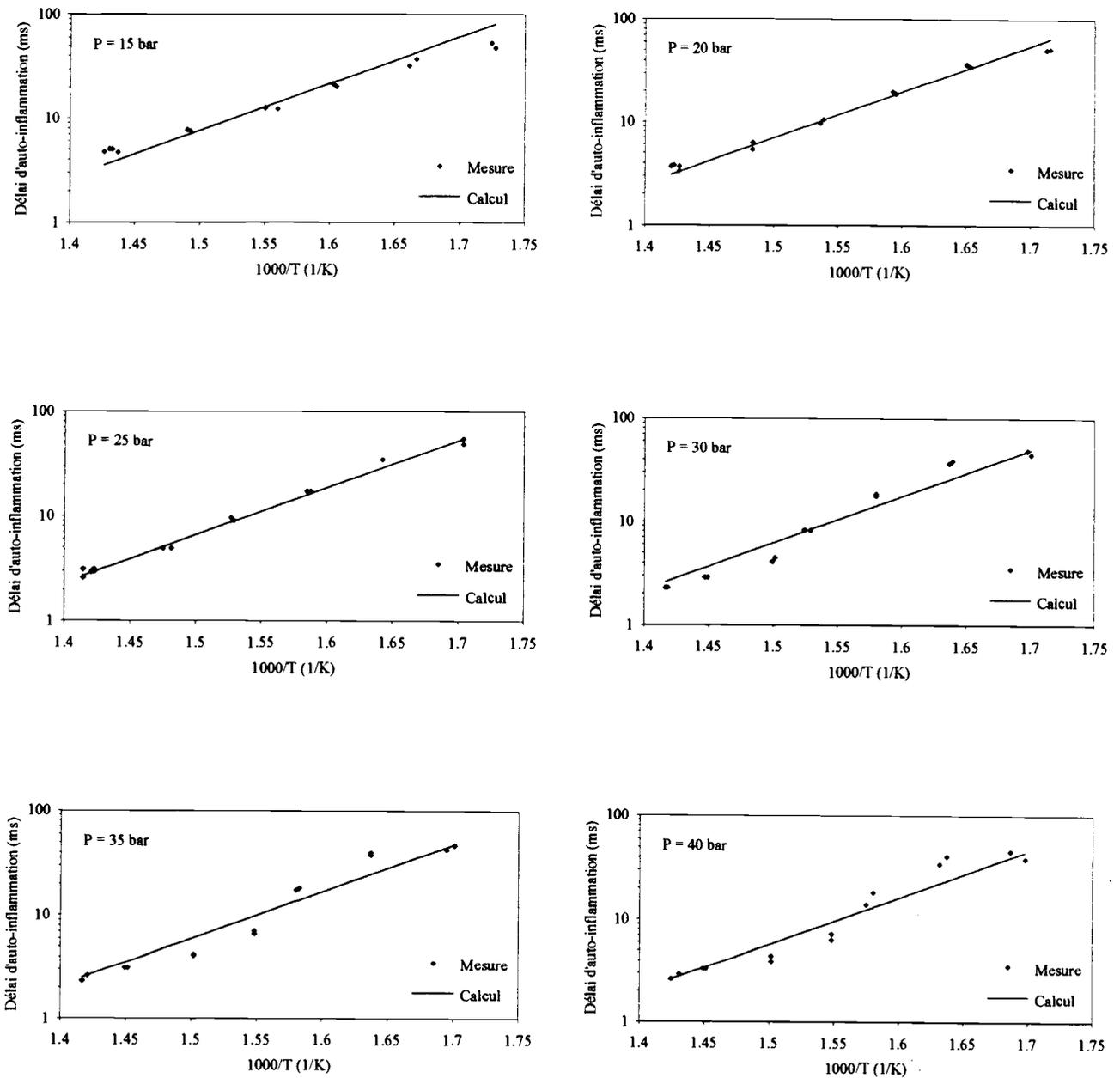


Figure {VI.3} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Häendel en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfer (III.1)

Lors de cette identification, les températures et pressions moyennes pendant la durée du délai d'auto-inflammation ont été supposées égales aux pressions et températures initiales régnant dans la chambre de combustion avant l'injection du carburant. Le calcul de l'erreur que fait apparaître cette approximation a été effectué pour quelques essais. Il s'est avéré qu'il existe un écart de 2 % environ entre les valeurs initiales des pressions et températures avant injection du carburant et les valeurs moyennes pendant le délai d'auto-inflammation de ces deux paramètres.

Les intervalles de confiance à 95 % des différents coefficients (cf. annexe 9) ont été déterminés dans le cas des carburants n°1 à 10. Si les intervalles de confiance sur les coefficients A et B sont relativement faibles, il n'en est pas de même pour ceux du coefficient m.

Les courbes des figures {A10.1} à {A10.12} (annexe 10) permettent de comparer les délais d'auto-inflammation expérimentaux des douze carburants aux délais calculés à l'aide de la relation (III.1). Les figures {VI.1} à {VI.3}, données à titre d'exemple, montrent l'allure générale obtenue pour les différents carburants.

La loi de Wolfer semble être bien adaptée à la prédiction du délai d'auto-inflammation pour les différents carburants testés. En effet, l'accord entre les mesures expérimentales et les courbes calculées est très satisfaisant dans la majorité des cas présentés. Quelques divergences apparaissent toutefois pour les pressions les plus élevées, dans le cas de certains carburants (Mozart, Häendel, Vivaldi, dodécane).

La relation de Wolfer se présente sous une forme linéaire en coordonnées semi-logarithmiques. Comme cela a été mentionné au début de ce chapitre, elle ne permet donc pas de tenir compte des évolutions observées pour le délai d'auto-inflammation dans certains domaines de température. Ceci explique les écarts observés entre le modèle et les mesures pour les carburants présentant un indice de cétane élevé, dans le cas des hautes pressions initiales. La loi de Wolfer ne donne alors par conséquent qu'une valeur moyenne, qui indique seulement l'ordre de grandeur du délai d'auto-inflammation. Son domaine d'application est donc restreint.

VI.1.3 - Comparaison avec les valeurs trouvées dans la littérature

La comparaison entre les résultats de l'identification (cf. tableau {VI.2}) et les valeurs trouvées dans la littérature (cf. tableau {III.1} p. 36) permet de faire les observations suivantes sur les différents coefficients :

- B : on constate que les valeurs obtenues lors de l'identification sont toutes du même

ordre de grandeur. Elles sont comprises entre 8000 et 10500 K environ. L'étude bibliographique a mis en évidence une variation de B de 2100 à 20926 K.

- A : les valeurs issues de l'identification sont relativement proches les unes des autres. Les résultats proposés par les différents auteurs étaient nettement plus dispersés.
- m : ce coefficient est toujours positif ce qui est en accord avec la littérature. Il varie entre deux valeurs extrêmes : 0,0776 et 0,3931. Ces valeurs sont néanmoins nettement inférieures à celles habituellement obtenues, qui sont comprises entre 0,727 et 2.

VI.2 - PRISE EN CONSIDERATION DE LA NATURE DU CARBURANT

La relation proposée par Wolfer est d'une formulation simple. Après identification des coefficients à l'aide d'essais, elle permet d'évaluer le délai d'auto-inflammation du carburant considéré dans des intervalles de température et de pression fixés. Cette relation ne présente qu'un intérêt restreint. Elle n'est en effet valable que pour le carburant qui a servi à l'identification et pour le dispositif expérimental utilisé. Ceci explique, comme l'a montré le paragraphe III.2.1.2, les valeurs très différentes obtenues par les nombreux auteurs pour les trois coefficients A, B et m.

Il paraît difficile de proposer une relation adaptée à n'importe quel moteur ou à n'importe quelle chambre de combustion. Il semble en revanche intéressant d'améliorer cette loi en recherchant une formulation valable pour un dispositif expérimental donné mais permettant de prédire le délai d'auto-inflammation de n'importe quel carburant. Les caractéristiques des combustibles sont en effet implicitement présentes dans la relation (III.1) : elles sont incluses dans les constantes A, B et m.

Après avoir considéré successivement les coefficients A et B comme des constantes et avoir fait intervenir les caractéristiques du carburant dans les deux autres coefficients, B et m ou A et m respectivement (cf. annexe 11), nous avons choisi de relier les trois coefficients A, m et B à certaines propriétés physico-chimiques du carburant. Cette approche, qui va maintenant être décrite, s'est en effet révélée être celle qui donnait les résultats les plus proches des mesures expérimentales.

VI.2.1 - Choix des principales caractéristiques des carburants

Les caractéristiques des différents gazoles utilisés dans ce travail sont reportées dans l'annexe 6. Les analyses précises réalisées permettent de disposer de nombreuses données physico-chimiques. Il est cependant impossible de relier les coefficients A, m et B à toutes ces données, si l'on veut conserver une expression relativement simple du délai d'auto-inflammation. Il s'agit donc maintenant de déterminer, parmi ces différentes caractéristiques, celles qui permettront de représenter au mieux un carburant et qui serviront donc à expliciter les coefficients de la relation (III.1).

La nature des composés hydrocarbonés (paraffiniques, aromatiques, naphténiques) entrant dans la composition d'un gazole joue un rôle important sur le délai d'auto-inflammation. La prise en compte de la teneur du dernier composé n'est pas nécessaire puisqu'elle se déduit des deux autres. Seules les teneurs en paraffines et en aromatiques seront donc considérées ici.

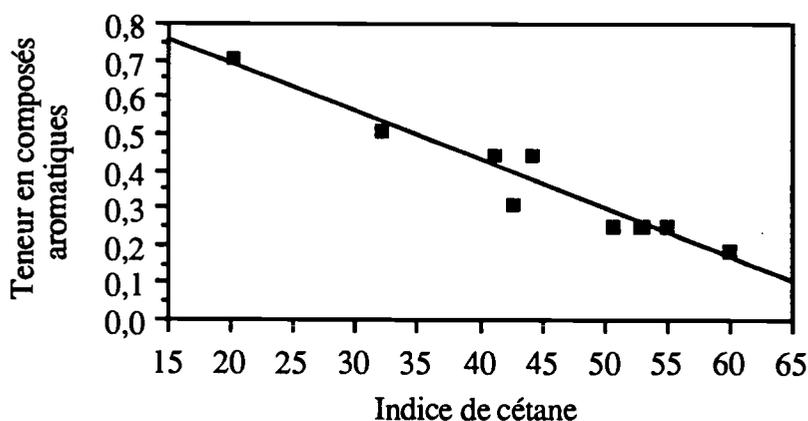


Figure {VI.4} : Evolution de la teneur en composés aromatiques en fonction de l'indice de cétane

L'analyse des compositions des différents carburants a néanmoins fait apparaître que certains gazoles ayant des teneurs en composés aromatiques et paraffiniques identiques ne présentent pas le même indice de cétane. De plus, comme le montrent les figures {VI.4} et {VI.5}, une relation semble lier la teneur en aromatiques à l'indice de cétane d'un carburant alors que la teneur en paraffines est indépendante de cet indice de cétane. L'indice de cétane a par conséquent été préféré à la teneur en composés aromatiques. Les deux premiers paramètres retenus pour décrire un carburant sont donc la teneur en composés paraffiniques et l'indice de cétane.

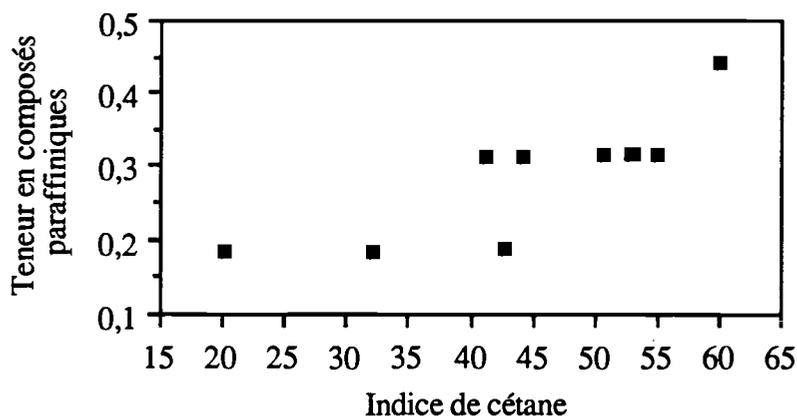


Figure {VI.5} : Evolution de la teneur en composés paraffiniques en fonction de l'indice de cétane

Un troisième paramètre a été considéré. Il s'agit de la viscosité cinématique, qui est indépendante de toutes les autres propriétés des gazoles. Cette viscosité permet de tenir compte de la nature physique du carburant.

VI.2.2 - Expression des coefficients de la relation de Wolfer en fonction des caractéristiques retenues

Les relations existant entre les différents coefficients A, m et B et les caractéristiques du carburant retenues, l'indice de cétane, la teneur en composés paraffiniques et la viscosité cinématique, ont été déterminées d'après les valeurs de A, m et B obtenues pour les différents carburants pris séparément (cf. tableau {VI.2}).

Expression du terme pré-exponentiel A

Les courbes des figures {VI.6} et {VI.7} montrent que le terme pré-exponentiel A de la relation de Wolfer semble pouvoir s'exprimer comme une fonction exponentielle de l'indice de cétane et de la teneur en composés paraffiniques.

La relation retenue est de la forme :

$$A = \exp(a \cdot IC + b \cdot t_{\text{paraf}} + c) \quad (\text{VI.1})$$

avec : IC : indice de cétane
 t_{paraf} : teneur en composés paraffiniques
 a, b, c : constantes

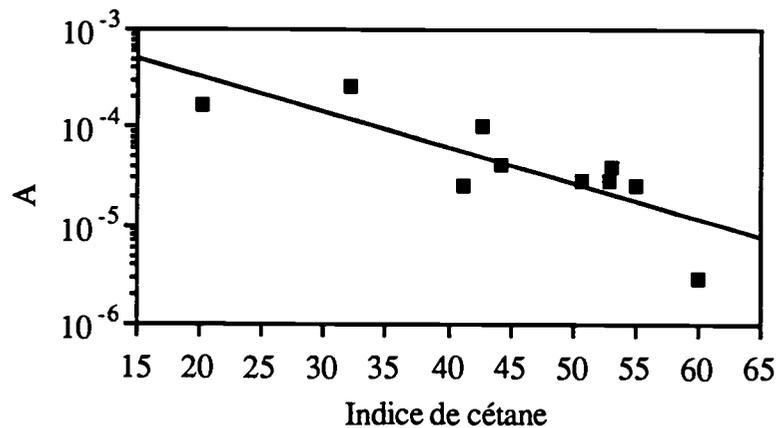


Figure {VI.6} : Evolution de A en fonction de l'indice de cétane

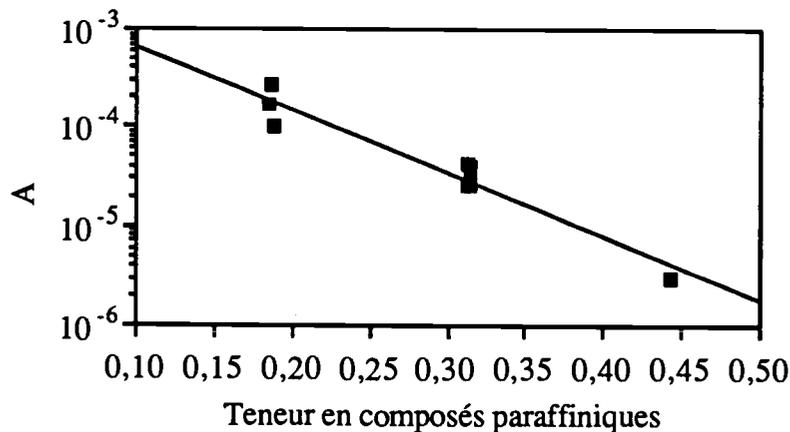


Figure {VI.7} : Evolution de A en fonction de la teneur en composés paraffiniques

Expression de m

Le coefficient m de la relation de Wolfer s'applique au terme de pression P, qui représente la pression partielle d'oxygène dans la chambre de combustion avant l'injection du carburant. Ce coefficient m peut être relié à une caractéristique physique du carburant. Une étude de l'évolution de ce coefficient en fonction des trois caractéristiques du carburant retenues a montré que la meilleure approximation de m est obtenue en l'exprimant en fonction de la viscosité cinématique. La relation existant entre ces deux paramètres est supposée être linéaire :

$$m = d \cdot \nu + e \quad (\text{VI.2})$$

avec : ν : viscosité cinématique
 d, e : constantes

Expression de B

Comme nous l'avons vu dans le chapitre III, le terme B de la relation (III.1) est en fait proportionnel à l'énergie d'activation apparente du carburant :

$$B = \frac{E_a}{R} \tag{III.2}$$

où : E_a : énergie d'activation apparente (en J / mol)
 R : constante des gaz parfaits (en J / mol.K)

Il semble par conséquent tout à fait logique de relier le terme B à des caractéristiques propres d'auto-inflammation du carburant. Nous avons choisi de l'exprimer en fonction de l'indice de cétane et de la teneur en composés paraffiniques. Les courbes des figures {VI.8} et {VI.9} montrent l'évolution du coefficient B en fonction de ces deux caractéristiques.

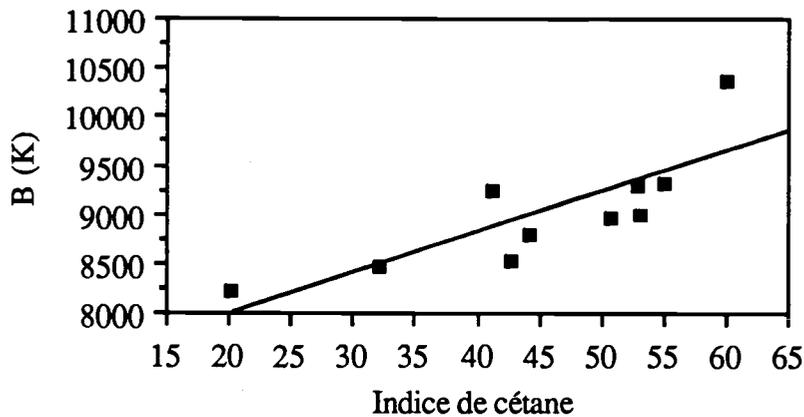


Figure {VI.8} : Evolution de B en fonction de l'indice de cétane

Les figures {VI.8} et {VI.9} semblent indiquer que l'évolution de B en fonction de l'indice de cétane et de la teneur en composés paraffiniques est de forme linéaire :

$$B = f.IC + g.t_{paraf} + h \tag{VI.3}$$

avec : IC : indice de cétane
 t_{paraf} : teneur en composés paraffiniques
 f, g, h : constantes

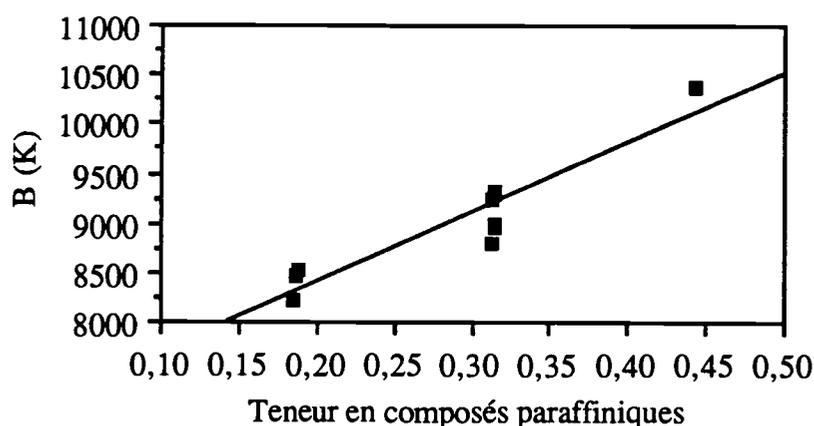


Figure [VI.9] : Evolution de B en fonction de la teneur en composés paraffiniques

VI.2.3 - Identification des différentes constantes

Les huit constantes a, b, c, d, e, f, g et h introduites dans le paragraphe précédent pour décrire les évolutions de A, m et B en fonction des trois caractéristiques des carburants retenues ont été identifiées à l'aide du logiciel Matlab, par une méthode des moindres carrés, en considérant les six premiers carburants (carburants n°1 à 6). L'identification a donné les résultats suivants :

Constantes	Valeur	σ	Intervalle de confiance à 95 %	
			L_{inf}	L_{sup}
a	0,0349	0,0196	- 0,0036	0,0734
b	-18,1888	2,8412	-23,7713	-12,6064
c	-6,3883	0,4359	- 7,2448	-5,5319
d	0,1097	0,0059	0,0981	0,1213
e	-0,2903	0,0432	- 0,3752	- 0,2054
f	10,583	12,2731	-13,5318	34,6976
g	5951,9	1796,4	2422,2	9481,7
h	6940,8	273,2	6404,1	7477,6

Tableau [VI.3] : Valeurs des différentes constantes et de leur écart-type

On constate sur ce tableau que les intervalles de confiance pour les constantes a, b, e, f et g sont relativement grands.

Les expressions de A, m et B sont les suivantes :

$$A = \exp(0,0349 \cdot IC - 18,1888 \cdot t_{\text{paraf}} - 6,3883) \quad (\text{VI.4})$$

$$m = 0,1097 \cdot v - 0,2903 \quad (\text{VI.5})$$

$$B = 10,583 \cdot IC + 5951,9 \cdot t_{\text{paraf}} + 6940,8 \quad (\text{VI.6})$$

Les figures {VI.10} à {VI.12} permettent de comparer les valeurs de A, m et B calculées à l'aide des relations (VI.4) à (VI.6) avec les coefficients issus de l'identification initiale. Les résultats sont parfaitement corrects pour B, plus discutables pour A et m.

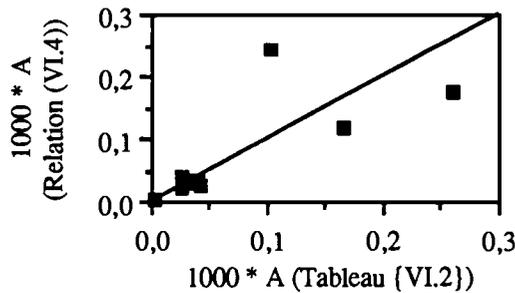


Figure {VI.10} : Comparaison entre les valeurs réelles de A et les résultats de la relation (VI.4)

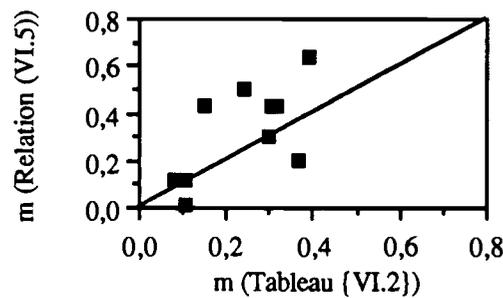


Figure {VI.11} : Comparaison entre les valeurs réelles de m et les résultats de la relation (VI.5)

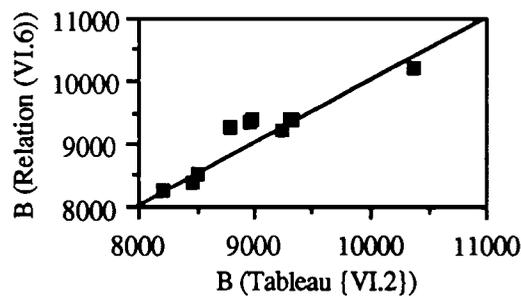


Figure {VI.12} : Comparaison entre les valeurs réelles de B et les résultats de la relation (VI.6)

En reportant dans la relation (III.1) les expressions respectives de A, m et B en fonction des caractéristiques du carburant, le délai d'auto-inflammation des différents gazoles peut être déterminé à l'aide de la relation suivante :

$$\tau = \exp(0,0349.IC - 18,1888.t_{\text{paraf}} - 6,3883).P^{-(0,1097.v-0,2903)} \cdot \exp\left[\frac{10,583.IC + 5951,9.t_{\text{paraf}} + 6940,8}{T}\right] \quad (\text{VI.7})$$

avec :

- τ : délai d'auto-inflammation (en ms)
- IC : indice de cétane
- t_{paraf} : teneur en composés paraffiniques
- P : pression initiale régnant dans la chambre avant l'injection (en bar)
- v : viscosité cinématique (en cSt)
- T : température initiale régnant dans la chambre avant l'injection (en K)

Les figures {VI.13} et {VI.14} permettent de comparer les délais d'auto-inflammation obtenus à l'aide de cette relation pour deux carburants ayant servi lors de l'identification avec les mesures expérimentales. On observe sur ces figures que l'accord entre les calculs et les mesures est très satisfaisant, dans pratiquement toutes les conditions expérimentales. Seuls les résultats aux pressions les plus élevées (P = 40 bar) semblent devoir être améliorés. Les résultats correspondant aux quatre autres carburants se trouvent dans l'annexe 12. Une aussi bonne concordance est observée, un problème subsistant toujours pour les plus hautes pressions.

Afin de valider la relation (VI.7), nous avons calculé les délais d'auto-inflammation des quatre derniers carburants non considérés lors de l'identification des huit coefficients. Les résultats obtenus sont reportés sur les figures {A12.7} à {A12.10} de l'annexe 12. La figure {VI.15}, donnée à titre d'exemple, permet de constater que l'écart existant entre les délais issus de la loi empirique et les délais expérimentaux est là encore relativement faible.

VI.3 - CONCLUSIONS

La relation de Wolfer utilisée dans la première partie de ce chapitre donne, comme le montrent les figures {A10.1} à {A10.12}, des résultats satisfaisants. Cette loi est cependant d'un emploi limité puisqu'elle n'est utilisable que pour un carburant donné, dans des conditions d'injection fixées.

Nous avons tenté d'étendre cette loi en la rendant applicable dans le cas de différents

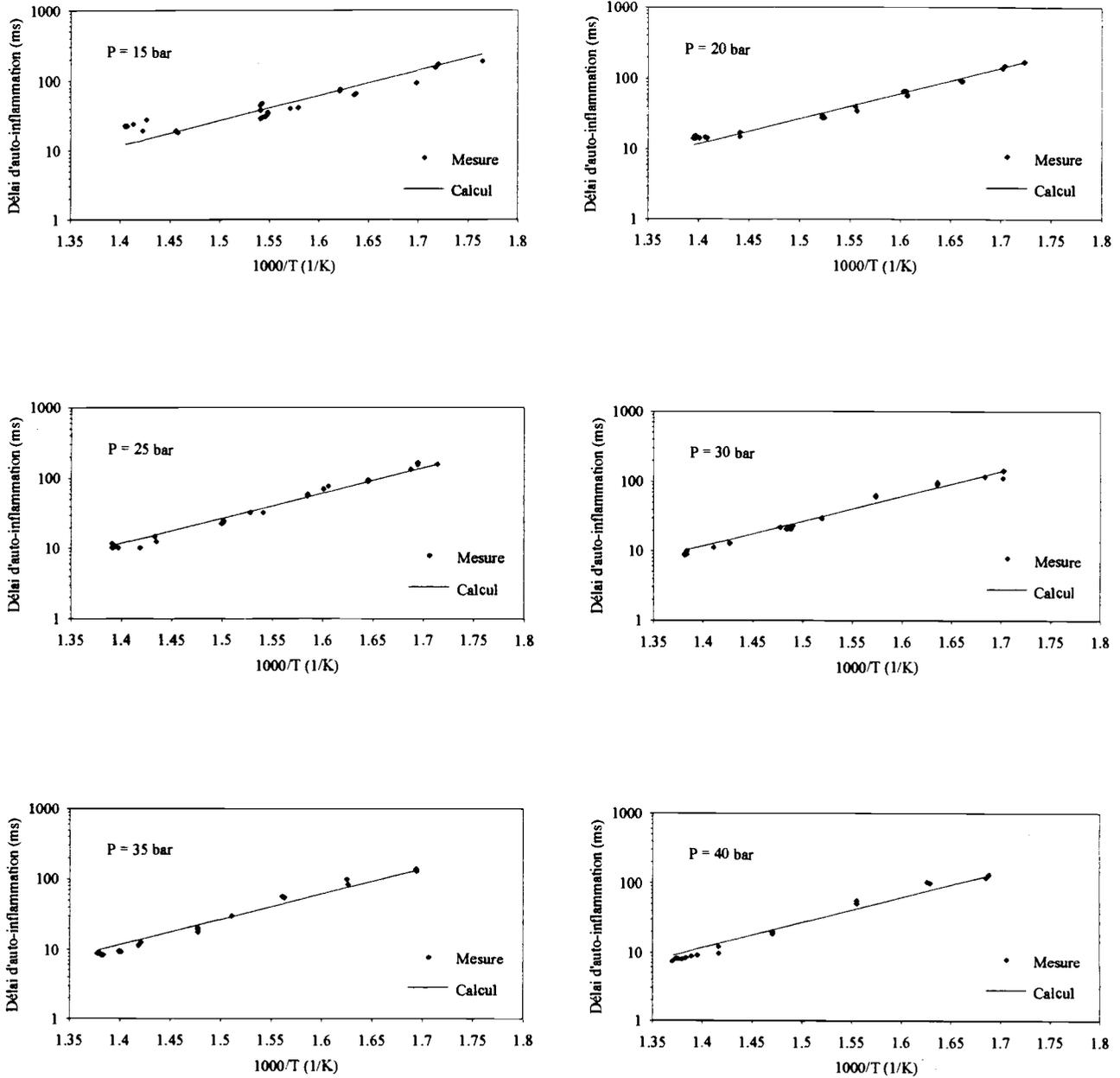


Figure {VI.13} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Bach en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)

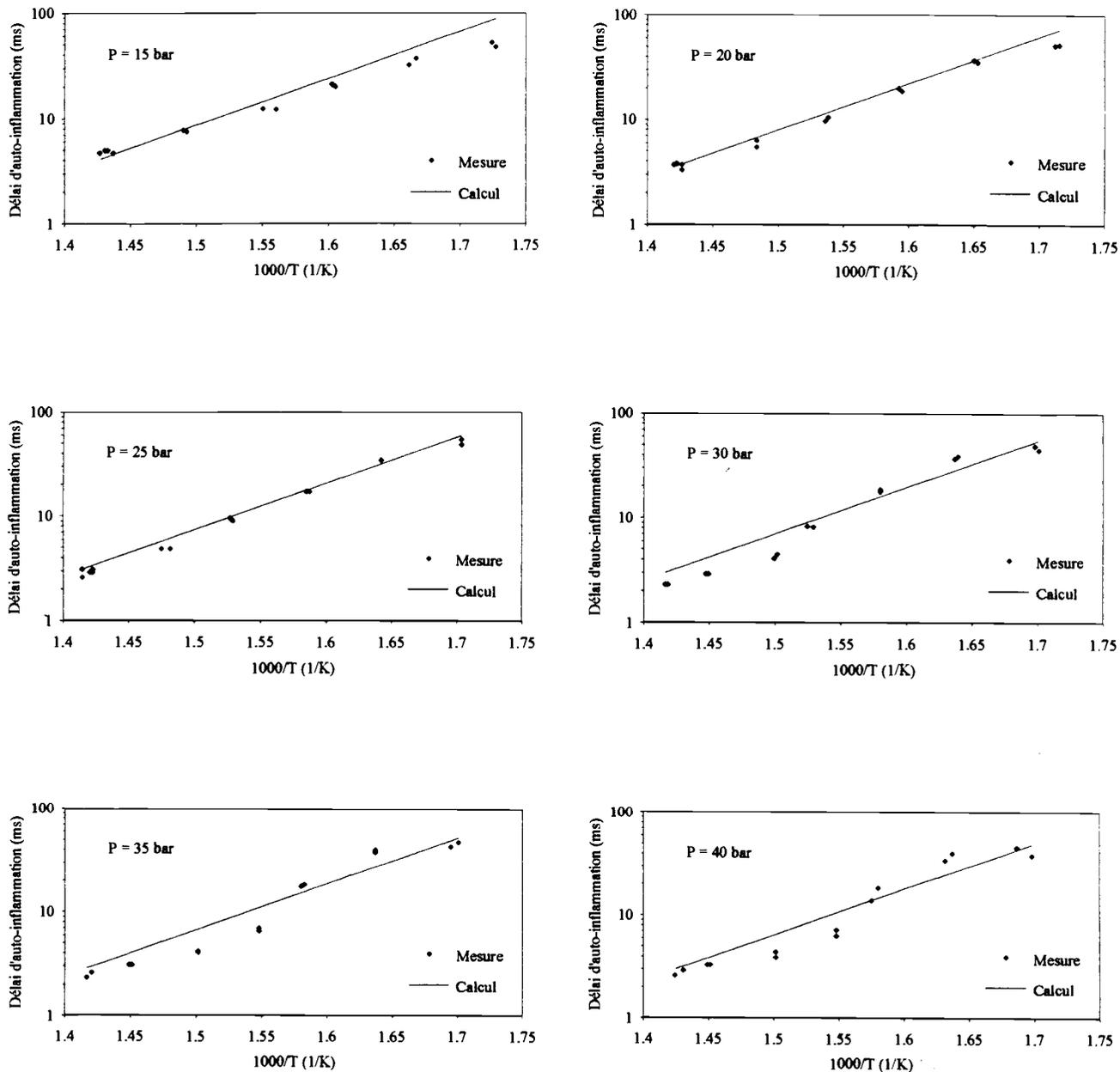


Figure {VI.14} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Häendel en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)

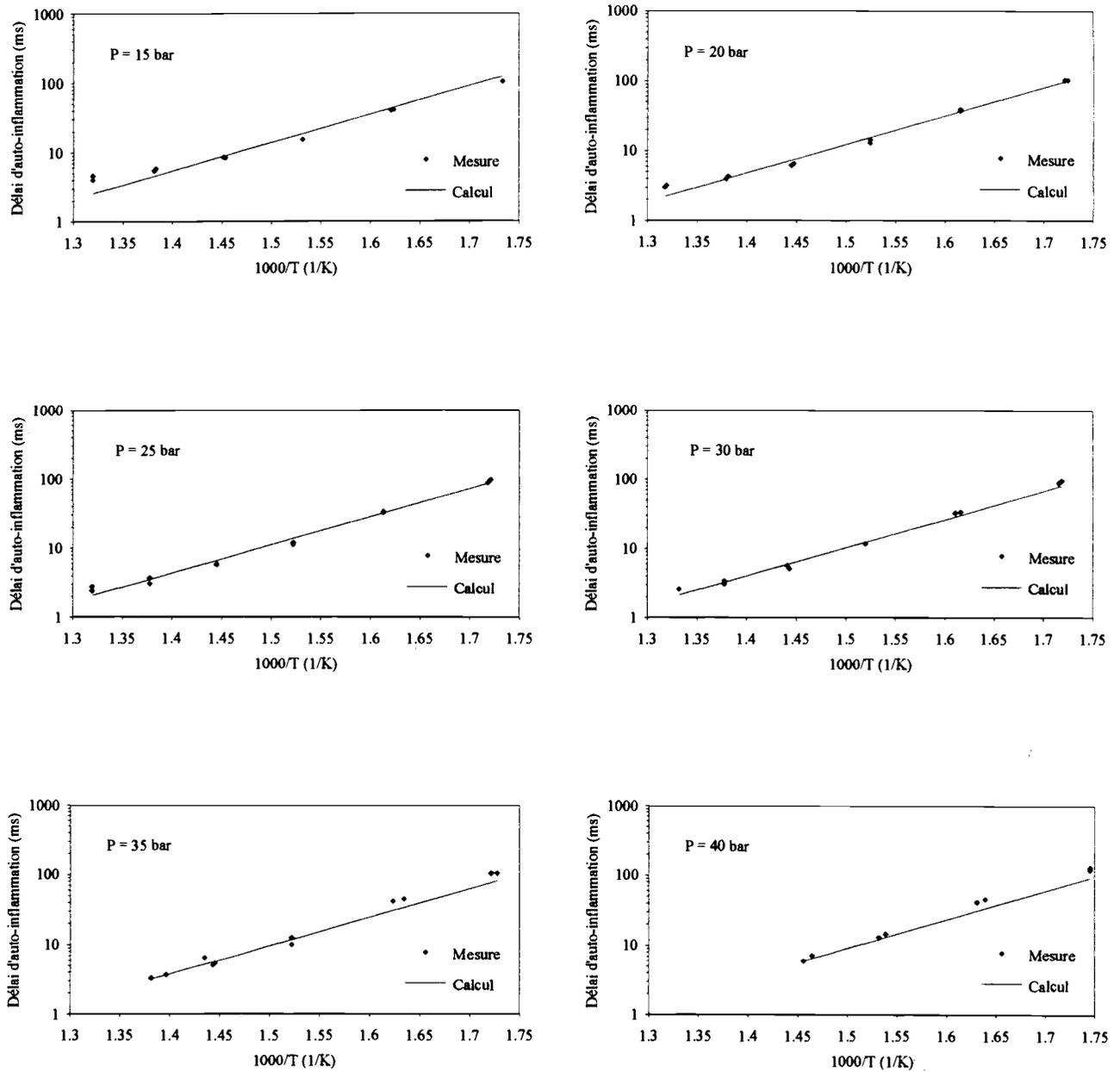


Figure {VI.15} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Rameau en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)

carburants. La relation (VI.7) proposée intègre trois données physiques concernant le combustible : l'indice de cétane, la teneur en composés paraffiniques et la viscosité cinématique. Comme l'indiquent les figures {A12.1} à {A12.10}, elle permet de prédire correctement le délai d'auto-inflammation de différents carburants. Elle peut également être utilisée pour déterminer l'indice de cétane d'un carburant de teneur en composés paraffiniques connue et dont les délais d'auto-inflammation ont été mesurés. La détermination de l'indice de cétane qui est effectuée habituellement suivant une norme stricte sur moteur CFR serait en effet beaucoup plus aisément réalisable par des mesures de délais d'auto-inflammation dans une chambre de combustion à volume constant.

Si la relation (VI.7) permet de généraliser dans une certaine mesure la loi de Wolfer, en la rendant utilisable dans le cas de différents carburants, elle ne tient toujours pas compte des conditions expérimentales, et notamment des conditions d'injection, qui sont elles aussi implicitement présentes dans les trois coefficients. Le dispositif expérimental utilisé dans ce travail n'autorisant pas de variations suffisamment significatives de la pression d'injection, cette dernière n'a pas pu être intégrée dans la relation (VI.7). Il serait néanmoins intéressant de poursuivre l'étude commencée ici de telle sorte que la relation finale puisse être applicable dans différentes conditions d'injection.

La loi empirique proposée présente toutefois un inconvénient majeur, que l'on retrouve dans toute relation du type "boîte noire". Elle ne permet pas de tenir compte de phénomènes chimiques particuliers. Nous avons exprimé dans ce chapitre le délai d'auto-inflammation à l'aide d'une relation linéaire (en coordonnées semi-logarithmiques). L'étude de l'influence de la température sur le délai réalisée dans le chapitre V a pourtant mis en évidence que, pour certains carburants et pour certaines pressions, l'évolution du délai en fonction de la température ne peut être considérée comme linéaire sur tout l'intervalle étudié. Des courbes en "S" ont été observées. Ces courbes peuvent laisser supposer une modification des mécanismes chimiques conduisant à l'auto-inflammation suivant la température à laquelle on se trouve (cf. chapitre V). Un tel phénomène n'est pas représentable dans une loi empirique où toute la chimie est regroupée en une seule relation.

La loi que nous avons proposée permet de donner une approximation très correcte du délai d'auto-inflammation de différents carburants. Il est toutefois nécessaire, à l'heure où de puissants calculateurs nous le permettent, de chercher à prédire le délai d'auto-inflammation d'un carburant à l'aide de modèles plus détaillés, qui décrivent mieux les différents mécanismes conduisant à l'auto-inflammation des gazoles et qui sont susceptibles de tenir compte de phénomènes chimiques tels que l'inflammation en deux stades. C'est cette dernière approche que nous allons traiter dans le chapitre suivant.

CHAPITRE VII

MODELE CINETIQUE DU DELAI D'AUTO-INFLAMMATION DANS UN MILIEU HETEROGENE

La loi empirique proposée dans le chapitre précédent permet de déterminer le délai d'auto-inflammation de n'importe quel carburant de composition connue, dans la chambre de combustion à volume constant utilisée. Comme toute relation globale, et bien qu'elle soit issue de l'expression d'une vitesse de réaction de forme Arrhénius, cette loi n'intègre en aucune façon les différentes réactions chimiques conduisant au délai d'auto-inflammation. Connaissant les conditions initiales avant injection, elle permet la détermination du délai d'auto-inflammation d'un carburant mais elle ne décrit pas le processus chimique réel.

Afin de mieux prendre en compte les différents phénomènes qui sont à l'origine de l'auto-inflammation, les chimistes ont par conséquent proposé des mécanismes très détaillés, permettant de décrire les étapes successives menant à l'inflammation d'un carburant. Ces mécanismes purement cinétiques ne tiennent pas compte de phénomènes physiques tels que la turbulence. Le système différentiel à résoudre est alors un système zéro-dimensionnel, où la seule variable est le temps. Ces modèles peuvent comporter plusieurs centaines de réactions chimiques. Leur implantation dans les codes de calcul tridimensionnels actuels conduirait à des temps de calcul inacceptables.

Sans pour autant revenir à une formulation empirique du délai d'auto-inflammation, telle que celle décrite dans le chapitre VI, il s'est avéré indispensable de "réduire" les mécanismes chimiques proposés par les cinéticiens. C'est pourquoi des réactions globales ou des mécanismes semi-globaux sont en fait utilisés pour modéliser l'auto-inflammation dans les programmes de simulation décrivant les différentes étapes de la combustion dans les moteurs Diesel.

Le nombre de réactions permettant de décrire l'auto-inflammation varie selon les auteurs et les résultats de trois mécanismes différents seront comparés dans ce chapitre. Les délais obtenus à l'aide de ces trois modèles seront confrontés aux mesures expérimentales ainsi qu'aux délais déterminés par la loi empirique du chapitre VI.

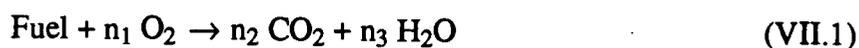
VII.1 - DESCRIPTION DES DIFFERENTS MECANISMES CONSIDERES

Trois mécanismes sont étudiés : un mécanisme global, comportant une seule réaction, proposé par Westbrook [25], un mécanisme semi-global à 4 réactions développé par Zellat [37] et un mécanisme plus complet dans lequel interviennent 34 réactions. Ce dernier mécanisme a été élaboré au Laboratoire de Mécanique Physique de l'Université de Paris VI par Sahetchian et col. [41] et mis au point en collaboration avec le Laboratoire de Machines Thermiques de l'Ecole Centrale de Lyon. Il permet, outre la prédiction du délai d'auto-inflammation, de suivre les transformations chimiques en différents points de la chambre de combustion et d'évaluer ainsi les différents polluants susceptibles de se former pendant la combustion.

VII.1.1 - Modèle de Westbrook

La taille et la vitesse des ordinateurs existant aujourd'hui ne permettant pas d'introduire dans les modèles tridimensionnels des mécanismes chimiques détaillés, Westbrook et col. [25] ont développé un mécanisme à une seule réaction représentant l'oxydation d'un gazole quelconque.

La réaction globale considérée est la réaction classique de combustion complète :



où les coefficients stœchiométriques n_i dépendent de la nature du carburant.

Cette réaction permet d'approximer de la façon la plus avantageuse les effets des nombreuses réactions élémentaires qui se produisent réellement. Sa vitesse de réaction doit par conséquent prendre en considération tous les taux de réactions individuels correspondant au mécanisme complet de l'oxydation. Cette vitesse de réaction s'exprime dans le modèle simplifié de Westbrook [25] par la relation suivante :

$$\dot{\omega} = A \cdot T^z \cdot \exp(-E_a/RT) \cdot [\text{Fuel}]^a \cdot [\text{Oxydant}]^b \quad (\text{VII.2})$$

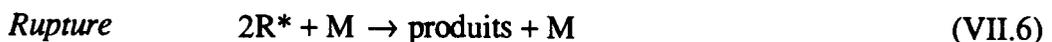
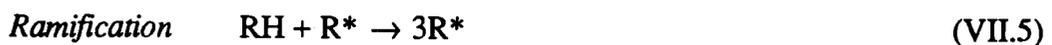
avec :	$\dot{\omega}$: vitesse de réaction (en mol / cm ³ .s)
	A	: facteur pré-exponentiel
	T	: température (en K)
	z	: constante
	E _a	: énergie d'activation (en cal / mol)
	R	: constante des gaz parfaits (en cal / mol.K)
	[Fuel]	: concentration en carburant (en mol / cm ³)

[Oxydant] : concentration en oxydant (en mol / cm³)
 a, b : ordres partiels (ils ne sont pas forcément égaux aux coefficients stœchiométriques)

Les cinq constantes apparaissant dans cette relation (A, z, E_a, a et b) sont déterminées par comparaison entre des vitesses de combustion numériques et expérimentales. Elles dépendent notamment de la nature du carburant, de la pression et de la richesse.

VII.1.2 - Modèle de Zellat

Le mécanisme proposé par Zellat [37] prend en compte la formation de radicaux libres pendant le délai d'auto-inflammation. Il comporte, comme il a été mentionné au chapitre III, quatre réactions. Chacune de ces réactions correspond à une étape du mécanisme de réaction en chaîne conduisant à l'auto-inflammation :



où RH représente le combustible, R* le radical formé à partir du combustible, M une molécule quelconque et où ΔQ est l'énergie dégagée par la réaction de propagation.

L'étape d'initiation (VII.3) permet de créer en nombre réduit des radicaux libres R*. Cette réaction d'initiation possède une forte énergie d'activation. Elle devient rapidement négligeable puisque de nouveaux radicaux se forment en quantité plus importante dans les étapes suivantes. La réaction d'initiation est suivie par l'étape de propagation (VII.4) qui correspond à l'oxydation du carburant. C'est une étape fortement exothermique. Elle régénère également le radical R*. L'étape de ramification (VII.5) multiplie le nombre de radicaux ce qui se traduit par une augmentation de la vitesse de réaction. La dernière étape de ce mécanisme est l'étape de rupture (VII.6) : les radicaux libres se recombinaient pour donner une espèce inerte. Cette étape nécessite la présence d'une espèce quelconque afin d'évacuer l'excès d'énergie résultant de la recombinaison des radicaux ainsi qu'une énergie d'activation nulle.

Les taux de production chimique de ces quatre réactions s'expriment de la façon suivante :

$$\dot{\omega} = A \cdot T^z \cdot \exp(-T_a/T) \cdot \prod_i \left(\frac{\rho_i}{W_i} \right)^{a_i} \quad (\text{VII.7})$$

- où :
- $\dot{\omega}$: vitesse de réaction (en mol / cm³.s)
 - A : facteur pré-exponentiel
 - T : température (en K)
 - z : constante
 - T_a : température d'activation (en K)
 - ρ_i : masse volumique de l'espèce i (en g / cm³)
 - W_i : masse moléculaire de l'espèce i (en g / mol)
 - a_i : ordre partiel relatif à l'espèce i

Les constantes A, z, T_a et a_i intervenant dans cette relation sont déterminées soit à partir d'une analyse phénoménologique, soit par ajustement avec des résultats expérimentaux obtenus lors d'injection de carburant dans une chambre de combustion à volume constant.

VII.1.3 - Modèle de Sahetchian

Le mécanisme réduit proposé par Sahetchian et col. [41] est basé sur un modèle de cinétique chimique comportant 34 réactions élémentaires. Ce mécanisme permet notamment de décrire l'isomérisation des radicaux RO₂. Cette réaction d'isomérisation est une des étapes les plus importantes du processus d'auto-inflammation. Le modèle considéré ici a été développé initialement pour décrire l'auto-inflammation dans un moteur CFR [42]. L'auto-inflammation dans les moteurs Diesel pouvant s'apparenter à celle étant à l'origine du cliquetis dans les moteurs à essence, seules quelques modifications ont été apportées au mécanisme original [42] afin de le rendre utilisable dans le cas d'un moteur Diesel.

Le mécanisme chimique reproduisant l'auto-inflammation dans la chambre de combustion à volume constant fait intervenir 19 espèces chimiques. Il est explicité dans le tableau { VII.1 }. La vitesse de chaque réaction s'exprime par l'équation générique d'Arrhénius :

$$\dot{\omega} = A \cdot T^z \cdot \exp(-E_a/RT) \cdot \prod_i c_i^{\alpha_i} \quad (\text{VII.8})$$

- avec :
- $\dot{\omega}$: vitesse de réaction (en mol / cm³.s)
 - A : facteur pré-exponentiel
 - T : température (en K)
 - z : constante
 - E_a : énergie d'activation (en cal / mol)

$R + O_2 \rightarrow RO_2$	(VII.9)
$RO_2 \rightarrow ROOH^\circ$	(VII.10)
$ROOH^\circ \rightarrow RO_2$	(VII.11)
$ROOH^\circ \rightarrow P + OH$	(VII.12)
$ROOH^\circ + O_2 \rightarrow OOROOH$	(VII.13)
$OOROOH \rightarrow RO_2H + OH$	(VII.14)
$RO_2H \rightarrow OH + R$	(VII.15)
$R + O_2 \rightarrow P + HO_2$	(VII.16)
$RO_2 + P \rightarrow RO_2H + R$	(VII.17)
$HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$	(VII.18)
$HO_2 + P \rightarrow H_2O_2 + R$	(VII.19)
$RO_2 \rightarrow R + O_2$	(VII.20)
$HO_2 + RH \rightarrow H_2O_2 + R$	(VII.21)
$HO_2 + HO_2 + N_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2 + N_2$	(VII.22)
$RH + O_2 \rightarrow R + HO_2$	(VII.23)
$HO_2 + P \rightarrow H_2O_2 + R$	(VII.24)
$H_2O_2 + N_2 \rightarrow 2 OH + N_2$	(VII.25)
$OH + H_2 \rightarrow H_2O + H$	(VII.26)
$H + O_2 \rightarrow OH + O$	(VII.27)
$H + O_2 + N_2 \rightarrow HO_2 + N_2$	(VII.28)
$CO + HO_2 \rightarrow CO_2 + OH$	(VII.29)
$OH + C \rightarrow CO + H$	(VII.30)
$CO + OH \rightarrow CO_2 + H$	(VII.31)
$OH + RH \rightarrow R + H_2O$	(VII.32)
$R \rightarrow 12 C + 12 H_2 + H$	(VII.33)
$2 OH + C \rightarrow CO_2 + H_2$	(VII.34)
$R + 18 O_2 \rightarrow 12 CO_2 + 12 H_2O + H$	(VII.35)
$OH + P \rightarrow R + H_2O$	(VII.36)
$O + RH \rightarrow OH + R$	(VII.37)
$O + H_2 \rightarrow OH + H$	(VII.38)
$2 H + 2 C \rightarrow 2 C + H_2$	(VII.39)
$H + H + N_2 \rightarrow H_2 + N_2$	(VII.40)
$H + OH + N_2 \rightarrow H_2O + N_2$	(VII.41)
$O + OH \rightarrow O_2 + H$	(VII.42)

Tableau {VII.1} : Mécanisme chimique proposé pour l'auto-inflammation du n-dodécane [41]

- R : constante des gaz parfaits (en cal / mol.K)
- c_i : concentration de l'espèce i (en mol / cm³)
- a_i : ordre partiel relatif à l'espèce i (il correspond généralement au coefficient stoechiométrique)

Comme tout schéma réactionnel, le mécanisme proposé comprend des réactions d'initiation, de propagation, de ramification et de rupture.

Il est reconnu que la première réaction dissociant les lourdes molécules de carburant est la réaction d'initiation :



Cette transformation, très endothermique, possède une grande énergie d'activation et est très lente. Son influence devient rapidement négligeable dès lors que le processus de ramification est opérant.

Après cette étape d'initiation, se développent en parallèle des réactions de ramification et de propagation (Sahetchian et col. [41]). L'augmentation importante de la température pendant la combustion (de 300 à 2000 K) se produisant d'une façon hétérogène dans tout le volume de la chambre de combustion, il semble illusoire d'utiliser pour décrire la combustion Diesel un mécanisme simplifié incluant une seule réaction de ramification. Le modèle développé par Sahetchian et col. [41] comporte donc trois types de réactions de ramification, correspondant à différents domaines de température. Les espèces chimiques concernées par la ramification dépendent de ces domaines de température, comme le montre le tableau {VII.2}.

Espèces chimiques	Domaine de température
RO ₂ , RO ₂ H	300 K < T < 900 K
HO ₂ , H ₂ O ₂	700 K < T < 1100 K
H	800 K < T

Tableau {VII.2} : Espèces chimiques impliquées dans les réactions de ramification pour les différents domaines de température

La ramification commence donc dans les zones de basse température. Dans la combustion des hydrocarbures comportant plus de cinq atomes de carbone, les réactions d'isomérisation des radicaux peroxy RO₂ jouent un rôle fondamental. Le réarrangement interne de ces radicaux peut être représenté par la réaction (VII.10), qui est suivie par les réactions (VII.13) et (VII.14) :



La figure {VII.1} décrit de façon schématique les réactions du radical peroxyde RO_2 conduisant à l'accumulation d'agents de ramification dans le domaine des basses températures.

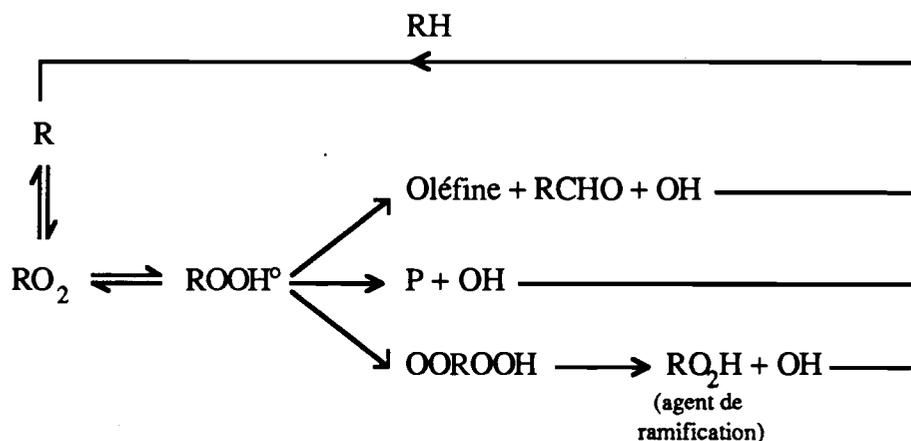


Figure {VII.1} : Mécanisme d'oxydation à basse température des hydrocarbures comportant plus de cinq atomes de carbone

Avec l'augmentation de la température, l'importance des réactions d'isomérisation diminue. Le rôle joué par les radicaux hydroperoxydes HO_2 et par le peroxyde d'hydrogène H_2O_2 devient alors prépondérant.

Le mécanisme proposé par Sahetchian et col. [41] devant permettre de décrire l'évolution de la température et de la pression ainsi que la formation des particules non seulement pendant le délai d'auto-inflammation mais également pendant tout le reste de la combustion, des réactions supplémentaires ont été insérées au mécanisme initial [42]. Un schéma réactionnel détaillé, incluant toutes les réactions élémentaires ayant lieu pendant la combustion, aurait augmenté de façon considérable les temps de calcul sur ordinateur. Aussi, nous avons préféré ajouter des réactions globales. Il s'agit des réactions (VII.30), (VII.33), (VII.34) et (VII.35). Deux de ces réactions représentent la consommation du carburant : les réactions (VII.33) et (VII.35). La réaction (VII.35) est une réaction d'oxydation totale. Elle est fortement exothermique et ne conduit pas à une augmentation des radicaux actifs, le radical H remplaçant le radical R . La réaction (VII.33) décrit quant à elle la dégradation sans oxydation du carburant en atomes de carbone et en hydrogène moléculaire.



La formation et l'oxydation des particules dans la combustion Diesel sont des phénomènes très complexes. Une simplification a été apportée ici au moyen des atomes de carbone, la masse des particules étant en effet équivalente à la masse globale des atomes de carbone. Ces atomes de carbone apparaissent dans deux types de réaction : dans la réaction d'oxydation (VII.30) avec formation de CO et dans la réaction de rupture hétérogène (VII.39).



Les constantes de vitesse de ces réactions ont été choisies de façon à reproduire les résultats expérimentaux.

Pour limiter le nombre d'espèces et de réactions chimiques, quelques simplifications supplémentaires ont été introduites :

- dans la réaction (VII.14), l'hydroperoxyde RO_2H apparaît à la place d'un kétohydroperoxyde $\text{O}_2\text{RO}_2\text{H}$;
- dans la réaction (VII.15), R correspond à un radical RO que l'on suppose décomposé ;
- dans les réactions (VII.17), (VII.19), (VII.24) et (VII.36), le radical issu du composé intermédiaire est supposé être R.

Il convient de noter qu'une distinction précise entre les différents types de réactions (ramification, propagation, rupture) n'est pas aisée. Certains radicaux peuvent en effet jouer un rôle différent selon les conditions. Par exemple, la création de HO_2 à basse température peut être considérée comme une rupture alors qu'à plus haute température, ce radical permet la ramification par l'intermédiaire de H_2O_2 .

Enfin, un avantage important du modèle proposé par Sahetchian et col. [41] est qu'il peut être utilisé pour décrire l'auto-inflammation de différents carburants aliphatiques, sans apporter de modifications aux 34 réactions chimiques. En effet, le carburant n'apparaît dans le mécanisme que sous une formulation symbolique : RH. De même, les produits formés à partir des carburants initiaux ne sont pas explicités de façon détaillée mais sous un terme générique, tel que R ou P, qui peut représenter des espèces diverses. Il suffit simplement d'introduire au niveau des réactions (VII.33) et (VII.35) les coefficients correspondants.

VII.2 - COMPARAISON ENTRE LES DIFFERENTS MECANISMES

Les trois mécanismes présentés dans le paragraphe précédent ont été implantés dans le

code de calcul tridimensionnel KIVA II afin de comparer leurs performances respectives.

VII.2.1 - Expérimentation

Cinq points expérimentaux ont été considérés pour valider les différents mécanismes d'auto-inflammation testés. Ces points concernent des mesures de délai d'auto-inflammation du n-dodécane dans une chambre de combustion à volume constant. La chambre de combustion considérée est de dimensions réduites par rapport à celle utilisée dans le reste du travail présenté ici. Afin de conserver un nombre de mailles compatible avec un temps de calcul raisonnable, nous avons en effet été conduits à réaliser une nouvelle chambre de combustion, de volume nettement inférieur à la chambre initiale. L'ensemble des caractéristiques relatives à ces essais (chambre de combustion, injection, carburant) est résumé dans le tableau {VII.3}.

Chambre de combustion	Diamètre	40 mm
	Longueur	100 mm
Injection	Injecteur	monotrou ; $\varnothing_{inj} = 0,25$ mm $P_{tarage} = 225$ bar
	Pompe	Quantité injectée : 19,7 mg / coup Durée d'injection : 3,3 ms
Carburant	Nature	n-dodécane
	Masse volumique	0,75 kg / dm ³

Tableau {VII.3} : Caractéristiques du dispositif expérimental

Les cinq points expérimentaux retenus correspondent à cinq conditions expérimentales différentes. Ces conditions sont reportées dans le tableau {VII.4}. La pression initiale régnant dans la chambre de combustion avant l'injection du carburant varie entre 15 et 25 bar alors que la température initiale est comprise entre 715 et 760 K.

Essai	1	2	3	4	5
P (bar)	15	15	20	20	25
T (K)	719	741	715	740	760

Tableau {VII.4} : Conditions expérimentales relatives aux cinq points expérimentaux retenus

VII.2.2 - Résultats numériques

Lors des simulations numériques, la chambre de combustion est divisée en un certain nombre de volumes élémentaires. Ce maillage ne doit pas être trop grossier auquel cas des

phénomènes locaux pourraient être omis. Il ne doit pas être trop fin non plus afin que les différents modèles utilisés dans le code de calcul répondent aux hypothèses de leur fondement. La chambre de combustion a donc été divisée en 60 cellules radiales et en 16 cellules axiales. Ces cellules n'ont pas toutes la même taille. Dans la zone proche de l'axe (rayon inférieur ou égal à 20 mm), la présence du jet de carburant nécessite des mailles relativement fines : 6,25 mm x 0,5 mm. Dans le reste de la chambre, une discrétisation aussi précise n'est pas nécessaire et les dimensions d'une cellule sont alors 6,25 mm x 1 mm. Cette discrétisation, reportée sur la figure {VII.2}, est apparue comme un bon compromis dans une résolution bidimensionnelle (on suppose l'axisymétrie totale) [43].

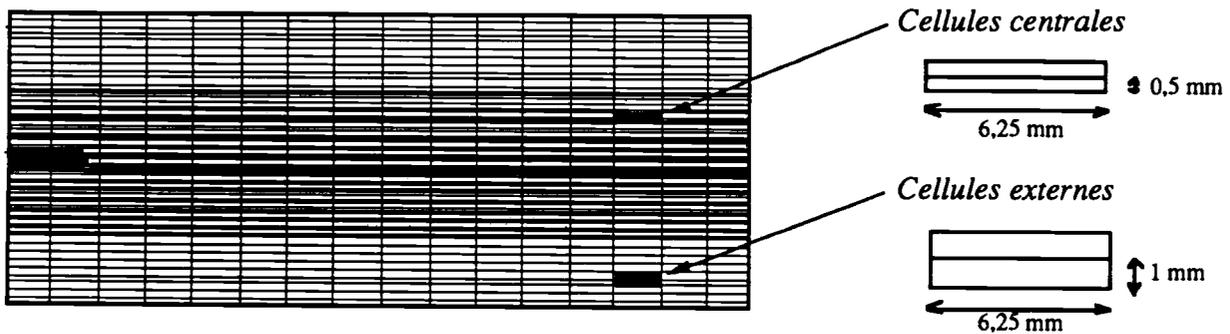


Figure {VII.2} : Maillage de la chambre de combustion

Après avoir calé les différents coefficients intervenant dans les trois mécanismes à l'aide de l'essai n°1, nous avons ensuite calculé les délais correspondant aux autres essais. Le tableau {VII.5} et la figure {VII.3} permettent de comparer les résultats obtenus. Sont également reportées dans ce tableau et sur la figure les valeurs de délai calculées à l'aide de la relation de Wolfer (III.1) qui s'écrit dans le cas du n-dodécane sous la forme suivante :

$$\tau = 5,3017 \cdot 10^{-5} \cdot P^{-0,1144} \cdot \exp(8269,4/T) \quad (\text{VII.43})$$

Essai	1	2	3	4	5	Critère de délai
P (bar)	15	15	20	20	25	
T (K)	719	741	715	740	760	
τ_{exp} (ms)	3,6	2,5	3,3	2,2	1,7	Pression
τ_{Wolfer} (ms)	3,84	2,73	3,97	2,68	1,95	
$\tau_{\text{Westbrook}}$ (ms)	3,638	1,727	3,088	1,71	0,813	T > 1200 K
τ_{Zellat} (ms)	3,57	2,59	2,75	2,24	1,38	T > 1200 K
$\tau_{\text{Sahetchian}}$ (ms)	3,47	2,37	3,33	2,35	1,62	[OH] > 10 ⁻⁷ mol/cm ³

Tableau {VII.5} : Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés à l'aide des différents mécanismes

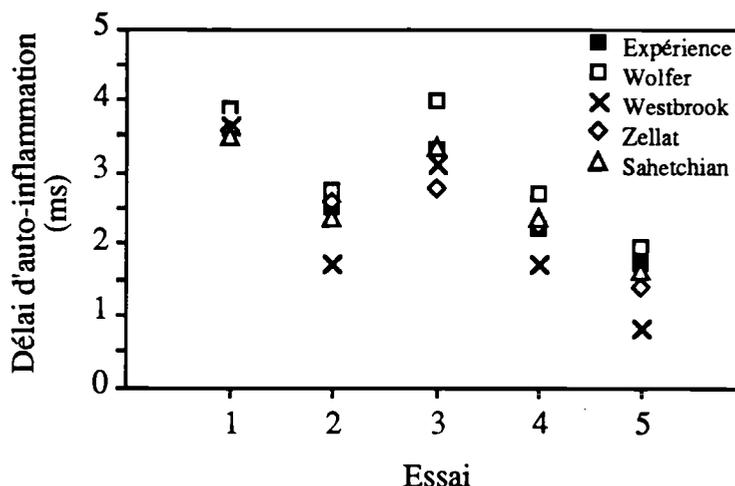


Figure {VII.3} : Comparaison entre les résultats des différents modèles

Le tableau {VII.5} indique que les critères adoptés pour déterminer le délai d'auto-inflammation sont différents. Cependant, les résultats obtenus avec les trois mécanismes testés peuvent être comparés, les trois critères choisis étant équivalents.

Le modèle de Sahetchian permet d'accéder, en plus du délai d'auto-inflammation, aux concentrations de nombreuses espèces chimiques ainsi qu'à l'évolution de la température. Il s'est avéré que l'augmentation brutale de la concentration en OH correspond exactement à l'accroissement de température (ou de pression) qui se produit au moment de l'auto-inflammation. Le critère de pression retenu pour les mesures expérimentales et celui de la concentration en OH pour le mécanisme de Sahetchian sont donc équivalents. Le critère de température adopté dans le cas des modèles de Westbrook et de Zellat est également équivalent aux deux critères cités précédemment puisqu'il correspond lui aussi à une brusque augmentation de température. En outre, des simulations ont été effectuées dans le cas du modèle de Zellat pour l'essai n°1 avec différentes températures seuil. Les délais obtenus (cf. tableau {VII.6}) ne sont pas significativement différents et montrent que l'influence de la température seuil choisie est faible.

Température seuil (K)	Délai calculé (ms)
800	3,506
1200	3,572
2000	3,576

Tableau {VII.6} : Influence de la température seuil choisie sur le délai d'auto-inflammation (modèle de Zellat, essai n°1)

Le tableau {VII.7} montre les erreurs relatives correspondant aux différents cas traités.

On constate sur ce dernier tableau que le modèle proposé par Sahetchian et col. [41] semble donner les résultats les plus satisfaisants : l'écart relatif existant entre les délais calculés et les délais expérimentaux est stable et voisin de 5 %. Sa valeur maximale est de 7 %. Les délais calculés à l'aide de la relation globale de Westbrook [25] sont quant à eux très éloignés des mesures expérimentales (l'écart relatif est supérieur à 50 % pour l'un des essais).

Essai	1	2	3	4	5
Wolfer	+ 6,7 %	+ 9,2 %	+ 20,3 %	+ 21,8 %	+ 14,7 %
Westbrook	+ 1,0 %	- 30,9 %	- 6,4 %	- 22,3 %	- 52,2 %
Zellat	- 0,8 %	+ 3,6 %	- 16,7 %	+ 1,8 %	- 18,8 %
Sahetchian	- 3,6 %	- 5,2 %	+ 0,9 %	+ 6,8 %	- 4,7 %

Tableau {VII.7} : Erreurs relatives

Les résultats obtenus avec le mécanisme à quatre réactions de Zellat sont intermédiaires entre ceux des modèles de Sahetchian et de Westbrook et sont légèrement meilleurs que ceux issus de la loi de Wolfer. L'écart relatif maximal atteint pratiquement 20 %.

VII.3 - CONCLUSIONS

Le modèle de Westbrook consiste en une seule réaction globale, dans laquelle interviennent cinq coefficients. Ces coefficients sont déterminés pour un essai donné de telle sorte que les délais mesurés et calculés coïncident. Dans notre cas, les coefficients ont été choisis de façon à ce que le délai calculé à l'aide du modèle de Westbrook corresponde au délai mesuré expérimentalement dans le cas de l'essai n°1. Les résultats obtenus avec ce modèle dans des conditions expérimentales différentes (essais n°2 à 5) ont montré que, si les conditions initiales de température ou de pression (qui correspondent au point de fonctionnement dans le cas d'un moteur) changent, le mécanisme de Westbrook ne donne plus satisfaction. Il est alors nécessaire de réajuster les cinq coefficients. Le modèle de Westbrook n'est donc valable que pour une seule condition de température et de pression. Un tel modèle semble par conséquent ne présenter qu'un intérêt limité dans un code de calcul devant permettre de simuler le cycle d'un moteur Diesel dans diverses conditions expérimentales.

Le modèle de Zellat donne des résultats plus satisfaisants que la réaction globale de Westbrook. L'écart relatif est toutefois encore important (de l'ordre de 20 % au maximum). Ce modèle est pourtant représentatif de l'inflammation réelle, puisque les réactions chimiques qu'il intègre permettent de prendre en compte les différentes étapes que l'on rencontre dans un mécanisme de réactions en chaîne classique : initiation, propagation, ramification et rupture.

Zellat a considéré le mécanisme le plus simple possible, en décrivant chaque étape par l'intermédiaire d'une seule réaction. Cette approche, caractérisée par une simplification maximale du mécanisme de réactions en chaîne, bien qu'elle apporte une amélioration notable par rapport aux modèles globaux du type de celui de Westbrook, semble toutefois pouvoir être améliorée en lui ajoutant quelques réactions supplémentaires. Ces réactions supplémentaires doivent permettre de mieux tenir compte des différents radicaux et espèces intermédiaires créés pendant le délai d'auto-inflammation, et qui jouent un rôle non négligeable.

C'est dans ce but qu'a été développé le modèle de Sahetchian. Ce mécanisme comporte 34 réactions chimiques qui paraissent décrire de façon tout à fait satisfaisante le phénomène d'auto-inflammation. Les résultats obtenus dans les différentes conditions expérimentales sont excellents : l'écart relatif maximal est inférieur à 7 % alors que l'erreur expérimentale de mesure avoisine 6 %. Le mécanisme de Sahetchian est basé sur un mécanisme de réactions en chaîne beaucoup plus complet que celui de Zellat. Contrairement à l'approche de Zellat, les différents radicaux intervenant dans le processus d'inflammation sont souvent identifiés et ne sont plus regroupés sous un terme général R. Différentes réactions de ramification, de propagation et de rupture sont également considérées selon les domaines de température. Le mécanisme proposé par Sahetchian, tout en demeurant intégrable dans un code de calcul tridimensionnel, est néanmoins suffisamment détaillé pour décrire correctement l'auto-inflammation du n-dodécane dans la chambre de combustion à volume constant utilisée. Comme les différentes étapes de l'inflammation sont décrites de façon relativement précise et que des réactions permettant de simuler la combustion après l'inflammation sont également présentes, ce modèle semble pouvoir être utilisé dans un cadre plus large que l'étude de l'auto-inflammation. Il pourrait notamment permettre d'évaluer certains polluants (suies et oxydes d'azote) émis pendant la combustion dans les moteurs Diesel.

CONCLUSIONS DE LA TROISIEME PARTIE

Les chapitres VI et VII ont permis de modéliser le délai d'auto-inflammation d'un carburant en considérant deux approches distinctes. Ces deux approches ne sont pas concurrentes mais sont utilisées pour résoudre des problèmes différents.

La première modélisation a consisté en la détermination d'une loi empirique. Basée sur la formulation de Wolfer, la relation proposée :

$$\tau = \exp(0,0349.IC - 18,1888.t_{\text{paraf}} - 6,3883).P^{-(0,1097.v-0,2903)} \cdot \exp\left[\frac{10,583.IC + 5951,9.t_{\text{paraf}} + 6940,8}{T}\right] \quad (\text{VI.7})$$

avec :

- τ : délai d'auto-inflammation (en ms)
- IC : indice de cétane
- t_{paraf} : teneur en composés paraffiniques
- P : pression initiale régnant dans la chambre avant l'injection (en bar)
- ν : viscosité cinématique (en cSt)
- T : température initiale régnant dans la chambre avant l'injection (en K)

intègre plusieurs caractéristiques d'un carburant. Au contraire des différentes lois rencontrées dans la littérature, qui ne sont valables que pour le carburant ayant servi lors des essais, la loi établie dans ce travail est donc applicable à différents carburants, à la seule condition que l'on connaisse leur indice de cétane, leur teneur en composés paraffiniques et leur viscosité cinématique. Elle permet de donner une bonne approximation du délai d'auto-inflammation, qui suffit lorsque l'on désire déterminer par exemple la pression maximale pendant la combustion.

Quand on désire connaître de façon précise les différentes espèces chimiques se formant pendant le délai d'auto-inflammation, une loi empirique ne suffit plus. Une deuxième approche est alors envisagée. Il s'agit de la modélisation du délai à l'aide de mécanismes réduits, les mécanismes détaillés étant difficilement exploitables. Une étude comparative de différents mécanismes chimiques a été effectuée. Elle a montré qu'un mécanisme réduit donne des résultats meilleurs qu'une loi empirique, à la seule condition qu'il soit suffisamment détaillé. Des trois modèles testés, seul le mécanisme cinétique proposé par Sahetchian et col. [41] (34 réactions) semble être satisfaisant. Les deux autres modèles, la relation globale de

Westbrook (1 réaction) et le modèle de Zellat (4 réactions), ne permettent pas en effet de prédire le délai d'auto-inflammation dans différentes conditions expérimentales. Les mécanismes sont dans ces deux cas trop simplifiés et ne tiennent pas suffisamment compte des différents radicaux créés pendant le délai d'auto-inflammation et qui jouent un rôle non négligeable.

CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

Les normes de pollution de plus en plus sévères appliquées aux moteurs alternatifs à combustion interne ont amené les constructeurs automobiles à étudier de façon approfondie la phase de combustion, pendant laquelle sont générés une grande partie des polluants que l'on retrouve dans les gaz d'échappement : CO, NO_x, H.C., H.A.P., particules ... Dans le cas des moteurs Diesel, la période de pré-combustion, appelée délai d'auto-inflammation, joue également un rôle dans la genèse de ces polluants en influençant les niveaux de température et de pression atteints pendant la combustion. Aussi la maîtrise de ce délai présente-t-elle un intérêt particulier.

Cette maîtrise fait appel à la connaissance de l'influence des conditions de fonctionnement d'une part (température et pression initiales régnant dans la chambre de combustion, conditions d'injection, ...), et des caractéristiques des carburants d'autre part. Le rôle joué par ces différents paramètres sur le délai est délicat à étudier directement sur moteur. En effet, si l'effet des caractéristiques du carburant peut être mis en évidence dans un moteur classique, l'influence spécifique de chacune des conditions de fonctionnement peut être occultée du fait de leur interdépendance. Le travail présenté ici a donc été réalisé dans une chambre de combustion à volume constant. Celle-ci permet de recréer les conditions de fonctionnement d'un moteur Diesel et présente l'avantage de pouvoir considérer séparément chacun des paramètres. Les essais réalisés ont permis d'étudier l'effet de différents paramètres sur le délai d'auto-inflammation, défini dans notre cas comme étant l'intervalle de temps séparant le début de l'injection du moment où la pression dans la chambre reprend sa valeur initiale, après la baisse due à l'évaporation.

L'effet de la température initiale régnant dans la chambre de combustion avant injection du carburant s'est révélé être le plus important. Une augmentation de cette température provoque une diminution du délai d'auto-inflammation. Une évolution singulière du délai pour des températures proches de 650 K a été observée. Elle s'explique par une modification des mécanismes de ramification conduisant à l'auto-inflammation à cette température. L'influence de la pression initiale régnant dans la chambre de combustion est minime par rapport à celle de la température. L'analyse bibliographique ne permet pas de définir clairement l'influence de cette pression sur le délai. Les résultats obtenus dans ce travail permettent cependant de confirmer les tendances observées par Miwa et col. [1] et Igura et col., cités par Kong et col. [9] : pour des températures supérieures à 660 K, le délai d'auto-inflammation diminue légèrement lorsque la pression initiale augmente.

Les derniers paramètres de fonctionnement étudiés concernent les conditions d'injection. Si le diamètre du trou d'injecteur n'influe pas sur le délai, le type d'injecteur a une influence non négligeable. Cette influence dépend des conditions de température et de pression. Il a en effet été observé qu'aux plus hautes températures, l'utilisation d'un injecteur à téton provoque une augmentation du délai. A basse température, deux évolutions différentes apparaissent selon le domaine de pression considéré. Alors qu'à basse pression, aucun effet du type d'injecteur n'est observé, un injecteur à téton permet de diminuer le délai dans le cas des hautes pressions. L'effet de la pression d'injection n'est pas reconnu de façon unanime dans la littérature. L'étude effectuée ici a montré qu'une variation de 208 à 243 bar de la pression d'injection moyenne n'a pas d'influence sur le délai. Cette influence a néanmoins pu être occultée par ce faible domaine de variations.

Si l'étude expérimentale présentée ici a permis de vérifier l'effet de certains paramètres, généralement admis dans la littérature (température initiale, diamètre du trou d'injecteur) et de tirer des conclusions précises pour des paramètres présentant une influence différente selon les auteurs (pression initiale, type d'injecteur), des essais complémentaires sont néanmoins nécessaires en ce qui concerne le rôle joué par la pression d'injection.

L'effet des caractéristiques des carburants a également été étudié. Les résultats obtenus montrent qu'une augmentation de la teneur en additif dans un carburant de référence permet de réduire son délai d'auto-inflammation, cette diminution n'étant toutefois pas proportionnelle à la quantité d'additif ajoutée (1000 ppm de nitrate d'alkyle provoque une diminution du délai de l'ordre de 17 % environ alors que 300 ppm de ce même nitrate d'alkyle réduisent déjà le délai de 12 %). La nature de l'additif joue également un rôle considérable. A concentration égale, le nitrate d'alkyle utilisé dans ce travail est plus efficace que le peroxyde de t-butyle. Les essais réalisés ont de plus montré la sensibilité d'un gazole à un additif donné. Une additivation au nitrate d'alkyle donne de meilleurs résultats sur un carburant naphtéinique que sur un composé paraffinique. Enfin, un dernier point important a été mis en évidence : l'additivation n'est efficace qu'aux plus hautes températures.

Ces résultats expérimentaux ont permis de constituer une base de données nécessaire à la modélisation du délai d'auto-inflammation. Deux approches complémentaires ont été envisagées.

La première modélisation a été effectuée selon une voie empirique. Elle est basée sur la loi de Wolfer. Les variables principales intervenant dans cette loi sont la température et la pression initiales régnant dans la chambre de combustion. La relation de Wolfer comporte de plus dans sa forme initiale trois constantes dépendant à la fois de la nature du carburant et des conditions

expérimentales. La relation proposée dans ce travail est dans sa formulation identique à celle de Wolfer. L'amélioration apportée réside dans la prise en compte au sein des trois constantes de la nature du carburant. Celles-ci sont en effet maintenant exprimées en fonction de l'indice de cétane, de la teneur en composés paraffiniques et de la viscosité cinématique du carburant, ce qui rend la relation applicable à différents carburants, alors que la relation de Wolfer n'est valable que pour un combustible donné. La loi établie dans ce travail a été déterminée à l'aide des résultats expérimentaux obtenus pour six carburants et validée sur quatre autres gazoles. En plus de la prédiction du délai, la relation peut être utilisée pour évaluer l'ordre de grandeur de l'indice de cétane d'un carburant avec une précision voisine de 6 %, au moyen d'une procédure plus simple à mettre en œuvre que la norme actuelle sur moteur CFR.

Il serait intéressant d'améliorer encore cette relation pour la rendre utilisable dans différentes conditions expérimentales. La prise en considération des conditions d'injection pourrait être la prochaine étape de cette modélisation. Elle permettrait d'intégrer dans la relation proposée la préparation dynamique du jet. Pour cela, des essais doivent être réalisés dans des conditions d'injection variées, tant au niveau des caractéristiques de l'injecteur (type, ...) qu'au niveau de la pression d'injection.

Si, pour des applications générales, une relation empirique suffit habituellement, il est parfois nécessaire de modéliser le délai d'auto-inflammation selon une approche plus fondamentale. La seconde modélisation envisagée est donc basée sur la description des mécanismes chimiques ayant lieu pendant la période de pré-combustion. Les mécanismes considérés lors de cette seconde approche sont des mécanismes dits semi-globaux. Ils ne prennent pas en compte l'ensemble des réactions chimiques pouvant se dérouler pendant le délai mais uniquement quelques réactions ou familles de réactions essentielles. Trois mécanismes ont été comparés. Ils diffèrent de par le nombre de réactions considérées pour décrire l'auto-inflammation. Il s'agit du modèle de Westbrook, constitué d'une seule réaction, du modèle de Zellat qui en comprend 4 et du modèle de Sahetchian, plus complet, qui est composé de 34 réactions. Ces modèles comportent un certain nombre de constantes qu'il est nécessaire d'ajuster sur un essai donné. L'étude comparative effectuée a montré qu'un mécanisme semi-global n'apporte une amélioration dans la prédiction du délai, par rapport à une loi empirique, qu'à la condition qu'il soit suffisamment détaillé. Ainsi, si les modèles de Westbrook et de Zellat fournissent, pour l'essai considéré lors de l'ajustement des coefficients, des résultats meilleurs que la loi de corrélation proposée, ils sont moins performants dans d'autres conditions expérimentales. Seul le mécanisme élaboré par Sahetchian, beaucoup plus détaillé que les deux cités précédemment, permet de prédire correctement le délai d'auto-inflammation d'un carburant dans des conditions de température et de pression variées.

Le modèle de Sahetchian donne des résultats très satisfaisants mais il peut encore être

amélioré. La validation de ce modèle n'a pour l'instant été effectuée que pour des domaines de température et de pression relativement restreints ($15 \text{ bar} < P < 25 \text{ bar}$ et $715 \text{ K} < T < 760 \text{ K}$). Des essais supplémentaires demandent donc à être réalisés, de façon à étendre les domaines de validité de ce modèle. De plus, ce mécanisme est pour l'instant utilisable pour prédire le délai d'auto-inflammation du n-dodécane. Il serait intéressant, et la structure du mécanisme le permet, de le rendre applicable au cas de différents carburants, comportant ou non des additifs. La validation de ce modèle d'auto-inflammation constituait une première étape de modélisation. La deuxième phase reste à réaliser. Il s'agit maintenant de valider le mécanisme de combustion complète qui est déjà présent au sein des 34 réactions. Lorsqu'il sera opérationnel, nous disposerons d'un outil permettant de prédire le délai d'auto-inflammation et d'évaluer les différents polluants susceptibles de se former pendant les différentes étapes de la combustion dans un moteur Diesel.

BIBLIOGRAPHIE

BIBLIOGRAPHIE

- [1] MIWA K., OHMIYA T., NISHITANI T., *A study of the ignition delay of Diesel fuel spray using a rapid compression machine*, JSME Int. J., Series II, vol. 31 (1), pp. 166-173, 1988.
- [2] HERRIER D., *Détermination optique du délai d'auto-inflammation dans un moteur Diesel*, Revue de l'Institut Français du Pétrole, Vol. 43, n°5, septembre-octobre 1988.
- [3] SIEBERS D. L., *Ignition delay characteristics of alternative Diesel fuels : implications on cetane number*, SAE Paper 852102, 1985.
- [4] RYAN T. W., III, CALLAHAN T. J., *Engine and constant volume bomb studies of Diesel ignition and combustion*, SAE Paper 881626, 1988.
- [5] HOSKIN D. H., EDWARDS C. F., SIEBERS D. L., *Ignition delay performance versus composition of model fuels*, SAE Paper 920109, 1992.
- [6] KAMIMOTO T., KOBAYASHI H., *Combustion processes in Diesel engines*, Prog. Energy Combust. Sci., vol. 17, pp. 163-189, 1991.
- [7] SPADACCINI L. J., TEVELDE J. A., *Autoignition characteristics of aircraft-type fuels*, Comb. and Flame, n° 46, pp. 283-300, 1982.
- [8] PISCHINGER F., REUTER U., SCHEID E., *Self-ignition of Diesel sprays and its dependence on fuels properties and injection parameters*, Journal of engineering for gas turbines and power, vol. 110, pp. 399-404, 1988.
- [9] KONG S. C., PATTERSON M. A., REITZ R. D., *Multidimensional modeling of Diesel ignition using a multistep kinetics model*, Third International KIVA Users Meeting at the SAE Congress, Detroit, U.S.A., February 28, 1993.
- [10] HEYWOOD J. B., *Internal combustion engine fundamentals*, McGraw-Hill Book Company, 1988.

- [11] HERRIER D., *Détermination optique du délai d'auto-inflammation*, La combustion dans les moteurs d'automobile, Recherches et développements récents, Editions Technip, pp. 205-224, 1988.
- [12] NAKAKITA K., MIWA K., OHSAWA K., TAKAHASHI T., WATANABE S., SAMI H., *Effects of high pressure fuel injection on the combustion and exhaust emissions of a high-speed DI Diesel engine*, JSAE Review, vol. 12, no. 1, pp. 18-25, 1991.
- [13] MINAMI T., YAMAGUCHI I., SHINTANI M., TSUJIMURA K., SUZUKI T., *Analysis of fuel spray characteristics and combustion phenomena under high pressure fuel injection*, SAE Paper 900438, 1990.
- [14] CLAUDE J. M., *Relations entre délai d'inflammation, combustion et émissions sur un moteur Diesel d'automobile à préchambre. Influence de paramètres moteur et carburant*, Congrès S.I.A., Moteurs Diesel : perspectives 1990-2000, Ecole Centrale de Lyon, 13 et 14 juin 1990.
- [15] BOUTHENET A., MIETTAUX M., *Réduction des émissions sur moteur Diesel équipé d'un système d'injection évolué*, Congrès S.I.A., Moteurs Diesel : actualité - potentialité, Ecole Centrale de Lyon, 14 et 15 avril 1993.
- [16] KIRSCH L. J., ROSSENFELD J. L. J., SUMMERS R., *Studies of fuel injection into a rapid compression machine*, Comb. and Flame, n° 43, pp. 11-21, 1981.
- [17] GÜLDER Ö. L., GLAVINCEVSKI B., *Ignition quality determination of Diesel fuels from hydrogen type distribution of hydrocarbons*, Comb. and Flame, n° 63, pp. 231-238, 1986.
- [18] CLOTHIER P. Q. E., MOISE A., PRITCHARD H. O., *Effect of free-radical release on Diesel ignition delay under simulated cold starting conditions*, Comb. and Flame, n° 81, pp. 242-250, 1990.
- [19] WOLFER H. H., *Der Zundverzug im Dieselmotor*, VDI-Forschungsheft, vol. 392, pp. 15-24, 1938.

- [20] WOLFER H. H., *Ignition lag in Diesel engines*, Translation Royal Aircraft Establishment, n° 358, 1950.
- [21] THELLIEZ M., JI Z. M., *Réflexion sur la modélisation du délai d'inflammation dans les moteurs Diesel*, *Entropie*, n° 134, vol. 23, pp. 88-94, 1987.
- [22] WATSON N., PILLEY A. D., MARZOUK M., *A combustion correlation for Diesel engine simulation*, SAE Paper 800029, 1980.
- [23] CRAVEN K. K., CLARK N. N., SMITH J. E., *Piston motion and ignition delay : details on cooled-based fuel injection and effects of mass leakage*, SAE Paper 900388, 1990.
- [24] HIROYASU H., KADOTA T., ARAI M., *Development and use of a spray combustion modeling to predict Diesel engine efficiency and pollutant emissions (Part I : Combustion modeling)*, *Bulletin of the JSME*, vol. 26, n° 214, pp. 569-575, April 1983.
- [25] WESTBROOK C. K., DRYER F. L., *Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion*, *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 10, pp. 1-57, 1984.
- [26] SOCHET L. R., *Autoinflammation et cliquetis des moteurs à allumage commandé*, Société Française des Thermiciens, Journée d'études, Résultats récents de recherche en matière de combustion et d'écoulements dans les moteurs alternatifs à combustion interne, 28 Février 1990.
- [27] RIBAUCCOUR M., *Auto-inflammation et cliquetis dans les moteurs - Etude en machine à compression rapide de l'influence de la structure de l'hydrocarbure sur les délais d'auto-inflammation*, Thèse, Université des Sciences et Technologies de Lille, 1992.
- [28] WARNATZ J., *Chemistry of high temperature combustion of alkanes up to octane*, 20th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 845-856, 1984.

- [29] WESTBROOK C. K., WARNATZ J., PITZ W. J., *A detailed chemical kinetic reaction mechanism for the oxidation of iso-octane and n-heptane over an extended temperature range and its application to analysis of engine knock*, 22nd Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 893-901, 1988.
- [30] CHEVALIER C., PITZ W. J., WARNATZ J., WESTBROOK C. K., MELENK H., *Hydrocarbon ignition : automatic generation of reaction mechanisms and applications to modeling of engine knock*, 24th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 93-101, 1992.
- [31] HALSTEAD M. P., KIRSCH L. J., PROTHERO A., QUINN C. P., *A mathematical model for hydrocarbon autoignition at high pressures*, Proc. R. Soc. Lond., ser. A, vol. 346, pp. 515-538, 1975.
- [32] NATARAJAN B., BRACCO F. V., *On multidimensional modeling of auto-ignition in spark-ignition engines*, Comb. and Flame, n° 57, pp. 179-197, 1984.
- [33] THEOBALD M. A., *A numerical simulation of Diesel autoignition*, Ph. D. Thesis, Dept of Mech. Eng., M.I.T., 1986.
- [34] COX R. A., COLE J. A., *Chemical aspects of the autoignition of hydrocarbon-air mixtures*, Comb. and Flame, n° 60, pp. 109-123, 1985.
- [35] CHUN K. M., HEYWOOD J. B., KECK J. C., *Prediction of knock occurrence in a spark-ignition engine*, Twenty-second Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 455-463, 1988.
- [36] BENSON S. W., *The kinetics and thermochemistry of chemical oxidation with application to combustion and flames*, Prog. Energy and Combust. Sci., vol. 7, n° 2, pp. 125-134, 1981.
- [37] ZELLAT M., ROLLAND Th., POPLOW F., *Three dimensional modeling of combustion and soot formation in a indirect injection Diesel engine*, SAE Paper 900254, 1990.

- [38] PINCHON P., *Three dimensional modelling of combustion in a prechamber Diesel engine*, SAE Paper 890666, 1989.
- [39] NERAUD E., BARITAUD T., *Modélisation du jet et de l'auto-inflammation Diesel - Comparaison avec des mesures optiques*, Congrès S.I.A., Ecole Centrale de Lyon, 1993.
- [40] CORRE C., *Structure d'une flamme en deux stades de butane. Action d'un additif antidétonant : la n-méthylaniline*, Thèse de Doctorat, Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres Artois, 21 juin 1991.
- [41] SAHETCHIAN K., CHAMPOUSSIN J. C., LEVY N., BLIN-SIMIAND N., ALIGROT C., GUERRASSI N., *Experiment and modeling of dodecane autoignition in a bomb*, soumis au Combustion Institute pour le 25^{ème} Symposium International sur la Combustion (31 juillet - 5 août 1994, Irvine, Californie).
- [42] BLIN-SIMIAND N., RIGNY R., VIOSSAT V., CIRCAN S., SAHETCHIAN K., *Autoignition of hydrocarbon / air mixtures in a CFR engine ; experimental and modeling study*, Combust. Sci. and Tech., vol. 83, pp. 1-20, 1992.
- [43] LEVY N., *Validation d'un mécanisme réactionnel réduit décrivant la combustion Diesel*, Rapport de D.E.A., Laboratoire de Machines Thermiques, Ecole Centrale de Lyon, septembre 1993.
- [44] *Moteurs Diesel*, 9^{ème} édition, Editions Techniques pour l'Automobile et l'Industrie, 1990.
- [45] WEISSMANN J., *Carburants et combustibles pour moteurs à combustion interne*, Publications de l'Institut Français du Pétrole, Editions Technip, 1970.
- [46] BORNE P., DAUPHIN-TANGUY G., RICHARD J. P., ROTELLA F., ZAMBETTAKIS I., *Modélisation et identification des processus*, Editions Technip, Paris, 1992.

ANNEXES

ANNEXE 1

DEFINITION DU DELAI DE DEGAGEMENT DE CHALEUR

Le délai de dégagement de chaleur est calculé à partir de la courbe de pression enregistrée pendant la combustion, en écrivant le premier principe de la thermodynamique pour un système ouvert où la température et la pression sont uniformes à chaque instant [10] :

$$\frac{dQ}{dt} - P \frac{dV}{dt} + \sum_i \dot{m}_i h_i = \frac{dU}{dt} \quad (\text{A1.1})$$

avec :

- $\frac{dQ}{dt}$: quantité de chaleur transférée à travers les frontières du système pendant l'unité de temps
- $P \frac{dV}{dt}$: puissance mécanique
- P : pression
- V : volume de la chambre de combustion
- \dot{m}_i : débit massique traversant les frontières ouvertes du système (injection de carburant ($i = f$), fuites à travers la segmentation ($i = fs$), ...)
- h_i : enthalpie du flux i entrant ou sortant du système
- U : énergie interne

Dans le cas d'un moteur Diesel, les seuls transferts de masse existants sont ceux concernant le gazole et les fuites aux segments. Si l'on néglige les fuites aux niveaux des segments, l'équation (A1.1) devient :

$$\frac{dQ}{dt} - P \frac{dV}{dt} + \dot{m}_f h_f = \frac{dU}{dt} \quad (\text{A1.2})$$

Si l'on néglige l'enthalpie du carburant injecté, on peut écrire :

$$\frac{dQ}{dt} - P \frac{dV}{dt} = \frac{dU}{dt} \quad (\text{A1.3})$$

La vitesse de dégagement de chaleur $\frac{dQ}{dt}$ est composée de trois termes : la chaleur dégagée par la combustion du carburant, les transferts de chaleur aux parois et la quantité de chaleur consommée par évaporation.

L'équation (A1.3) devient donc :

$$\frac{dQ_n}{dt} = \frac{dQ_c}{dt} - \frac{dQ_{pp}}{dt} - \frac{dQ_{evap}}{dt} = P \frac{dV}{dt} + \frac{dU}{dt} \quad (A1.4)$$

avec :

- $\frac{dQ_n}{dt}$: taux apparent de dégagement de chaleur net
- $\frac{dQ_c}{dt}$: taux de dégagement de chaleur dû à la combustion
- $\frac{dQ_{pp}}{dt}$: puissance thermique transférée aux parois
- $\frac{dQ_{evap}}{dt}$: quantité de chaleur consommée par évaporation par unité de temps

Si l'on suppose que le gaz présent dans la chambre de combustion se comporte comme un gaz parfait, l'équation (A1.4) s'écrit :

$$\frac{dQ_n}{dt} = P \frac{dV}{dt} + mc_v \frac{dT}{dt} \quad (A1.5)$$

avec :

- m : masse d'air contenue dans la chambre de combustion
- c_v : chaleur spécifique de l'air à volume constant
- T : température de l'air

D'après l'équation des gaz parfaits, où r est une constante pour un gaz donné :

$$PV = mrT \quad (A1.6)$$

on peut écrire :

$$\frac{dP}{P} + \frac{dV}{V} = \frac{dT}{T} \quad (A1.7)$$

L'équation (A1.7) permet d'éliminer le terme T de l'équation (A1.5) :

$$\frac{dQ_n}{dt} = \left(1 + \frac{c_v}{r}\right) P \frac{dV}{dt} + \frac{c_v}{r} V \frac{dP}{dt} \quad (A1.8)$$

Cette relation peut s'exprimer de la façon suivante, en notant $\gamma = c_p/c_v$ avec c_p chaleur spécifique de l'air à pression constante :

$$\frac{dQ_n}{dt} = \frac{\gamma}{\gamma-1} P \frac{dV}{dt} + \frac{1}{\gamma-1} V \frac{dP}{dt} \quad (A1.9)$$

Dans le cas d'une chambre de combustion à volume constant, V est une constante et l'équation (A1.9) devient donc :

$$\frac{dQ_n}{dt} = \frac{1}{\gamma - 1} V \frac{dP}{dt} \quad (\text{A1.10})$$

Connaissant l'expression de la pression et du volume en fonction du temps dans le cas d'un moteur ou seulement celle de la pression si on travaille en chambre à volume constant, les relations (A1.9) et (A1.10), dans lesquelles γ est considérée comme une constante, permettent de déterminer l'instant où commence le dégagement de chaleur, qui définit le délai de dégagement de chaleur.

ANNEXE 2

CARACTERISTIQUES PHYSICO-CHIMIQUES MOYENNES D'UN GAZOLE COMMERCIAL [44]

Couleur		Blanc
Masse volumique	à 15 °C	entre 0,810 et 0,890 kg / l
Distillation (% volume, pertes comprises)		< 65 % à 250 °C ≥ 85 % à 350 °C
Viscosité	à 20 °C	≤ 9,5 cSt
Point éclair		compris entre 55 et 120 °C
Teneur en soufre	(% masse)	≤ 0,8 %
Teneur en eau		Traces non dosables
Teneur en sédiments		nulle
Teneur en cendres		Traces non dosables
Indice de cétane		≥ 48
Indice d'acidité forte		nulle
Point d'éclair		≥ 55 °C et < 120 °C
Point de trouble		-4 °C
Point d'écoulement		≤ -15 °C
P.C.S.		45900 kJ / kg
Analyse élémentaire	% C	86,3
(% masse)	% H	12,4
	% S	0,9

ANNEXE 3

ADDITIFS POUR GAZOLE AUTRES QUE LES ADDITIFS PROCETANE [45]

Type d'additifs	Composé actif	Fonction
Inhibiteurs	2-6 di-ter-butyl-diméthyl-amino-p crésol ou composés d'amines organiques	Eviter la formation de gommages
Anti-corrosion	Acide linoléique dimérisé	Eviter la corrosion des pièces mécaniques
Détergents	Formules non publiées	Maintenir les impuretés en suspension dans le produit Nettoyer les éléments mécaniques des circuits d'alimentation Combattre les effets dus au soufre
Désactivateurs de métaux	N, N' disalicylidene-1,2 propylène diamine	Eviter les effets catalytiques dus aux contacts métaux-combustibles
Réducteurs de fumée	Formules non publiées	Permettent la réduction des fumées pour des charges et vitesses données
Abaisseurs de point d'écoulement	Formules non publiées	Permettent d'abaisser le point d'écoulement des combustibles à haute teneur en paraffine

ANNEXE 4

CARACTERISTIQUES DU DISPOSITIF EXPERIMENTAL

Chambre de combustion :

Matière : Acier XC 48

Caractéristiques géométriques :

ϕ_{int} : 80 mm

ϕ_{ext} : 200 mm

L_{int} : 260 mm

L_{ext} : 300 mm

V : 1,28 dm³

Hublots :

Matière : Pyrex

Caractéristiques géométriques :

L : 87 mm

l : 46 mm

e : 30 mm

Champ de vision : 81 mm x 40 mm

Résistances chauffantes :

Référence : Cartouches Haute Charge Vulstar Type 10168

Puissance unitaire : 1050 W

Nombre : 8

Isolant :

Référence : Papier céramique

Propriétés :

Point de fusion : 1760 °C

Utilisation : 1300 °C

Conduction thermique : 0,13 W / m.°C à 540 °C

0,22 W / m.°C à 820 °C

Systèmes d'injection :

Système d'injection	Pompe monocoup	Pompe classique
Quantité injectée	320 mg	19,7 mg
Durée d'injection	60 ms	3,3 ms

Injecteurs :

Injecteurs monotrou :

$$P_{\text{tarage}} = 225 \text{ bar}$$

$$\phi_{\text{inj}} = 0,20 \text{ mm} ; 0,25 \text{ mm} ; 0,30 \text{ mm} ; 0,35 \text{ mm}$$

Injecteur téton :

Injecteur Bosch, référence DN O SD 299 A

$$P_{\text{tarage}} = 135 \text{ bar}$$

ANNEXE 5

INSTRUMENTATION

Grandeur mesurée	Instrumentation
pression dans la chambre de combustion	capteur piézo-électrique miniaturisé Kistler (réf. KI6053Asp75) relié à un amplificateur de charge Kistler (type 5011)
pression d'injection	capteur à jauges de contrainte relié à un pont amplificateur
levée d'aiguille de l'injecteur	capteur inductif relié à un amplificateur de type ALA 100 Sigma-Diesel
détection du délai d'auto-inflammation optique	photodiode détectant les longueurs d'onde du visible
température dans la chambre de combustion	thermocouple type J
température d'eau du circuit de refroidissement	thermocouple type J
température des cartouches chauffantes	thermocouple type J

ANNEXE 6

CARACTERISTIQUES DES CARBURANTS UTILISES

Carburant	Bach	Beethoven	Berlioz	Mozart	Schubert	Händel
Indice de cétane mesuré	20,1	32,2	41,1	42,8	50,7	60,1
% C	87,4	86,875	86,52	86,35	85,995	85,64
% H	10,72	11,705	12,16	12,69	13,145	13,6
% S	0,543	0,342	0,3115	0,141	0,1105	0,08
% mono-aromatiques	36,1	28,35	23,8	20,6	16,05	11,5
% di-aromatiques	32,0	20,15	19,0	8,3	7,15	6,0
% poly-aromatiques	2,2	2,15	1,45	2,1	1,4	0,7
% aromatiques totaux	70,3	50,65	44,25	31,0	24,6	18,2
% paraffines	18,4	18,6	31,3	18,8	31,5	44,2
Densité à 15 °C (kg / l)	0,8991	0,8881	0,8655	0,8773	0,8548	0,8322
Viscosité cinématique à 20 °C (cSt)	2,77	4,42	3,66	8,45	6,55	5,41
Nature de l'additif	-	-	-	-	-	-
Teneur en additif (ppm)						
N° du carburant	1	4	6	2	5	3
Constitution		1+2	1+3	Gazole SR naphténique	2+3	Gazole SR paraffinique

Remarque : Tous les pourcentages donnés sont des pourcentages massiques

Carburant	Scarlatti	Rameau	Vivaldi	Messian	Gazole	Dodécane
Indice de cétane mesuré	44,3	52,8	53,1	55,0	49,2	
% C	86,52	85,995	85,995	85,995	86,41	84,71
% H	12,16	13,145	13,145	13,145	13,31	15,29
% S	0,3115	0,1105	0,1105	0,1105	0,2690	-
% mono-aromatiques	23,8	16,05	16,05	16,05	21,0	
% di-aromatiques	19,0	7,15	7,15	7,15	6,5	
% poly-aromatiques	1,45	1,4	1,4	1,4	1,7	
% aromatiques totaux	44,25	24,6	24,6	24,6	29,2	
% paraffines	31,3	31,5	31,5	31,5		
Densité à 15 °C (kg / l)	0,8657	0,8549	0,8549	0,8550	0,8450	0,787 (*)
Viscosité cinématique à 20 °C (cSt)	3,70	6,54	7,20	6,54	4,84	1,35 (**)
Nature de l'additif	Nitrate d'alkyle	Péroxyde de t-butyle	Nitrate d'alkyle	Nitrate d'alkyle		-
Teneur en additif (ppm)	1000	1000	300	1000		-
N° du carburant	7	8	9	10		
Constitution	6 + add	5 + add	5 + add	5 + add		

(*) : densité à 20 °C

(**) : viscosité cinématique à 25 °C

Remarque : Tous les pourcentages donnés sont des pourcentages massiques

ANNEXE 7

**EVOLUTION DU DELAI D'AUTO-INFLAMMATION
DES CARBURANTS UTILISES EN FONCTION DE LA TEMPERATURE
POUR DIFFERENTES PRESSIONS INITIALES**

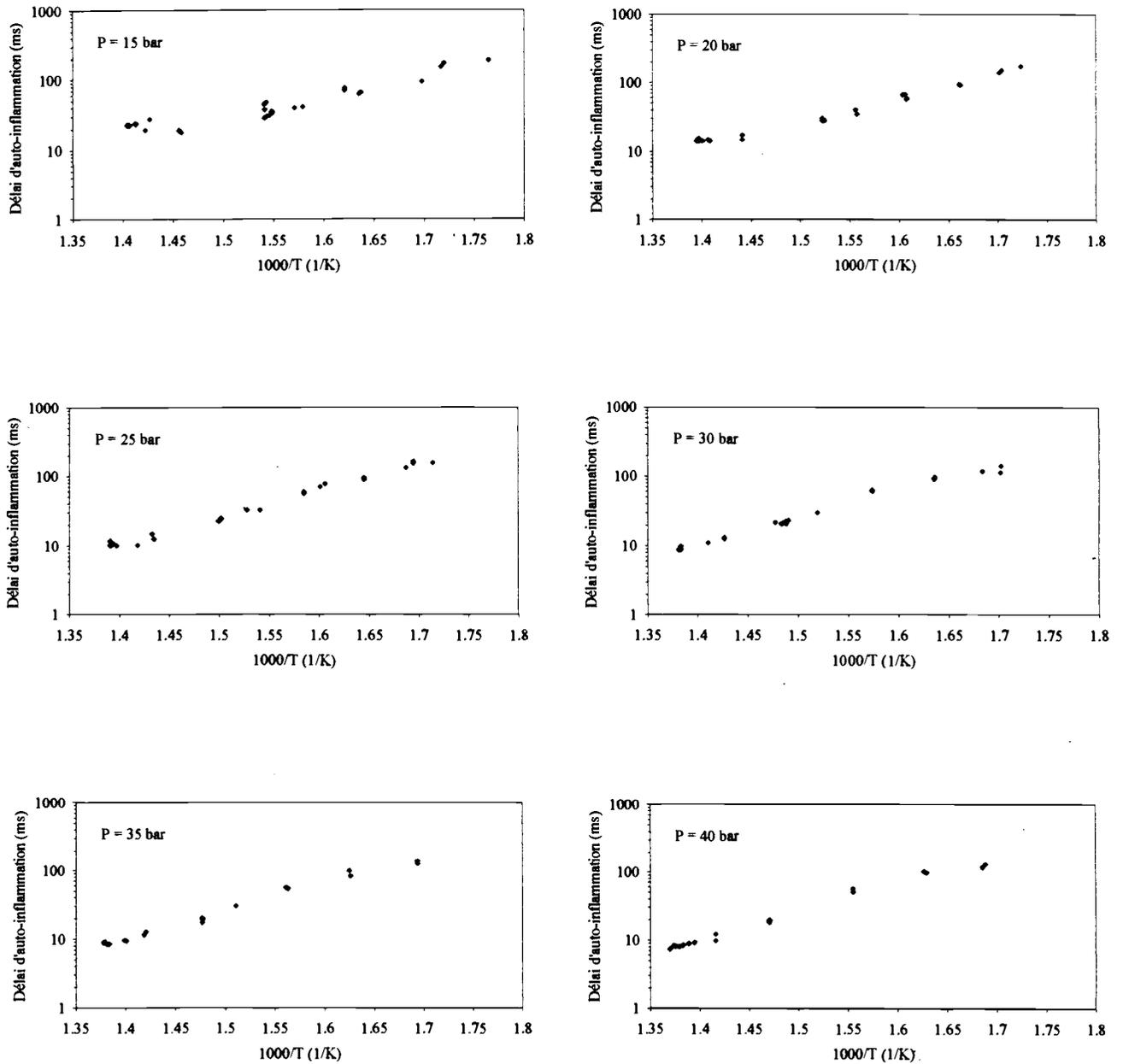


Figure {A7.1} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Bach en fonction de la température pour différentes pressions initiales

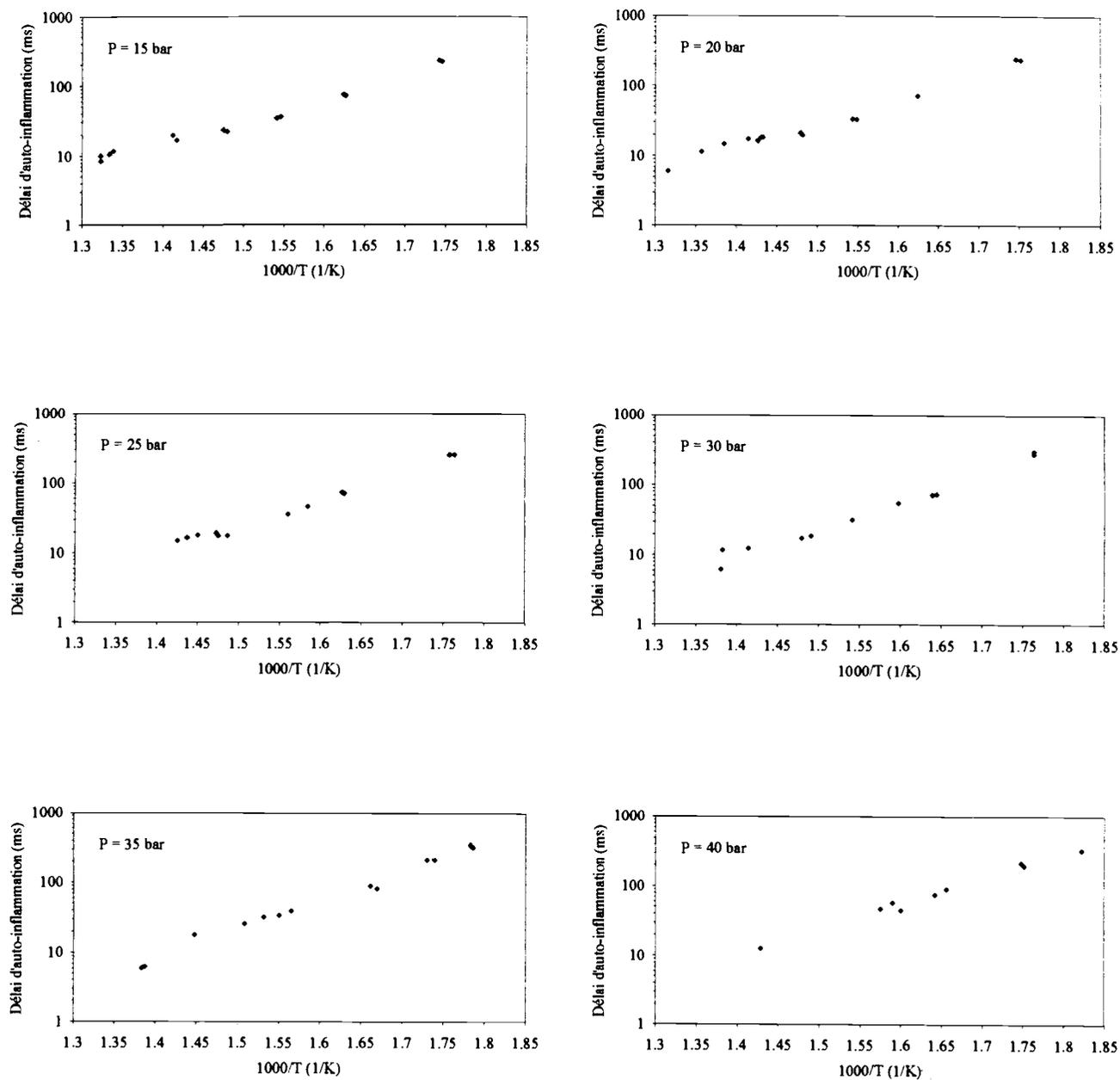


Figure {A7.2} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Beethoven en fonction de la température pour différentes pressions initiales

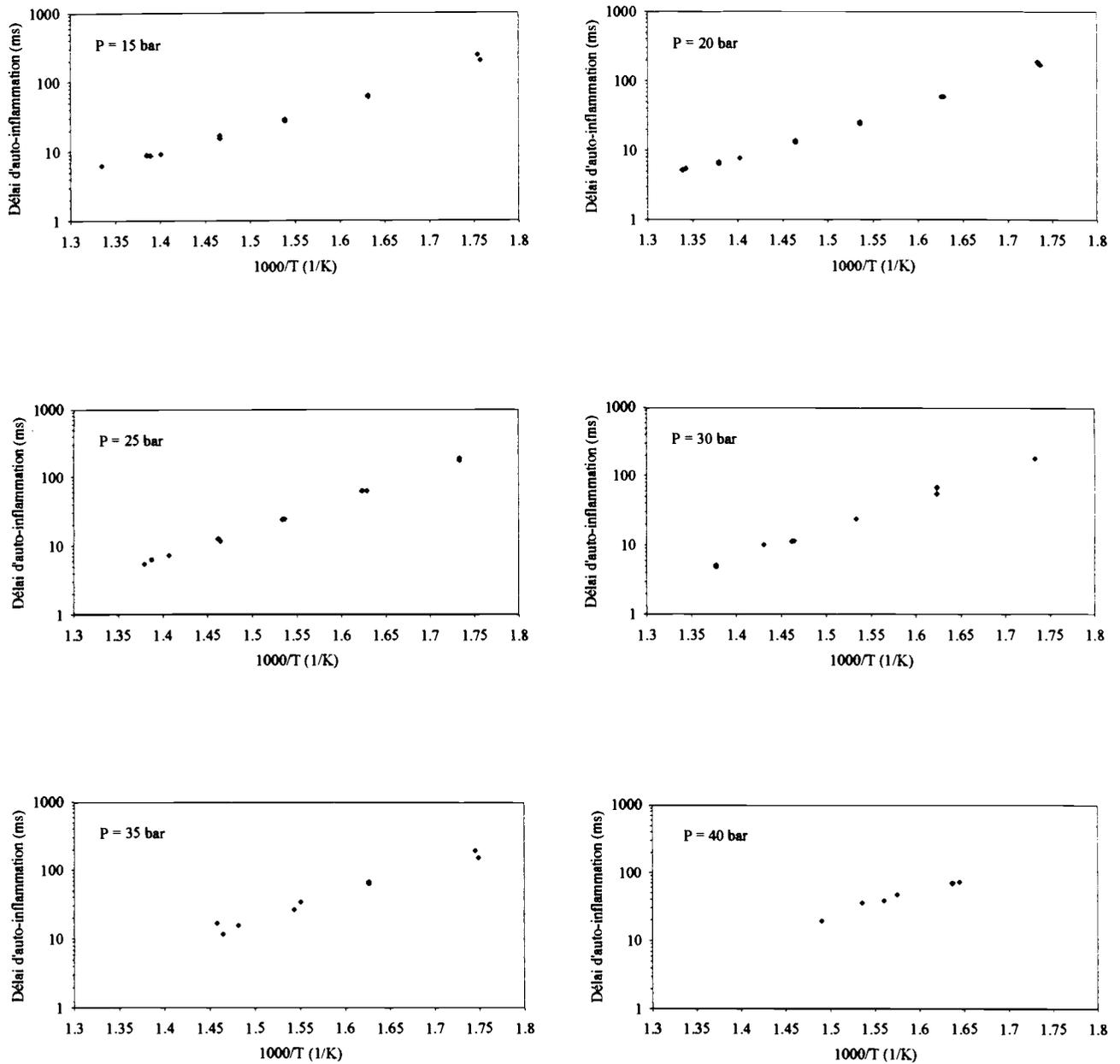


Figure {A7.3} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Berlioz en fonction de la température pour différentes pressions initiales

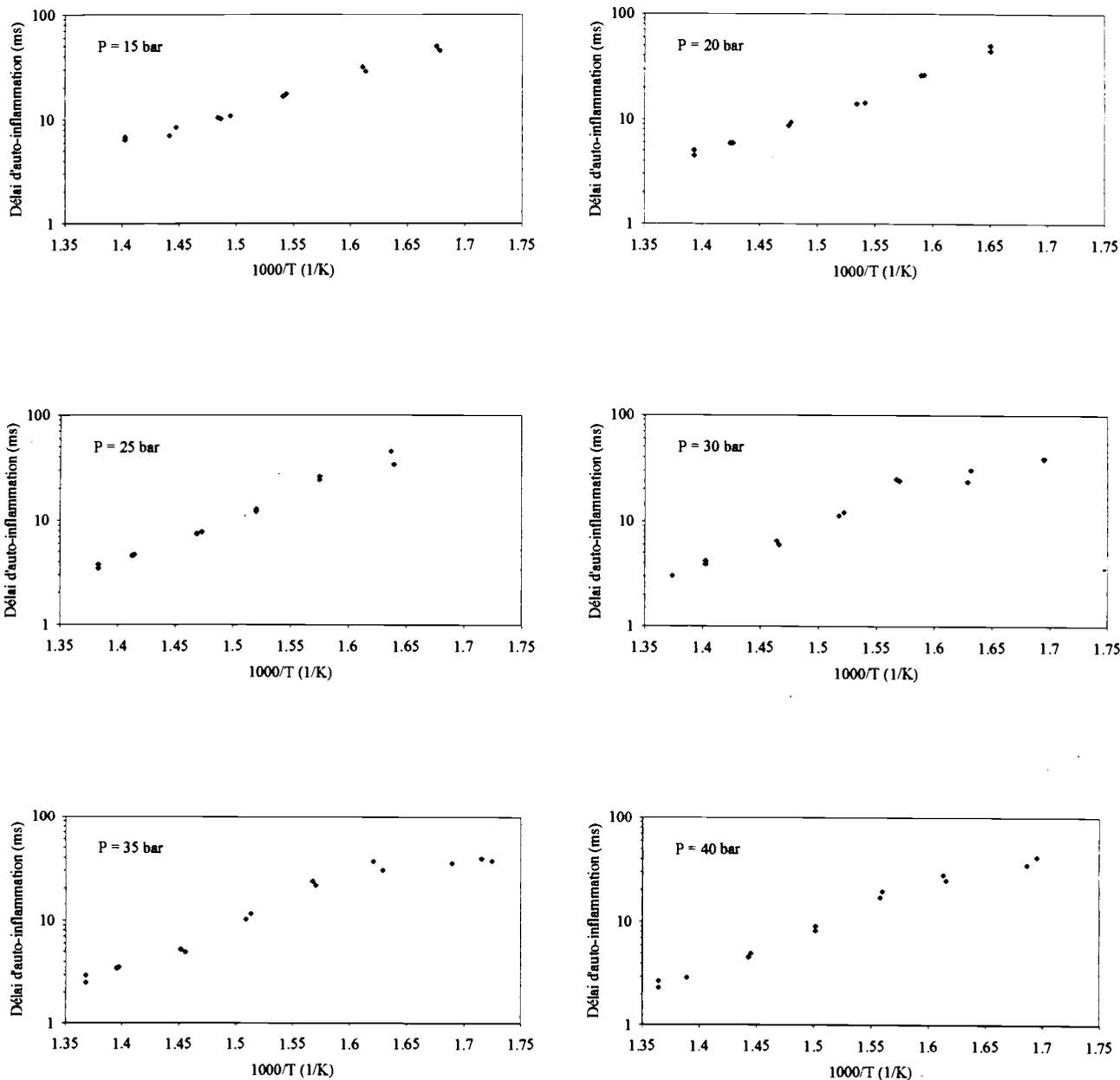


Figure {A7.4} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Mozart en fonction de la température pour différentes pressions initiales

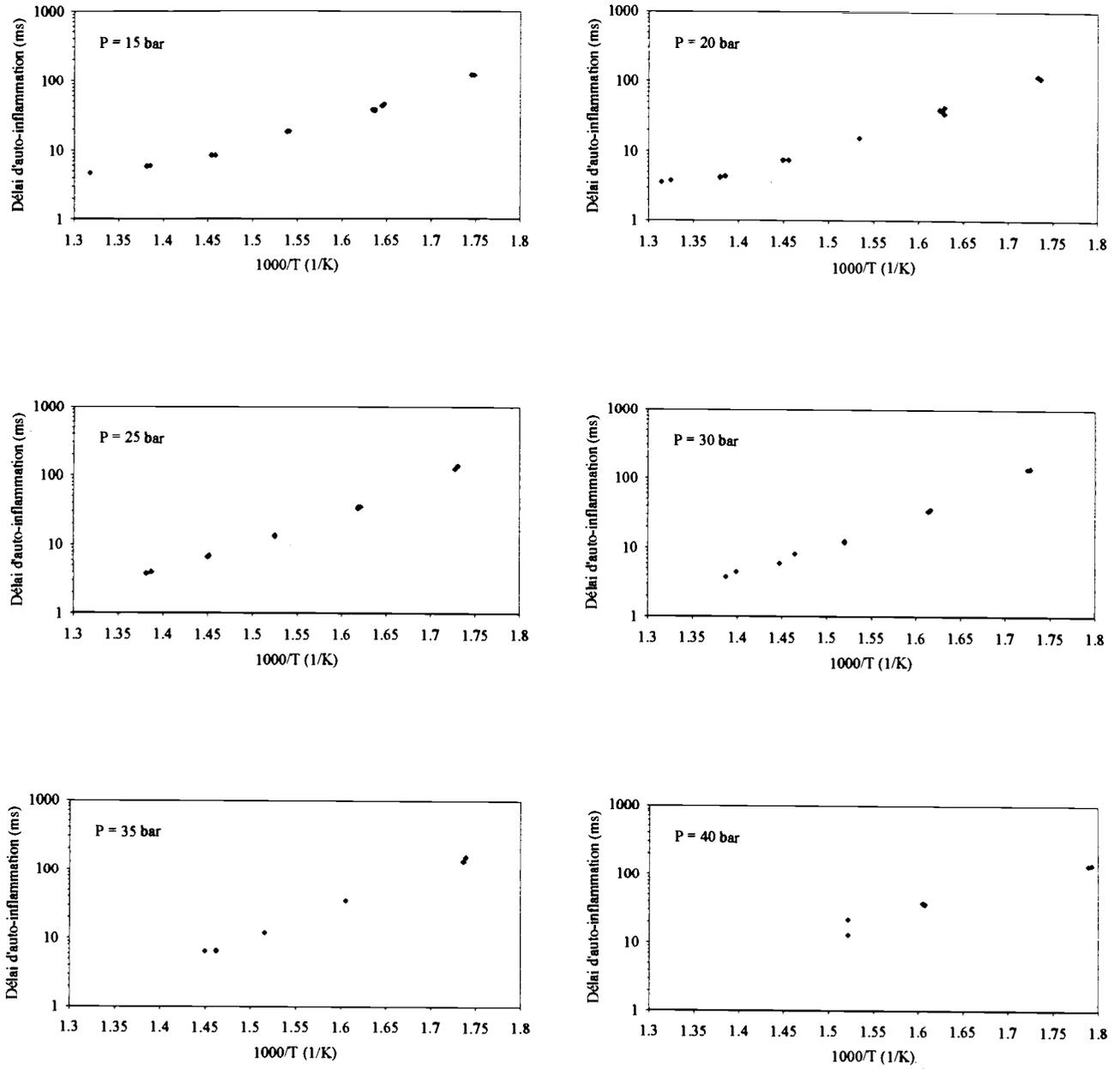


Figure {A7.5} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Schubert en fonction de la température pour différentes pressions initiales

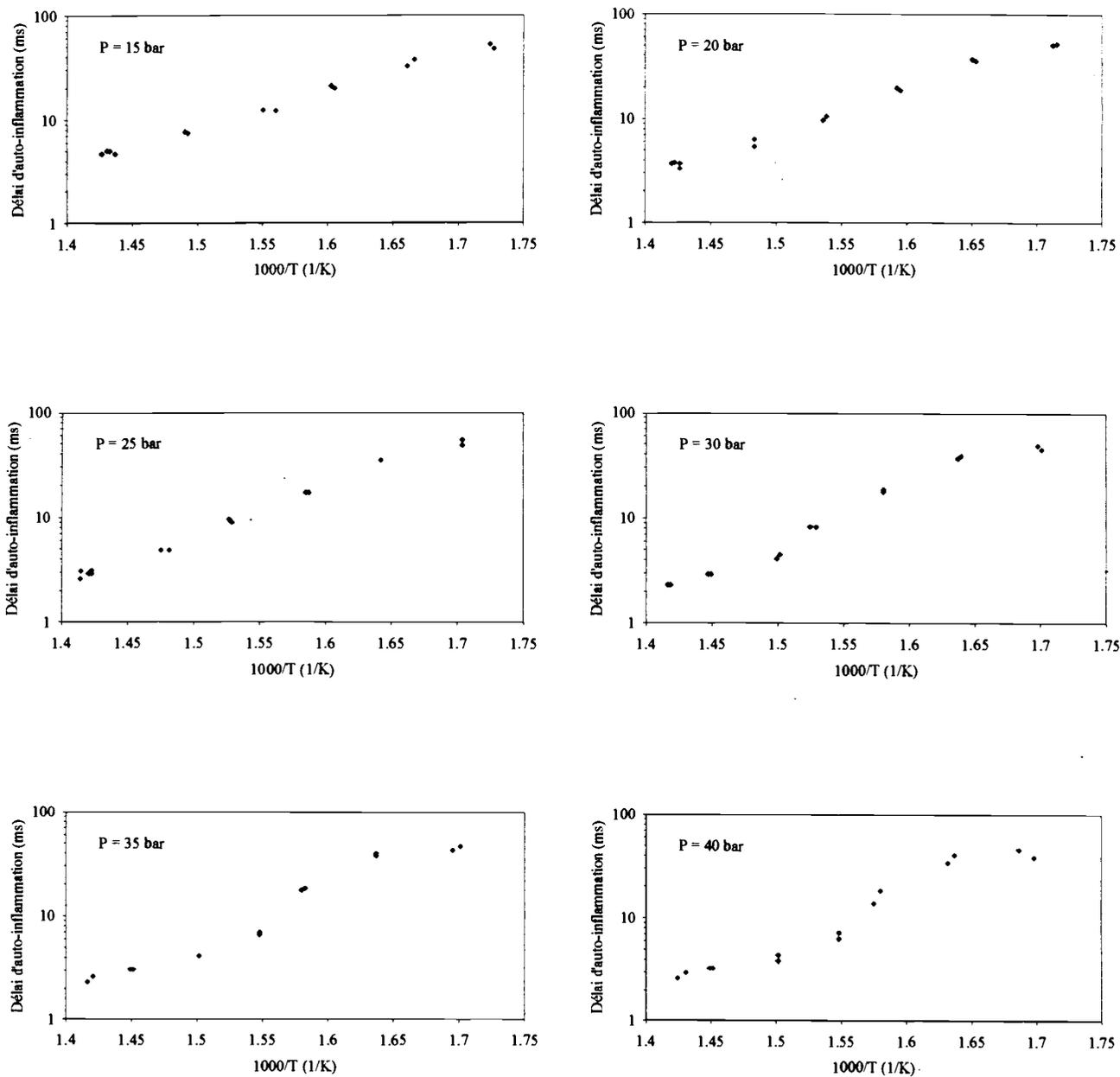


Figure {A7.6} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Häendel en fonction de la température pour différentes pressions initiales

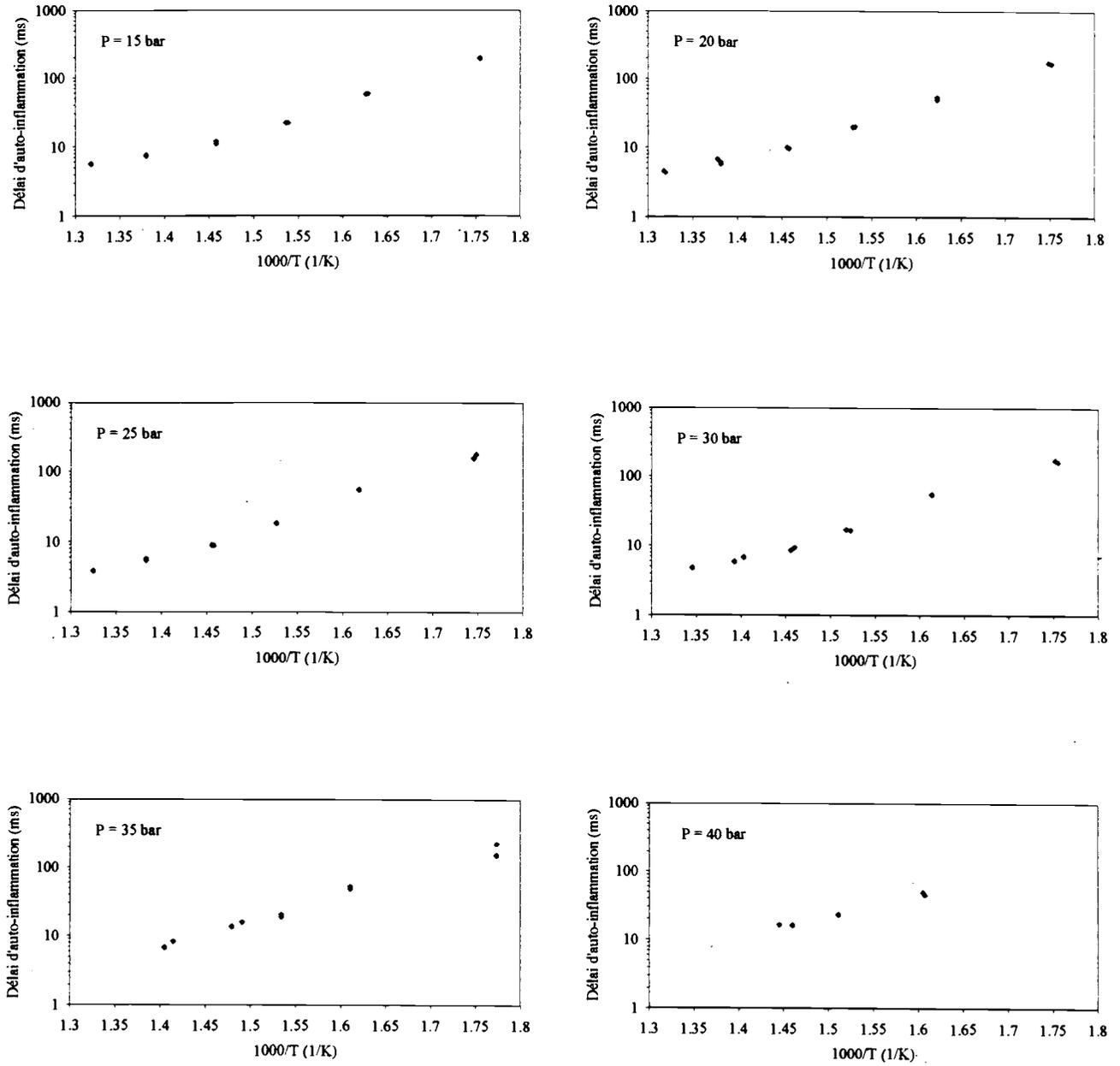


Figure {A7.7} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Scarlatti en fonction de la température pour différentes pressions initiales

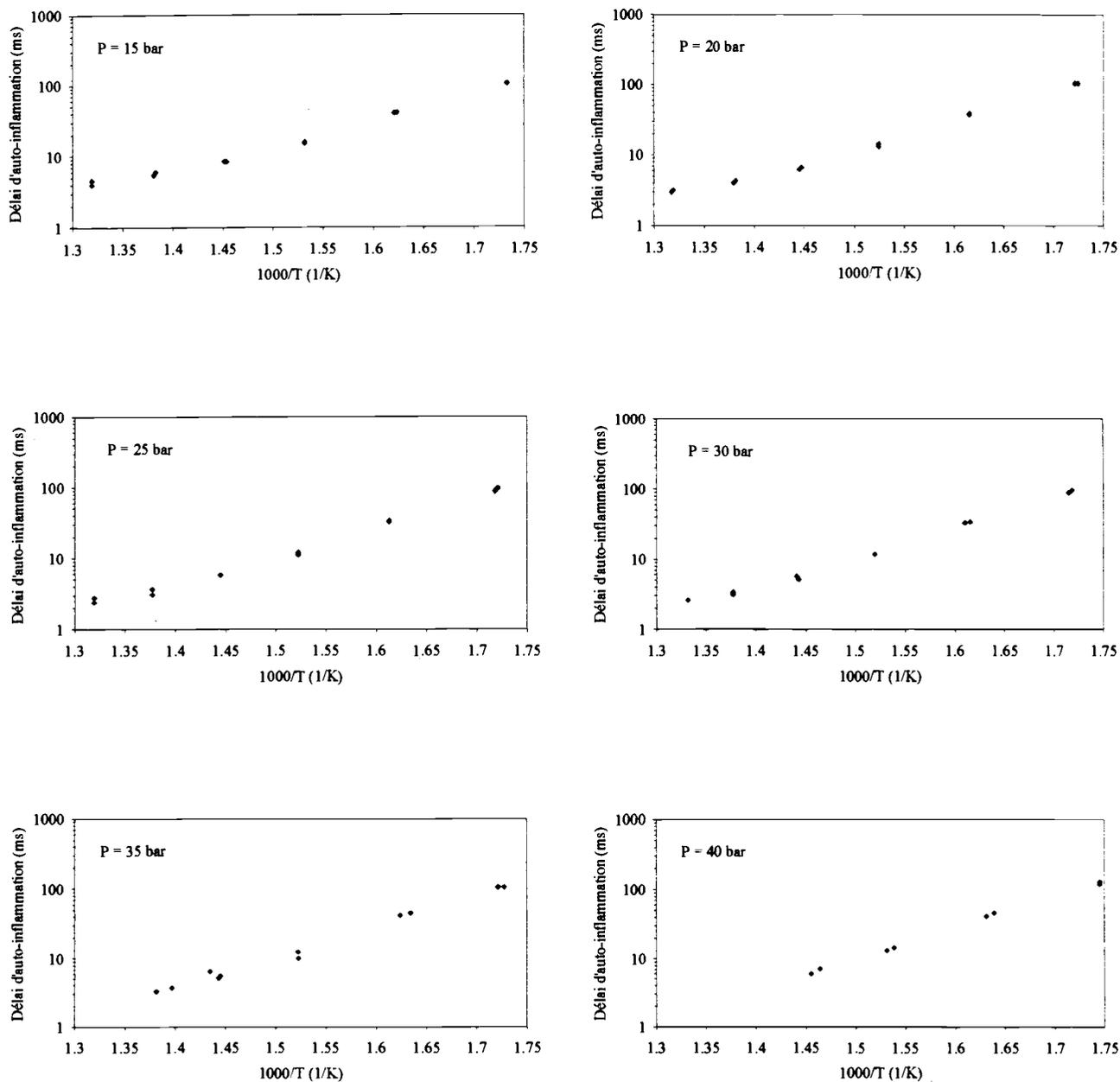


Figure {A7.8} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Rameau en fonction de la température pour différentes pressions initiales

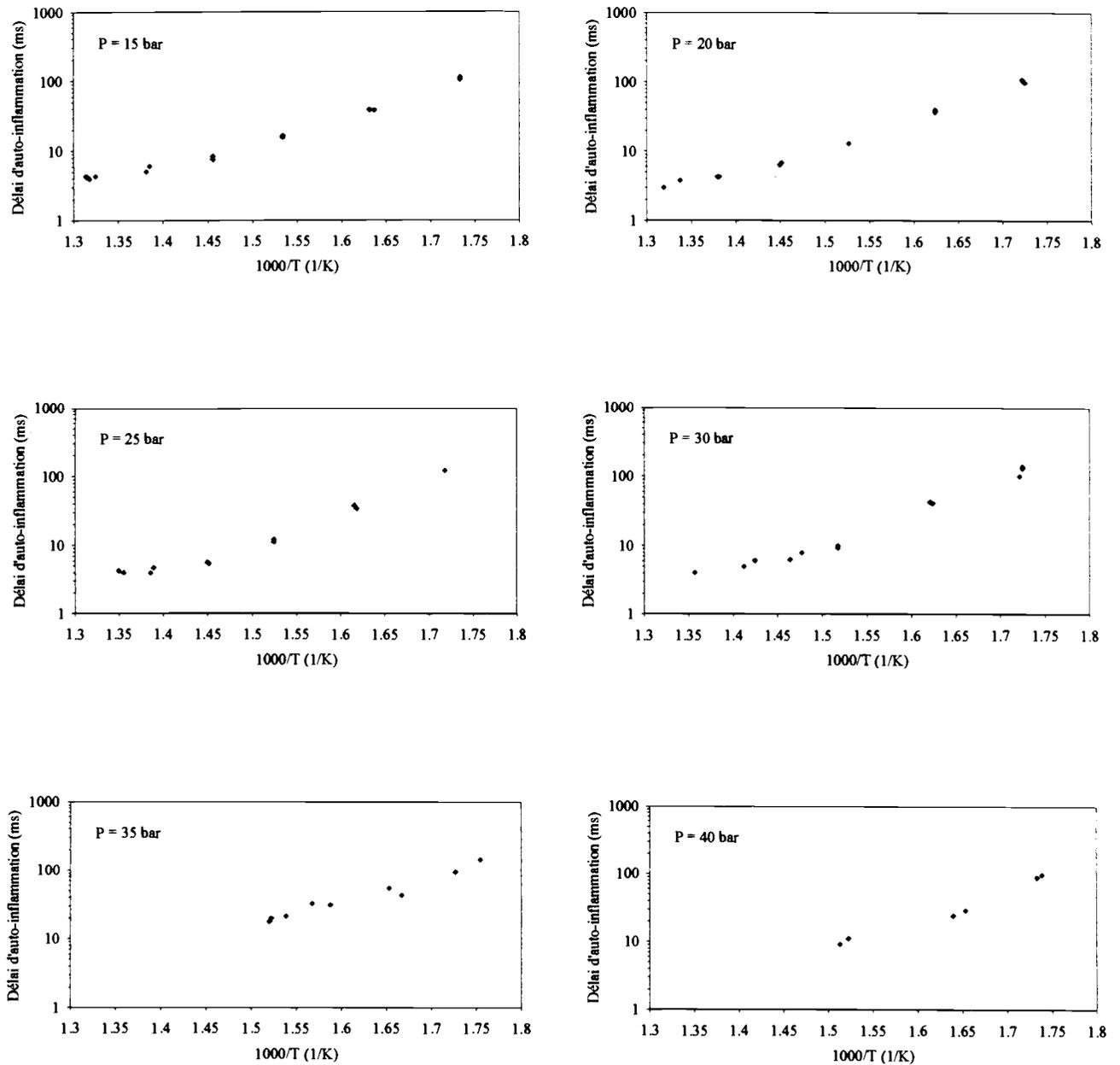


Figure {A7.9} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Vivaldi en fonction de la température pour différentes pressions initiales

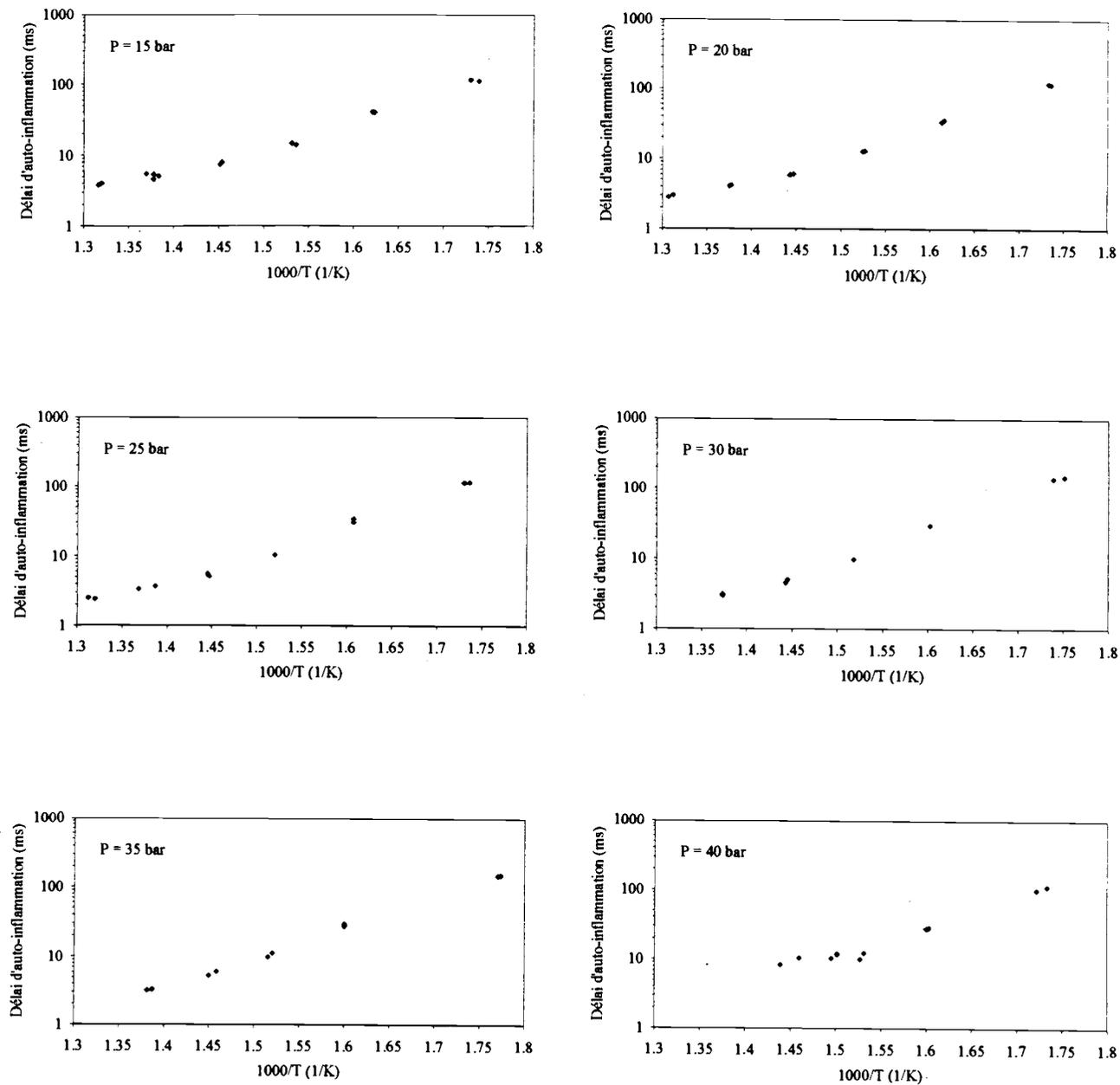


Figure {A7.10} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Messian en fonction de la température pour différentes pressions initiales

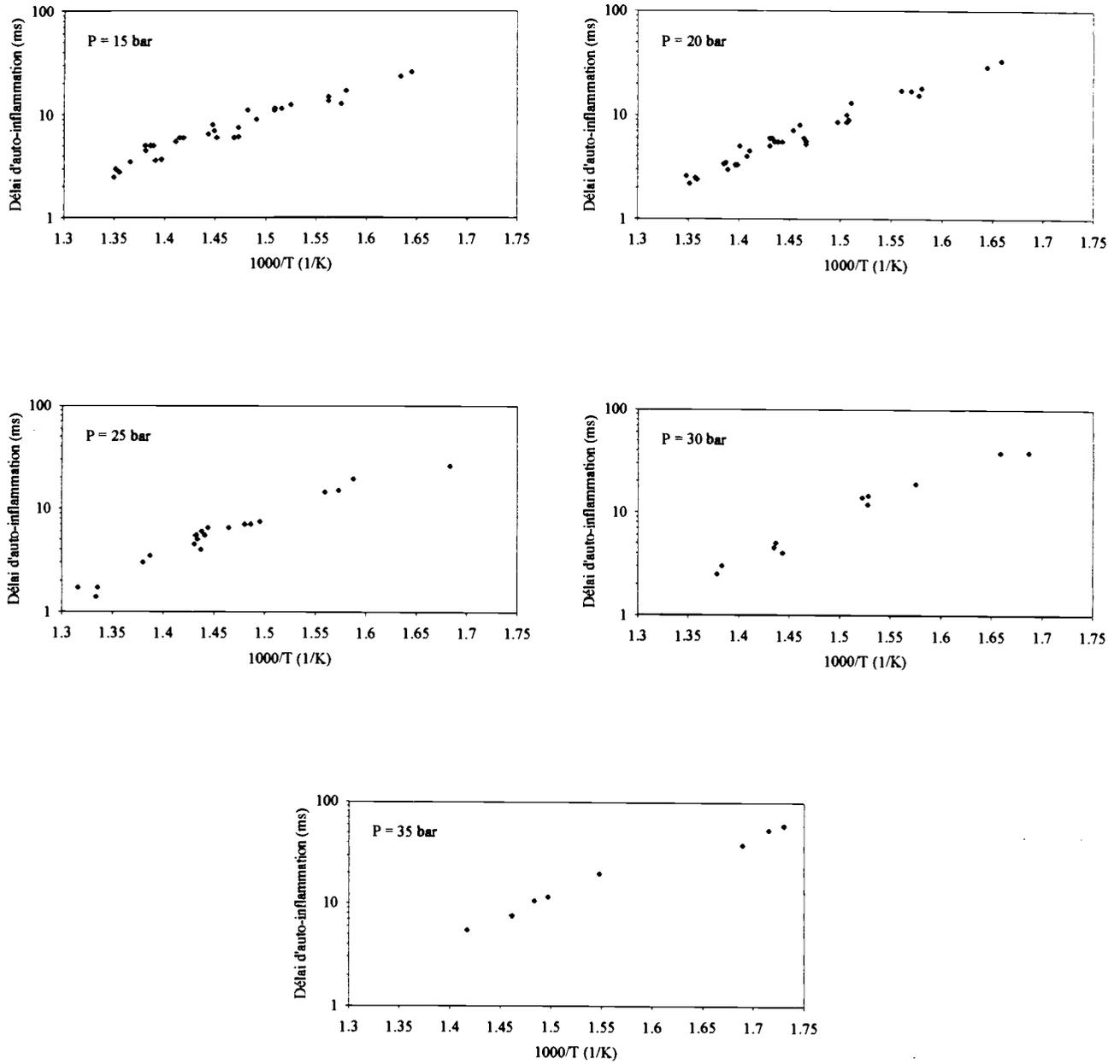


Figure {A7.11} : Evolution du délai d'auto-inflammation du dodécane en fonction de la température pour différentes pressions initiales

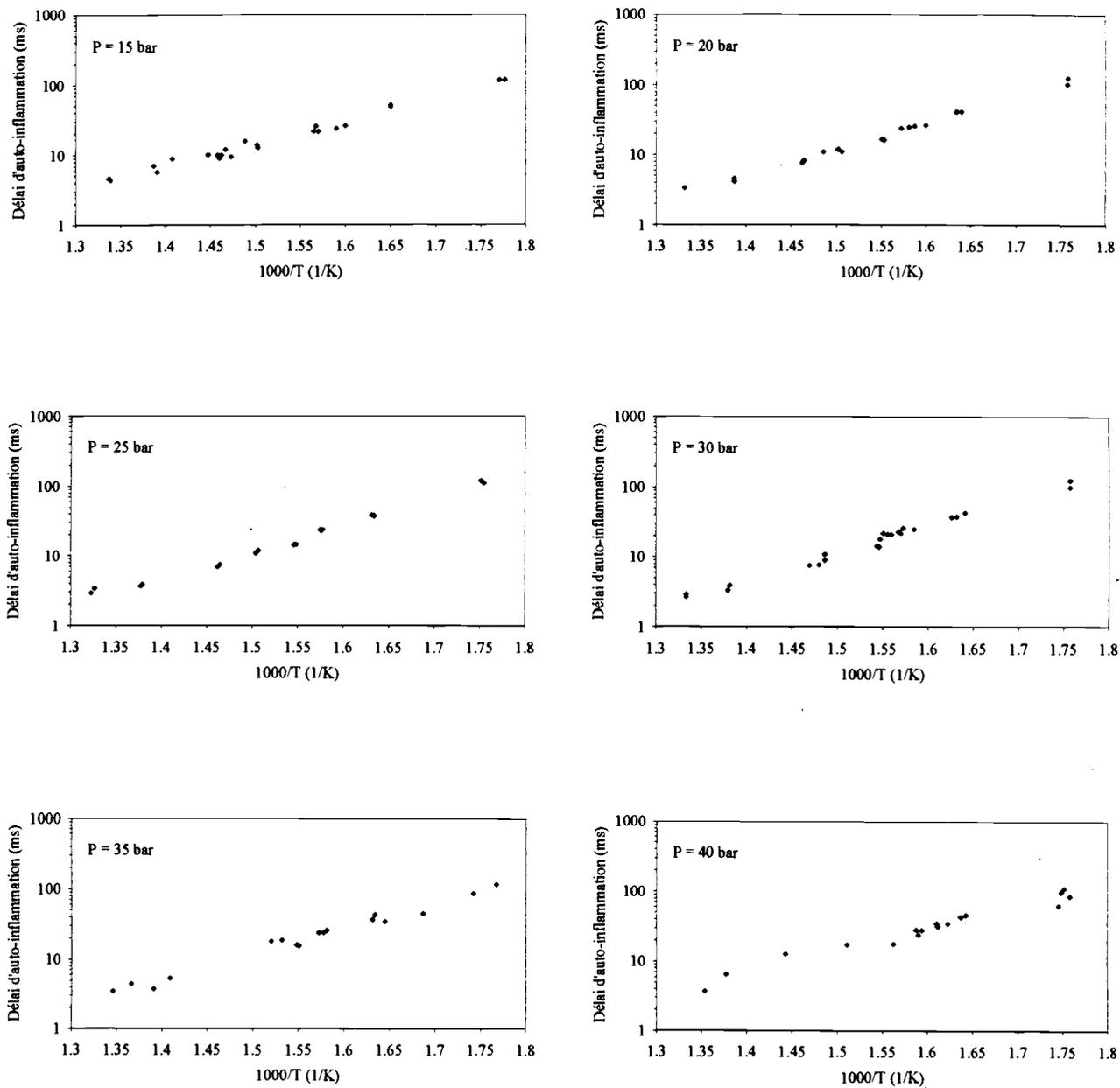


Figure {A7.12} : Evolution du délai d'auto-inflammation du gazole en fonction de la température pour différentes pressions initiales

ANNEXE 8

METHODE DES MOINDRES CARRES PONDERES [46]

La procédure d'identification de coefficients disponible dans le logiciel Matlab est une méthode des moindres carrés pondérés. Cette méthode va maintenant être décrite dans sa forme générale.

On considère ici des relations entre variables ne faisant pas intervenir le temps et dont la sortie est liée à l'entrée par la relation vectorielle :

$$y = a.u \quad (\text{A8.1})$$

L'inconnue est dans cette équation la matrice a . y et u sont connus par n mesures effectuées $(u_1, y_1), (u_2, y_2), \dots, (u_n, y_n)$. La méthode consiste à minimiser la distance euclidienne pondérée $a.u$ et y définie par :

$$D = (a.u - y)^T . P . (a.u - y) \quad (\text{A8.2})$$

P est une matrice de pondération définie symétrique et positive. La condition d'optimalité s'écrit :

$$\frac{dD}{da} = 0 \Rightarrow u^T . P . (a.u - y) + (a.u - y)^T . P . u \quad (\text{A8.3})$$

a étant un scalaire, on peut écrire :

$$2 . a . u^T . P . u - u^T . P . y - y^T . P . u = 0 \quad (\text{A8.4})$$

Or, les quantités $u^T . P . y$ et $y^T . P . u$ étant égales entre elles, on en déduit finalement :

$$a = (u^T . P . u)^{-1} . u^T . y \quad (\text{A8.5})$$

Dans notre cas particulier, aucune pondération particulière n'a été considérée (P est la matrice identité). Les coefficients de la relation de Wolfer ont été identifiés à partir de sa forme linéarisée :

$$\ln \tau = \ln A - m \cdot \ln P + B/T \quad (\text{A8.6})$$

La matrice u est donc composée des triplets $(1, \ln P_i, 1/T_i)$. Le vecteur y comprend quant à lui les valeurs de délais d'auto-inflammation $\ln \tau_i$. Le vecteur a recherché est alors constitué par le triplet $(\ln A, -m, B)$.

ANNEXE 9

INTERVALLES DE CONFIANCE DES TRIPLETS (A, m, B) DE LA LOI DE WOLFER CORRESPONDANT AUX DIFFERENTS CARBURANTS UTILISES

Les écarts-types et les intervalles de confiance à 95 % des coefficients intervenant dans la relation de Wolfer ont été déterminés. L'identification n'ayant pas été effectuée directement à partir de la relation initiale de Wolfer :

$$\tau = A.P^{-m}.\exp(B/T) \quad (\text{III.1})$$

mais en considérant sa forme linéarisée :

$$\ln \tau = \ln A - m.\ln P + B/T \quad (\text{A9.1})$$

seuls les écarts-types σ sur les valeurs de $\ln A$, m et B sont disponibles. Il est toutefois possible de définir les intervalles de confiance à 95 % pour l'ensemble des coefficients $\ln A$, A , m et B .

Les tableaux {A9.1} à {A9.3} indiquent les résultats obtenus.

Carburant	ln A	σ	Intervalle de confiance à 95 %	
			Limite inf.	Limite sup.
Bach (n°1)	-8,7026	0,3241	-9,3438	-8,0613
Beethoven (n°2)	-8,2513	0,2847	-8,8188	-7,6838
Berlioz (n°3)	-10,5574	0,2576	-11,0730	-10,0418
Mozart (n°4)	-9,1906	0,3393	-9,8661	-8,5150
Schubert (n°5)	-10,4346	0,3792	-11,1926	-9,6766
Händel (n°6)	-12,7424	0,4634	-13,6642	-11,8206
Scarlatti (n°7)	-10,0667	0,3295	-10,7255	-9,4080
Rameau (n°8)	-10,4648	0,3080	-11,0803	-9,8492
Vivaldi (n°9)	-10,1637	0,4230	-11,0095	-9,3178
Messian (n°10)	-10,5611	0,3390	-11,2380	-9,8841

Tableau {A9.1} : Intervalles de confiance à 95 % sur le coefficient ln A pour les différents carburants

Carburant	m	σ	Intervalle de confiance à 95 %	
			Limite inf.	Limite sup.
Bach (n°1)	0,1034	0,0525	- 0,0004	0,2072
Beethoven (n°2)	0,3630	0,0704	0,2226	0,5034
Berlioz (n°3)	0,1031	0,0538	- 0,0047	0,2109
Mozart (n°4)	0,3931	0,0576	0,2783	0,5079
Schubert (n°5)	0,1467	0,0808	- 0,0149	0,3083
Händel (n°6)	0,2965	0,0745	0,1484	0,4446
Scarlatti (n°7)	0,0776	0,0718	- 0,0659	0,2211
Rameau (n°8)	0,3151	0,0676	0,1799	-0,4502
Vivaldi (n°9)	0,2422	0,1044	0,0335	0,4509
Messian (n°10)	0,3012	0,0748	0,1518	0,4506

Tableau {A9.2} : Intervalles de confiance à 95 % sur le coefficient m pour les différents carburants

Carburant	B	σ	Intervalle de confiance à 95 %	
			Limite inf.	Limite sup.
Bach (n°1)	8208,6	158,5	7895,1	8522,2
Beethoven (n°2)	8458,9	167,9	8124,1	8793,7
Berlioz (n°3)	9242,8	142,6	8957,4	9528,2
Mozart (n°4)	8522,0	185,1	8153,5	8890,6
Schubert (n°5)	8965,0	208,8	8547,6	9382,4
Händel (n°6)	10380,7	250,8	9881,9	10879,5
Scarlatti (n°7)	8792,6	170,2	8452,3	9132,9
Rameau (n°8)	9301,5	165,9	8970,0	9632,9
Vivaldi (n°9)	8979,4	251,8	8475,8	9483,0
Messian (n°10)	9323,6	188,8	8946,7	9700,8

*Tableau {A9.3} : Intervalles de confiance à 95 % sur le coefficient B
pour les différents carburants*

ANNEXE 10

**EVOLUTION DU DELAI D'AUTO-INFLAMMATION
DES CARBURANTS UTILISES EN FONCTION DE LA TEMPERATURE
POUR DIFFERENTES PRESSIONS INITIALES**

**COMPARAISON ENTRE LES DELAIS MESURES EXPERIMENTALEMENT
ET LES DELAIS CALCULES A L'AIDE DE LA RELATION DE WOLFER (III.1)**

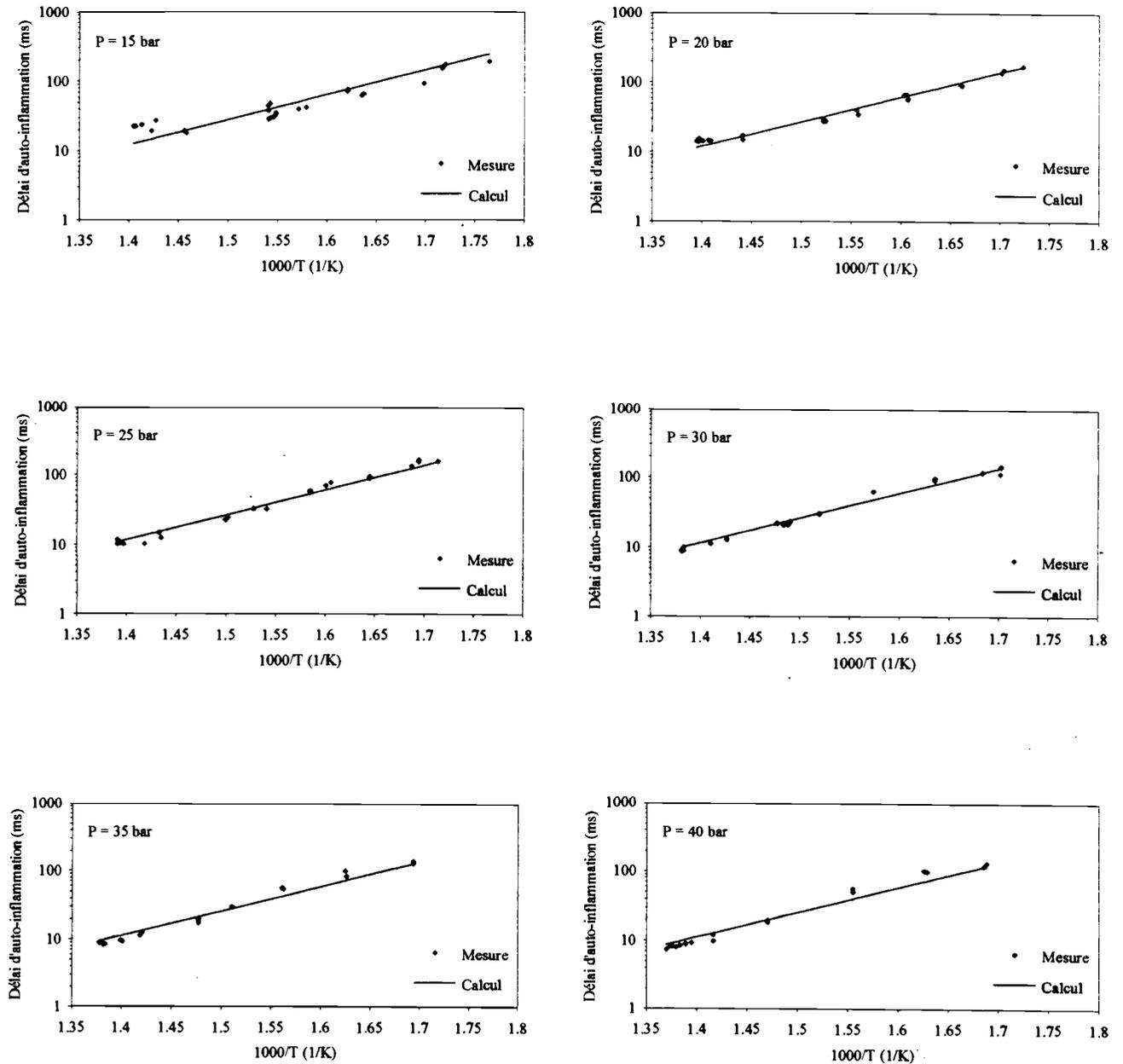


Figure {A10.1} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Bach en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfers (III.1)

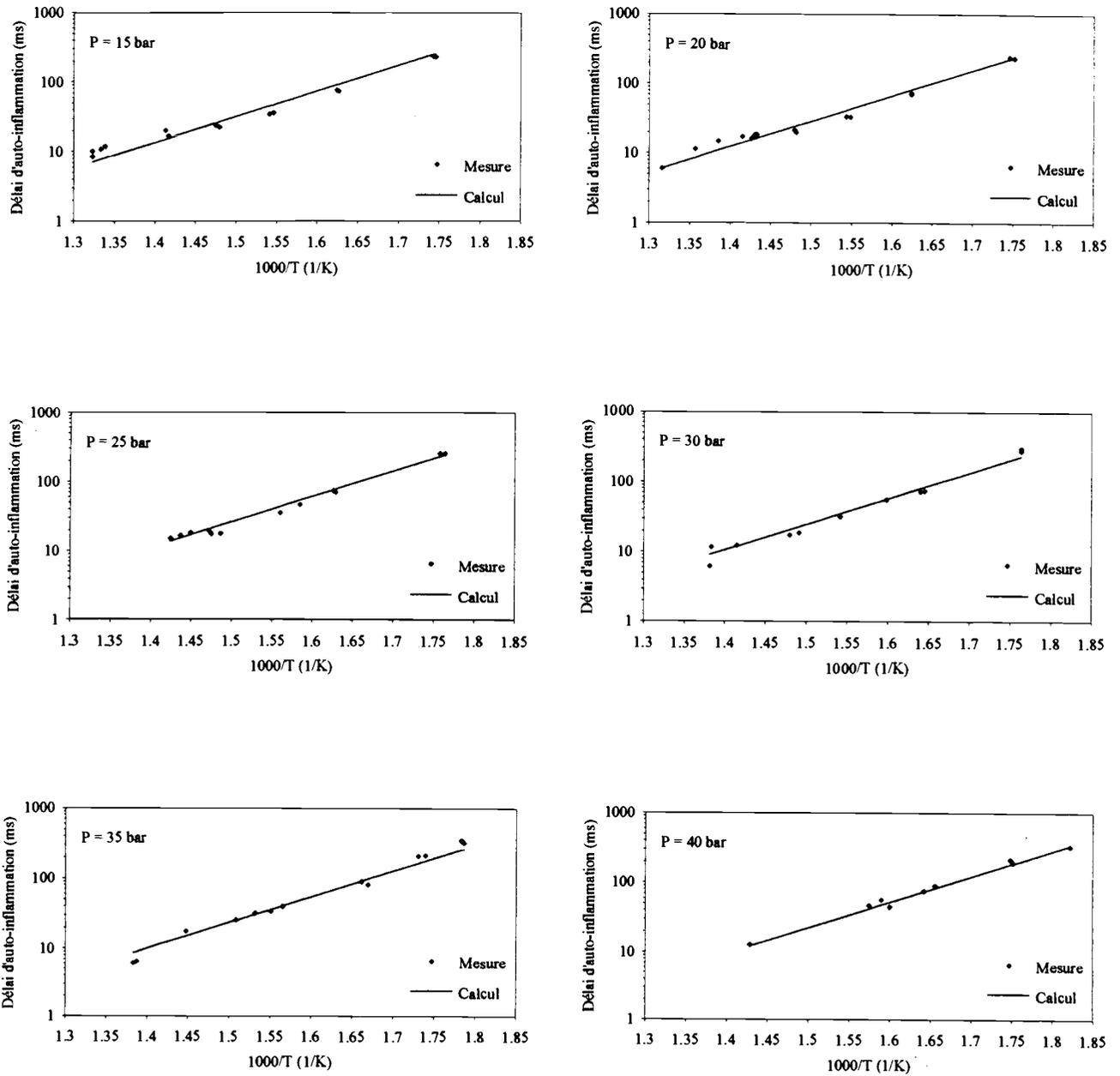


Figure {A10.2} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Beethoven en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfers (III.1)

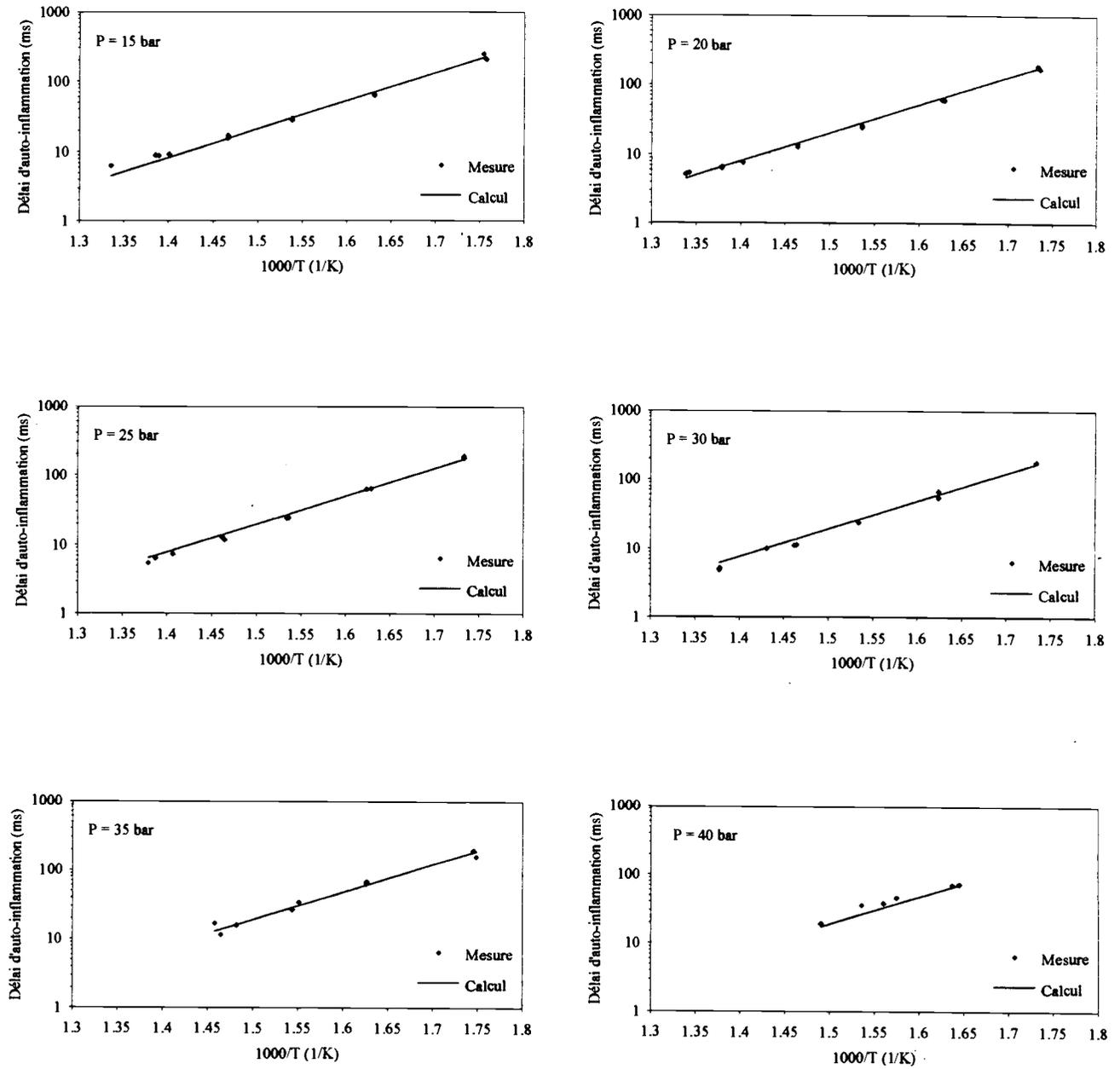


Figure {A10.3} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Berlioz en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfer (III.1)

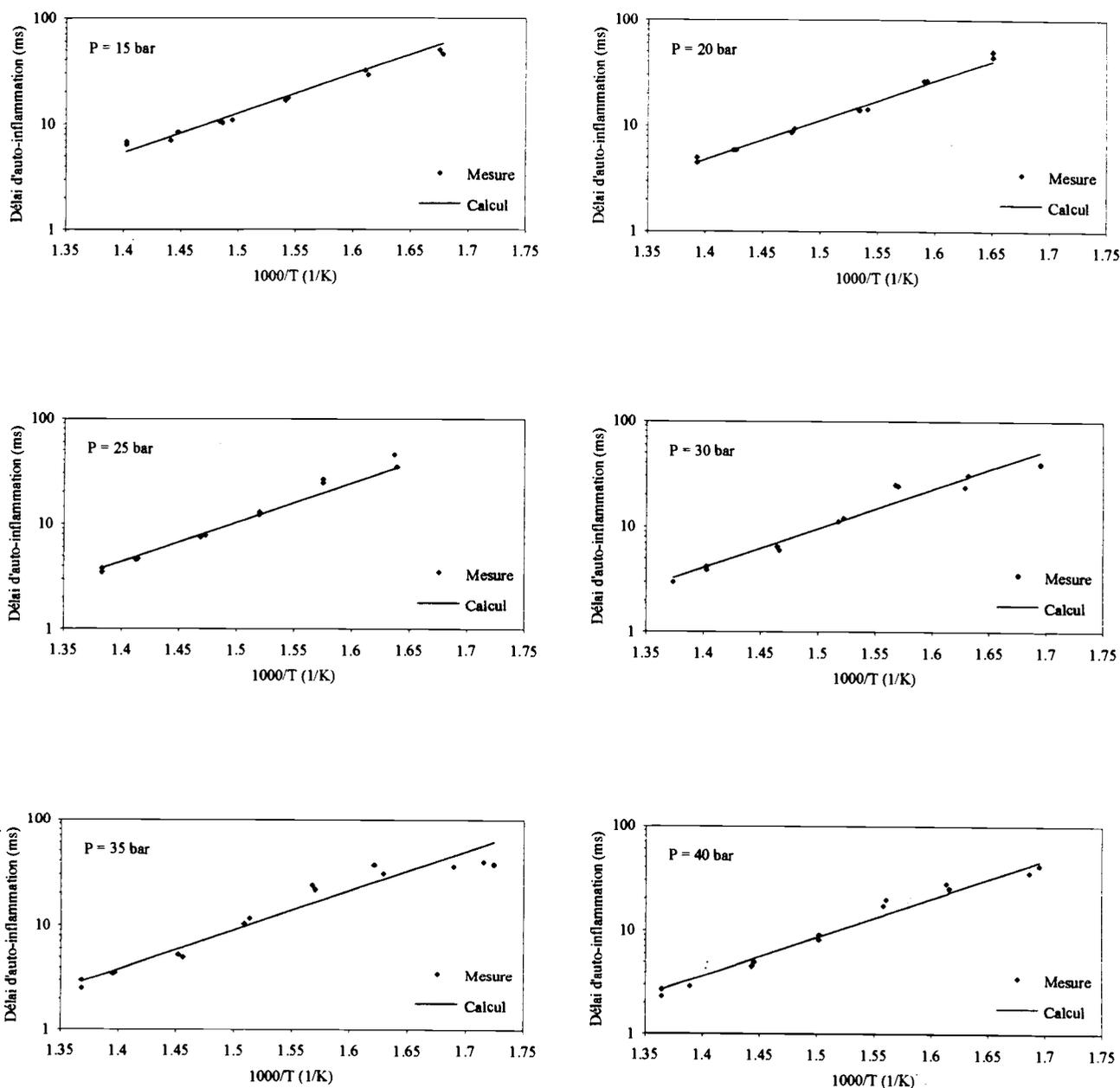


Figure {A10.4} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Mozart en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfers (III.1)

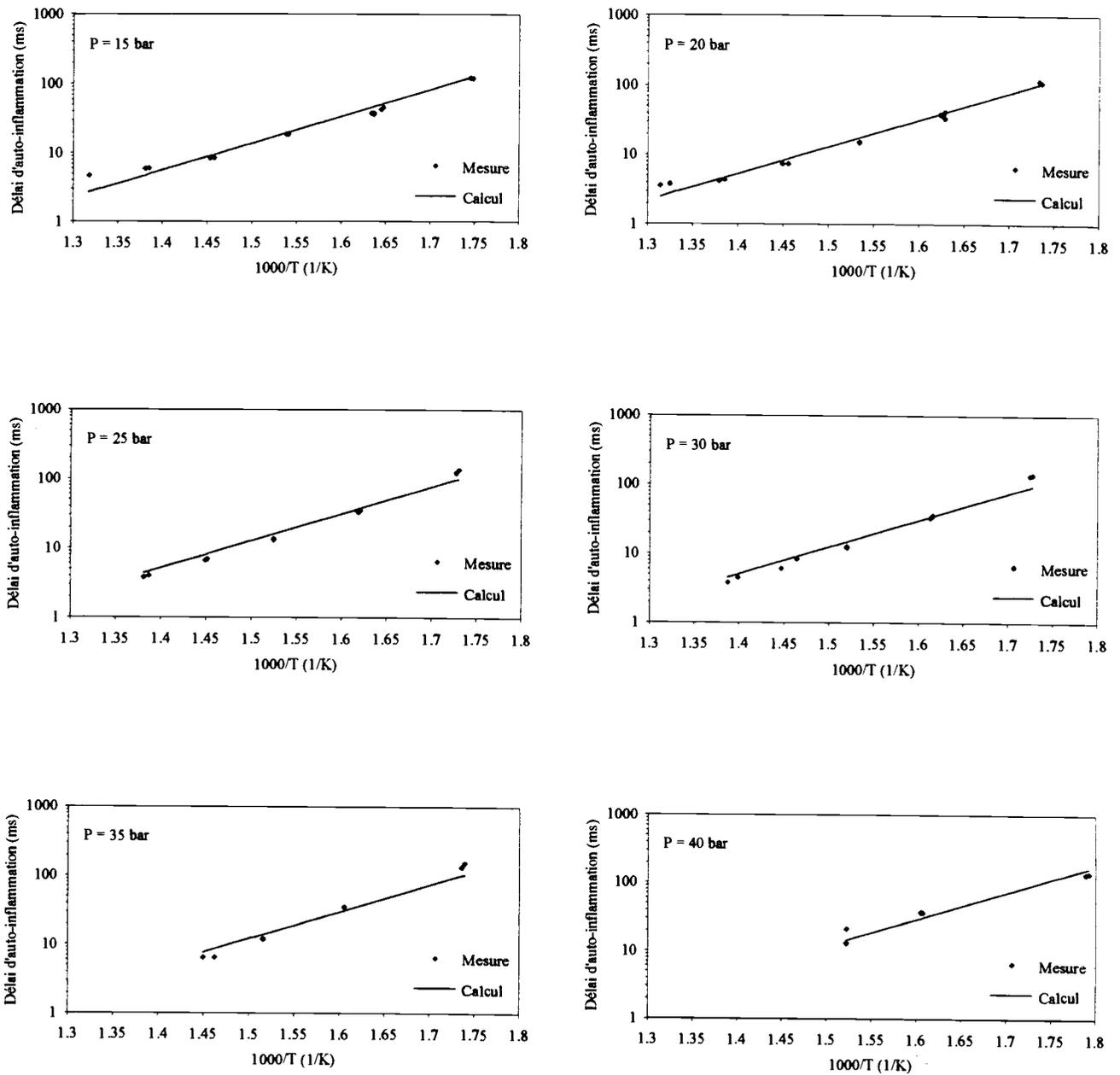


Figure {A10.5} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Schubert en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfers (III.1)

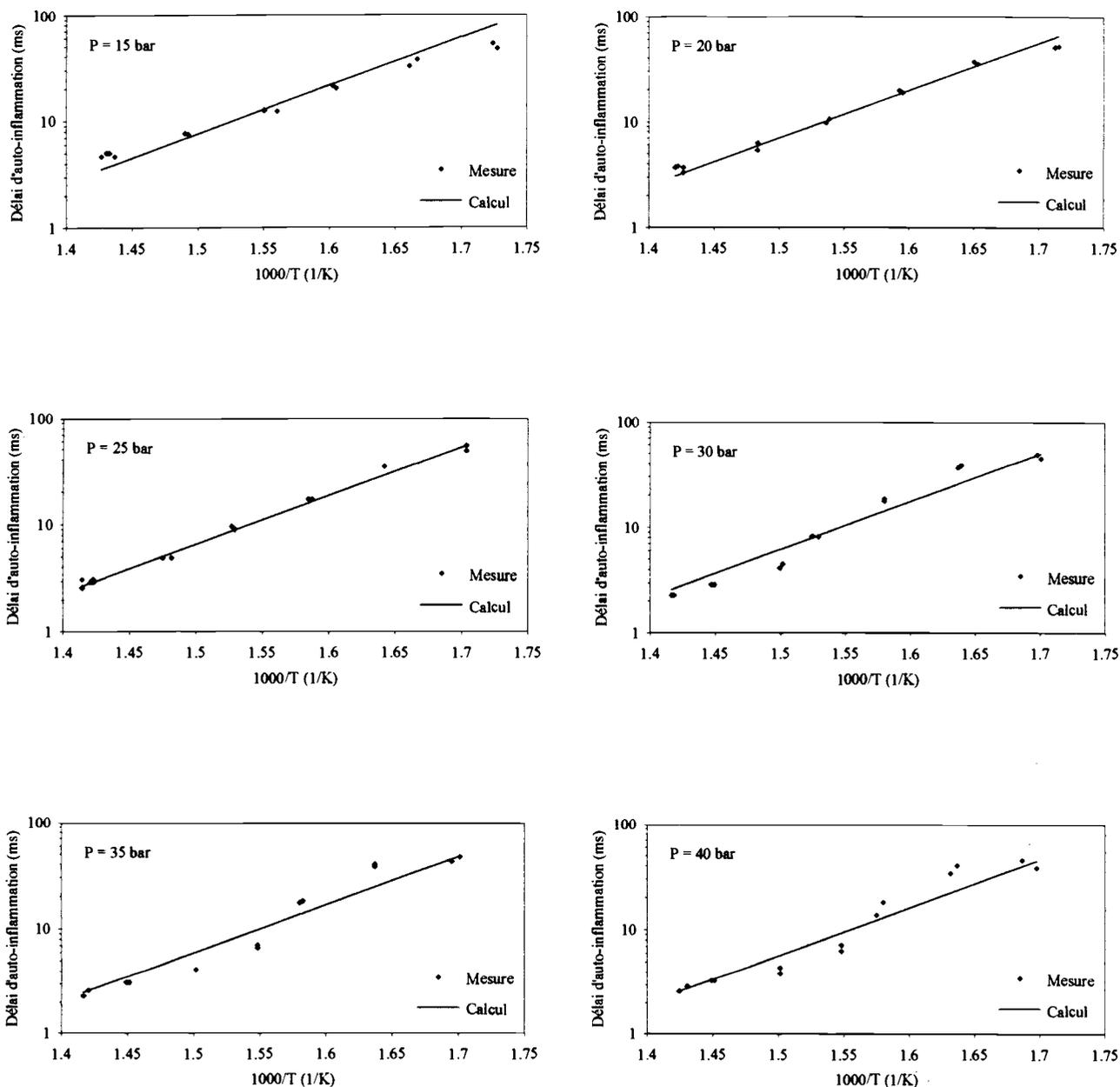


Figure {A10.6} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Häendel en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfers (III.1)

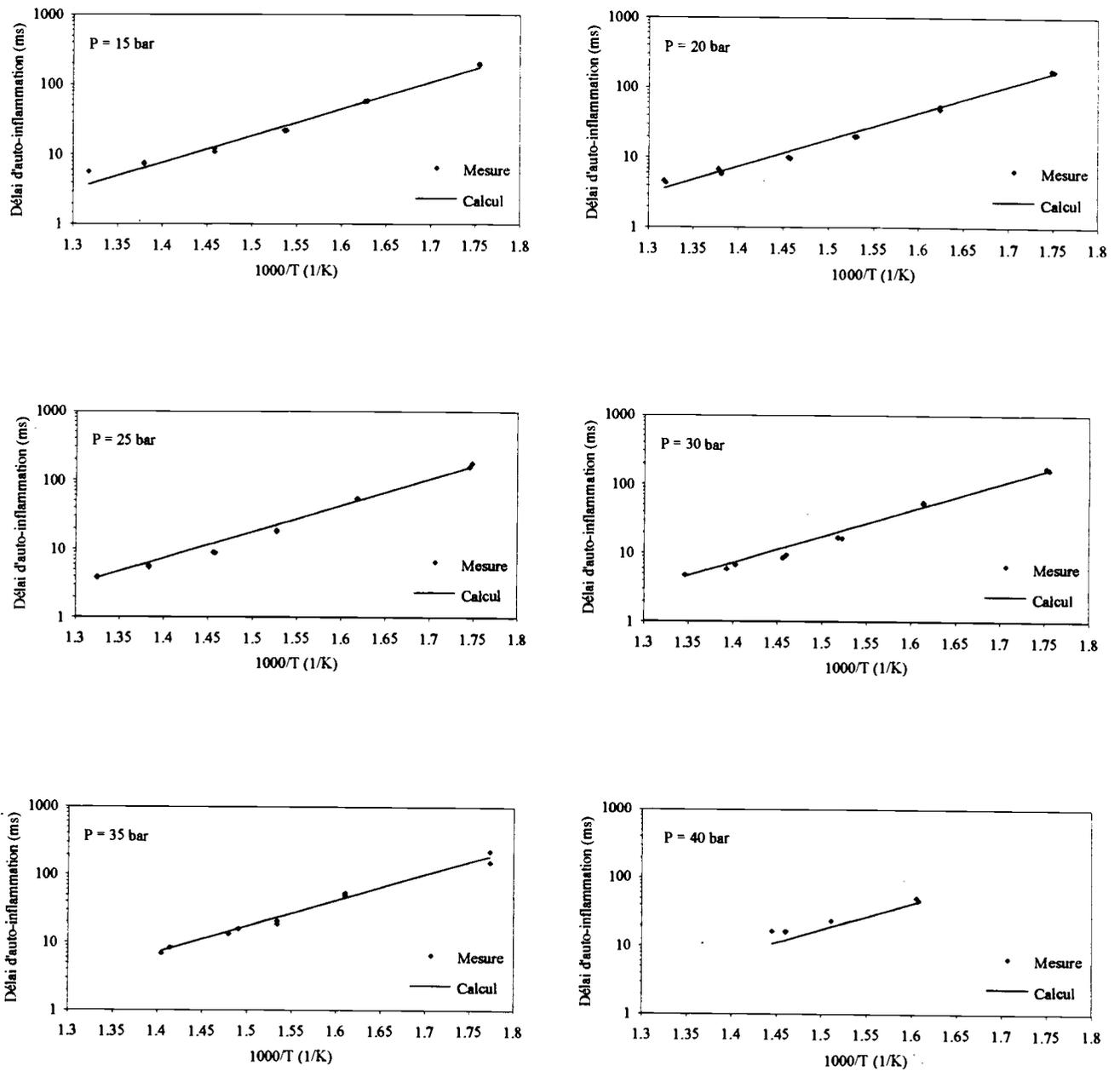


Figure {A10.7} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Scarlatti en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfer (III.1)

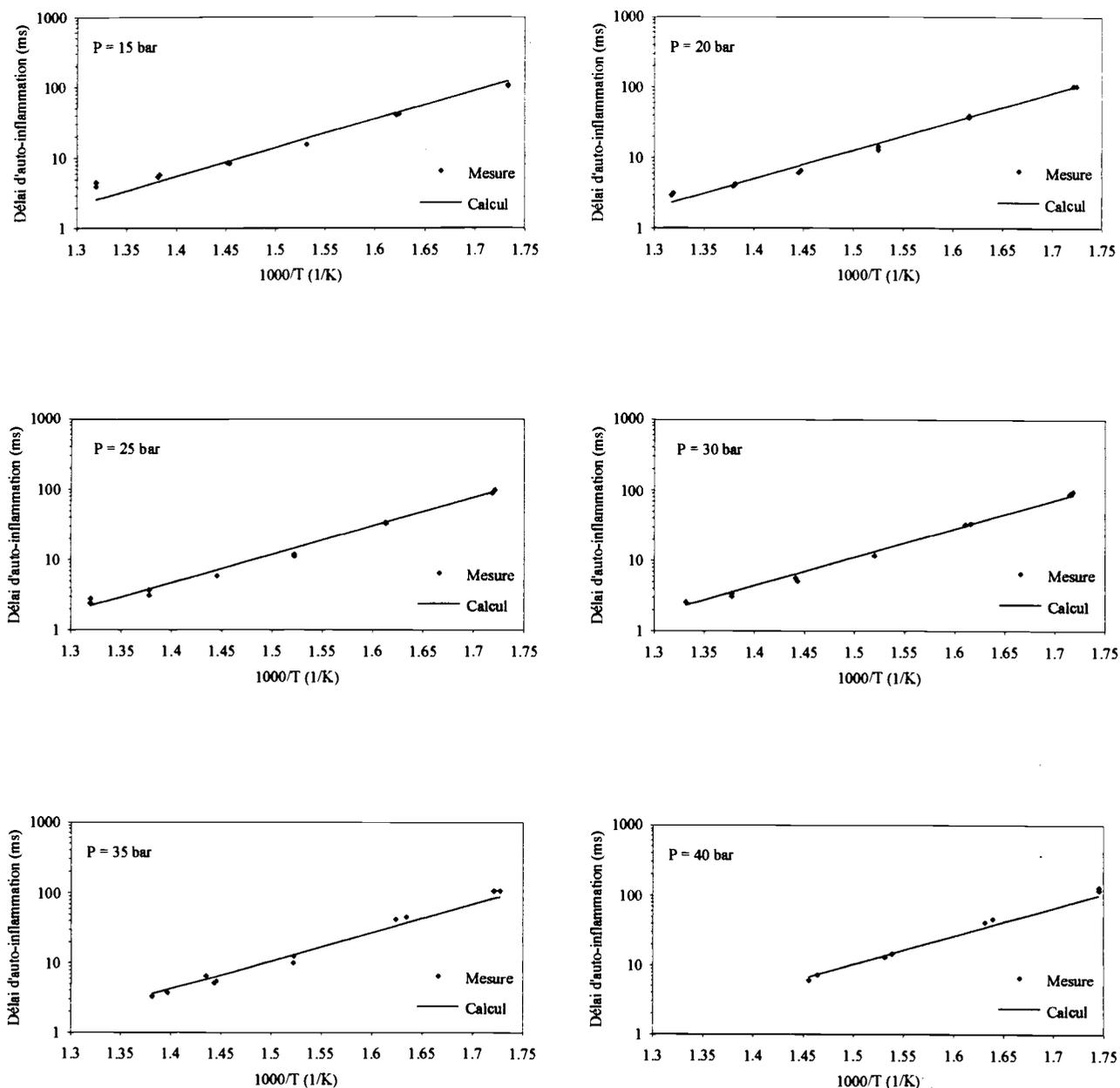


Figure {A10.8} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Rameau en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfers (III.1)

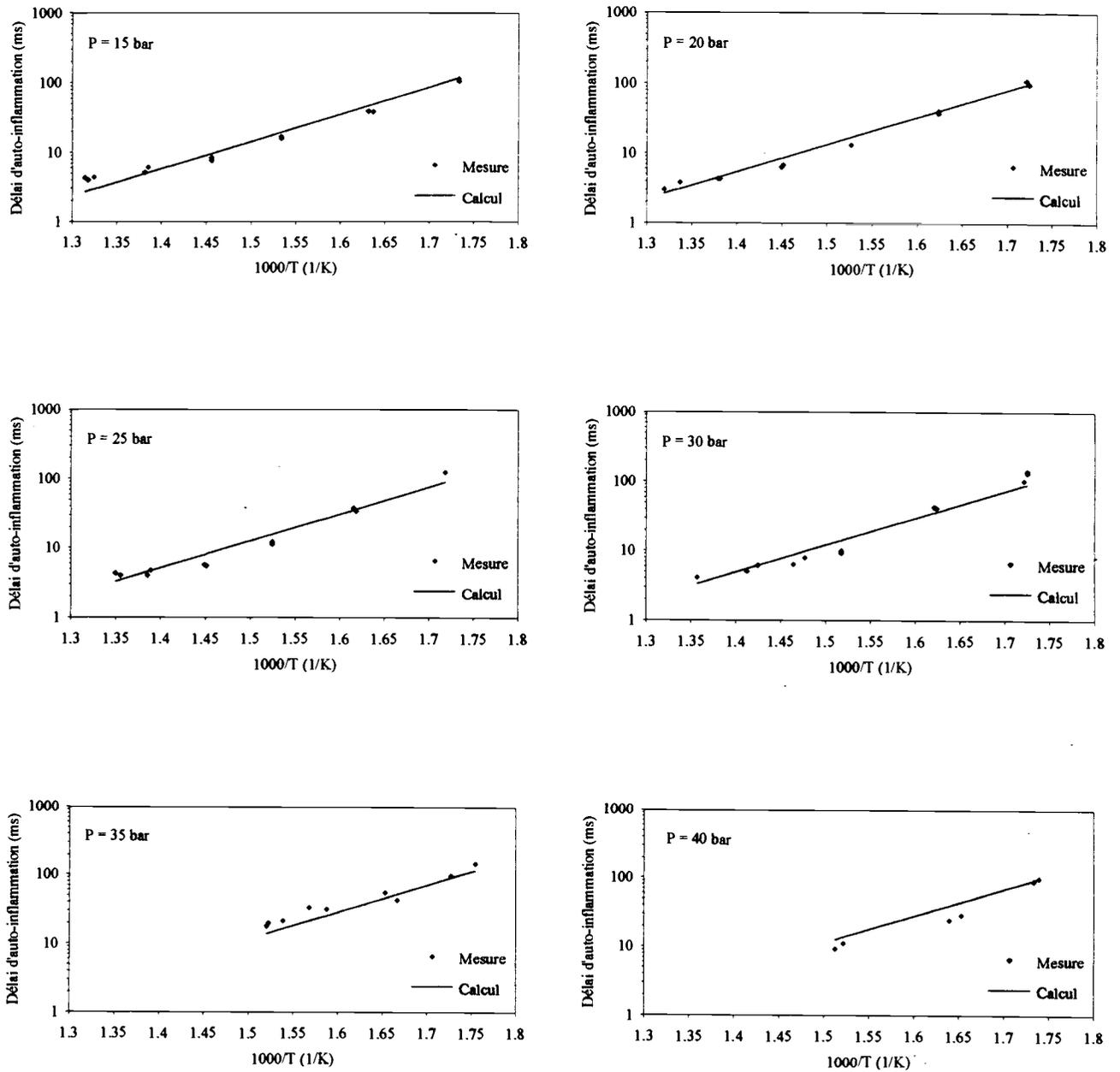


Figure {A10.9} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Vivaldi en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfers (III.1)

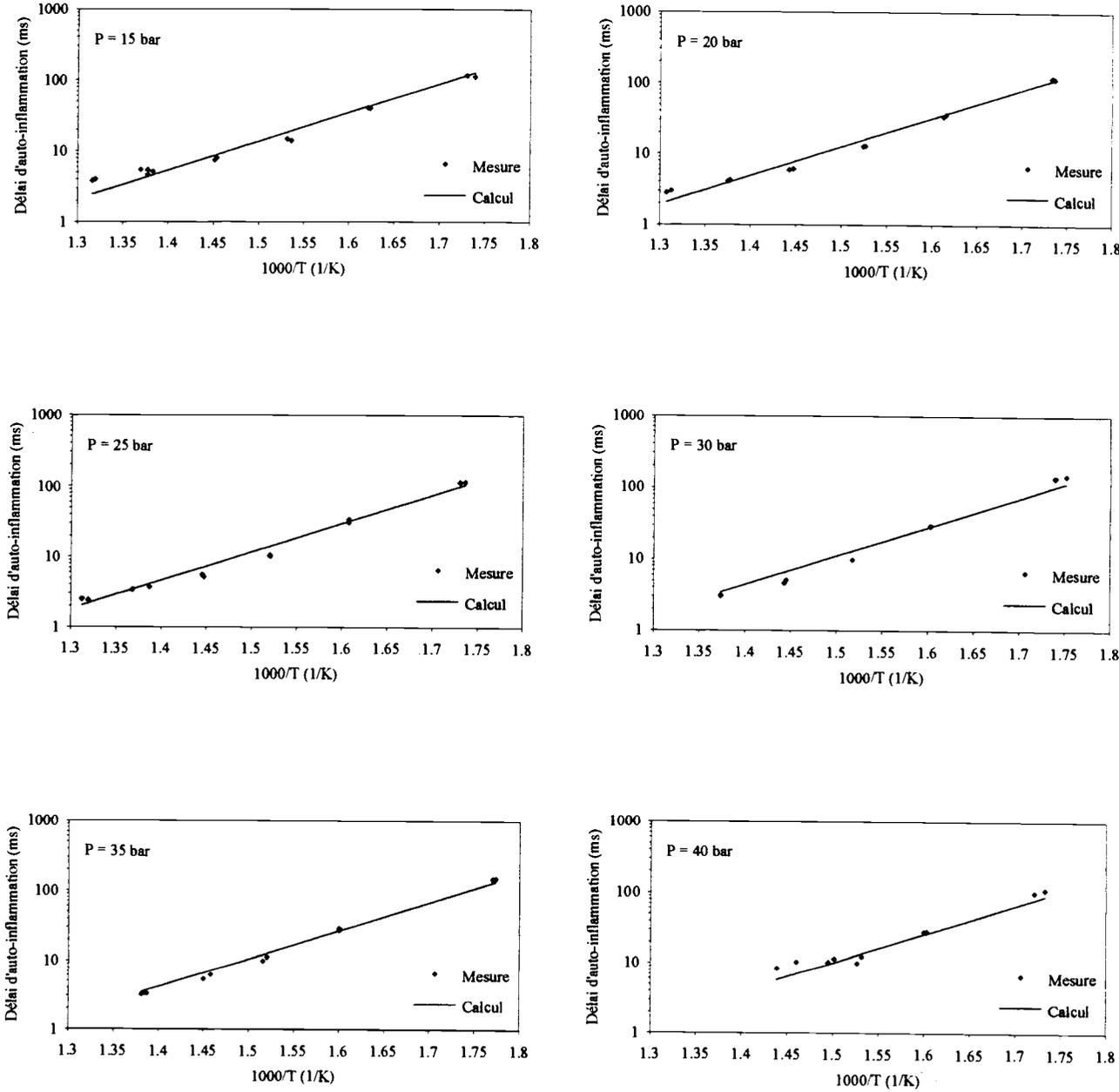


Figure {A10.10} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Messian en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfers (III.1)

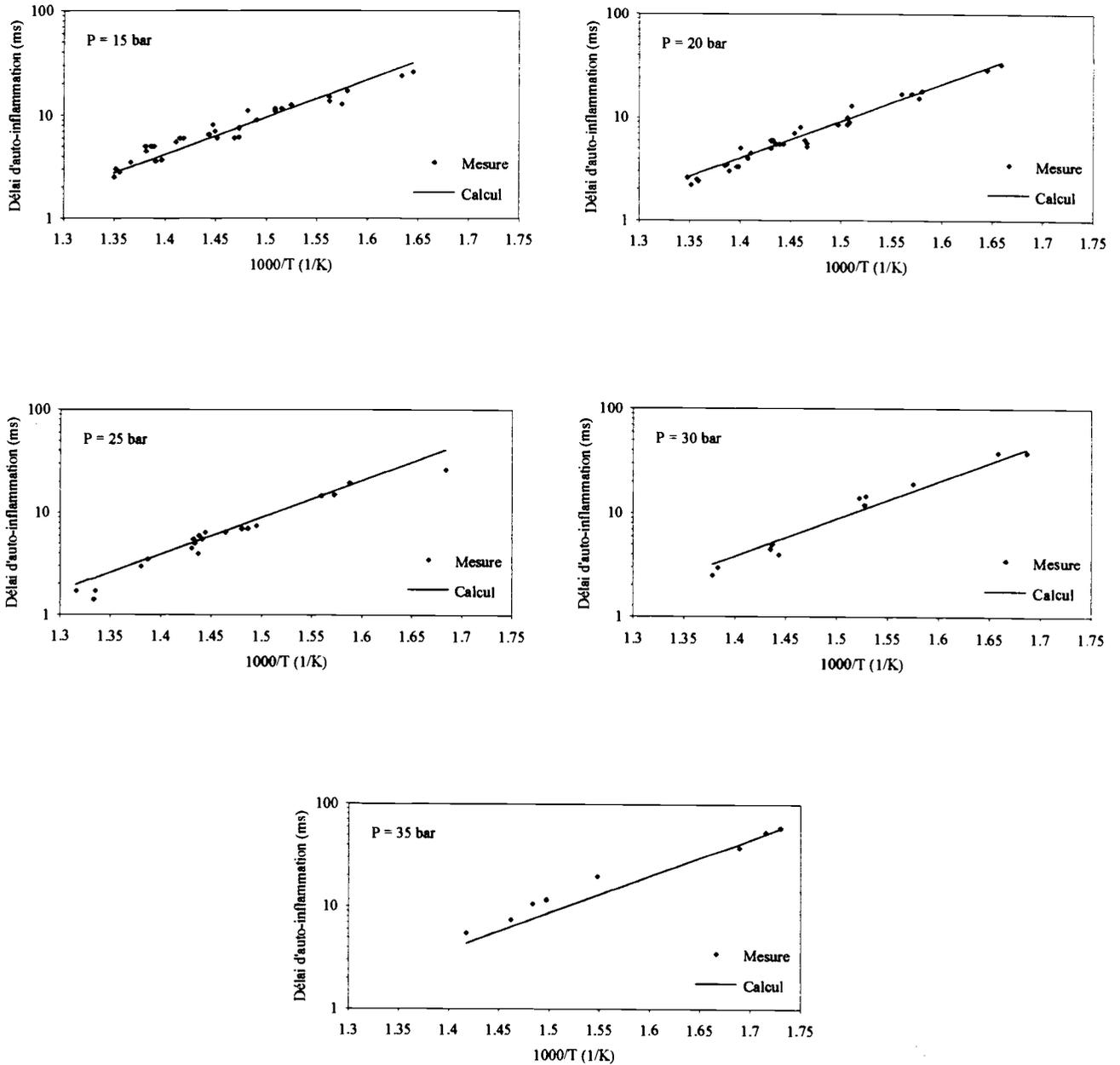


Figure {A10.11} : Evolution du délai d'auto-inflammation du dodécane en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfer (III.1)

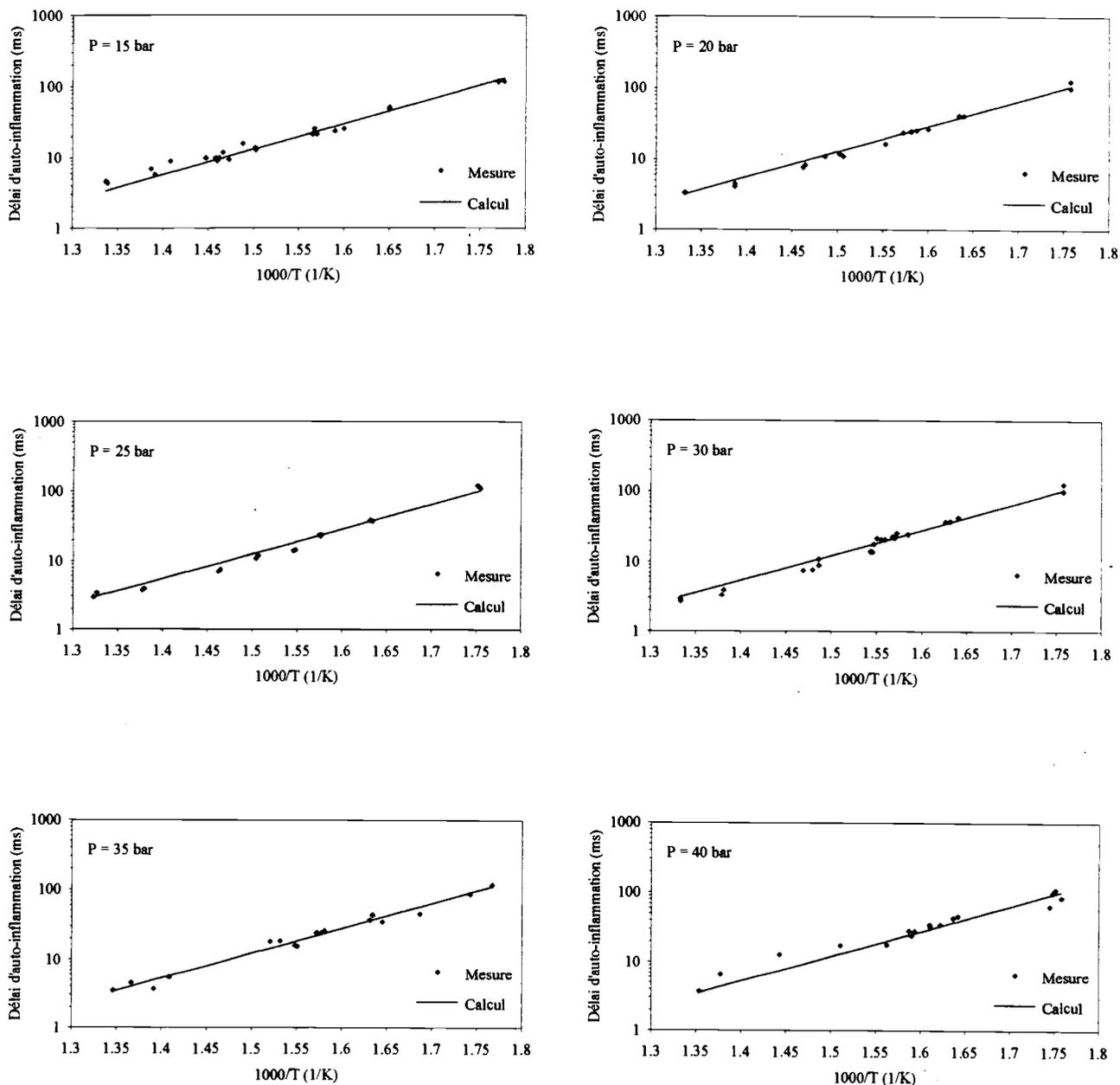


Figure {A10.12} : Evolution du délai d'auto-inflammation du gazole en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la loi de Wolfers (III.1)

ANNEXE 11

DIFFERENTES LOIS EMPIRIQUES TESTEES

La loi empirique présentée dans le chapitre VI a été choisie parmi différentes relations testées. Nous allons maintenant décrire les relations que nous n'avons pas retenues mais qui ont permis d'aboutir à la loi finale.

Toutes les lois qui ont été considérées découlent de la relation de Wolfer :

$$\tau = A.P^{-m}.\exp(B/T) \quad (A11.1)$$

avec :

- τ : délai d'auto-inflammation (en ms)
- P : pression moyenne dans la chambre pendant le délai (en bar)
- T : température moyenne dans la chambre pendant le délai (en K)
- A, m, B : constantes

Dans cette relation, les trois constantes A, m et B dépendent de la nature du carburant et des conditions expérimentales, et notamment des conditions d'injection. Nous avons travaillé dans des conditions expérimentales identiques pour les différents carburants. Les coefficients A, m et B sont donc uniquement fonction de la nature du gazole considéré.

Les valeurs de m obtenues par identification pour les différents gazoles (cf. tableau {VI.2}) sont très dispersées. Il semble donc que ce terme soit représentatif de la dépendance du délai vis-à-vis de la nature du carburant.

Nous supposons que la nature du carburant intervient dans l'expression de m par l'intermédiaire de la viscosité cinématique. Si l'on admet alors une évolution linéaire de m en fonction de la viscosité cinématique du carburant, trois cas distincts peuvent être considérés :

Cas n°1

Le terme B étant en fait proportionnel à l'énergie d'activation apparente du combustible, il paraît logique de le considérer comme une grandeur caractéristique du carburant et par conséquent, de le relier à la nature du gazole. Le terme A est dans ce cas constant quel que soit le combustible utilisé.

Cas n°2

Bien que l'énergie d'activation apparente, et donc le terme B, puissent intuitivement être considérés comme dépendants de la nature du carburant, les courbes de la figure (V.10) nous incitent à penser que les variations du terme B en fonction de la nature du gazole sont relativement faibles. On observe en effet sur cette figure que les pentes des différentes droites, correspondant à des carburants présentant des indices de cétane variés, sont proches les unes des autres. Ces pentes étant égales au terme B, cette constatation nous amène à considérer un second cas où B est constant et où la dépendance du délai vis-à-vis de la nature du carburant est reportée sur le coefficient A.

Cas n°3

C'est le cas retenu (cf. tableau {A11.2}). A et B dépendent tous deux de la nature du carburant.

Le cas n°3 ayant été décrit dans le chapitre VI, nous allons ici nous attacher à présenter les deux autres cas. Les relations adoptées pour exprimer les coefficients A, m et B sont identiques à celles retenues dans le cas n°3, à savoir :

$$\begin{aligned} \text{Cas n°1 : } \quad & A = \text{constante} \\ & m = d.v + e \\ & B = f.IC + g.t_{\text{paraf}} + h \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Cas n°2 : } \quad & A = \exp(a.IC + b.t_{\text{paraf}} + c) \\ & m = d.v + e \\ & B = \text{constante} \end{aligned}$$

L'identification des différents coefficients intervenant dans ces expressions a été effectuée en utilisant les six premiers carburants (n°1 à 6). Le tableau {A11.1} indique les résultats obtenus.

Cas n°1	Cas n°2
$A = 6,2647 \cdot 10^{-5}$	$A = \exp(0,0494 \cdot IC - 8,8266 \cdot t_{\text{paraf}} - 9,3448)$
$m = 0,1059 \cdot v - 0,2728$	$m = 0,1077 \cdot v - 0,2878$
$B = 31,4488 \cdot IC - 5618,3 \cdot t_{\text{paraf}} + 9085,1$	$B = 8859,1$

Tableau {A11.1} : Expressions des coefficients A, m et B pour les différents cas testés

Afin de comparer les résultats respectifs des relations issues des trois cas proposés, nous avons adopté le critère suivant :

$$\min \left(\frac{\sum_{i=1,n} (\tau_{\text{exp}}^i - \tau_{\text{calc}}^i)^2}{n} \right) \quad (\text{A11.2})$$

- où :
- τ_{exp}^i : délai d'auto-inflammation expérimental
 - τ_{calc}^i : délai d'auto-inflammation calculé
 - n : nombre de mesures de délai d'auto-inflammation relatives à un carburant donné, à différentes conditions de température et de pression

Ce critère permet de minimiser l'écart existant entre les délais d'auto-inflammation expérimentaux et calculés.

Le tableau {A11.2} présente les différentes valeurs de $\frac{\sum_{i=1,n} (\tau_{\text{exp}}^i - \tau_{\text{calc}}^i)^2}{n}$ pour les dix carburants utilisés dans le cas des trois cas testés.

Carburant	Cas n°1	Cas n°2	Cas n°3
Bach (n°1)	169,7	206,4	116,4
Beethoven (n°2)	343,6	263,4	255,2
Berlioz (n°3)	366,2	281,8	164,8
Mozart (n°4)	76,2	50,8	39,3
Schubert (n°5)	427,7	452,8	346,0
Händel (n°6)	29,2	29,0	60,4
Scarlatti (n°7)	96,5	128,7	314,1
Rameau (n°8)	109,2	125,3	82,1
Vivaldi (n°9)	475,0	518,4	408,8
Messian (n°10)	88,2	110,7	69,4

Tableau {A11.2} : Valeurs de $\frac{\sum_{i=1,n} (\tau_{\text{exp}}^i - \tau_{\text{calc}}^i)^2}{n}$ pour les dix carburants utilisés

D'après ce tableau, le cas n°3 donne donc les résultats les plus satisfaisants en moyenne pour l'ensemble des carburants utilisés.

ANNEXE 12

EVOLUTION DU DELAI D'AUTO-INFLAMMATION
DES CARBURANTS UTILISES EN FONCTION DE LA TEMPERATURE
POUR DIFFERENTES PRESSIONS INITIALES

COMPARAISON ENTRE LES DELAIS MESURES EXPERIMENTALEMENT
ET LES DELAIS CALCULES A L'AIDE DE LA RELATION (VI.7)

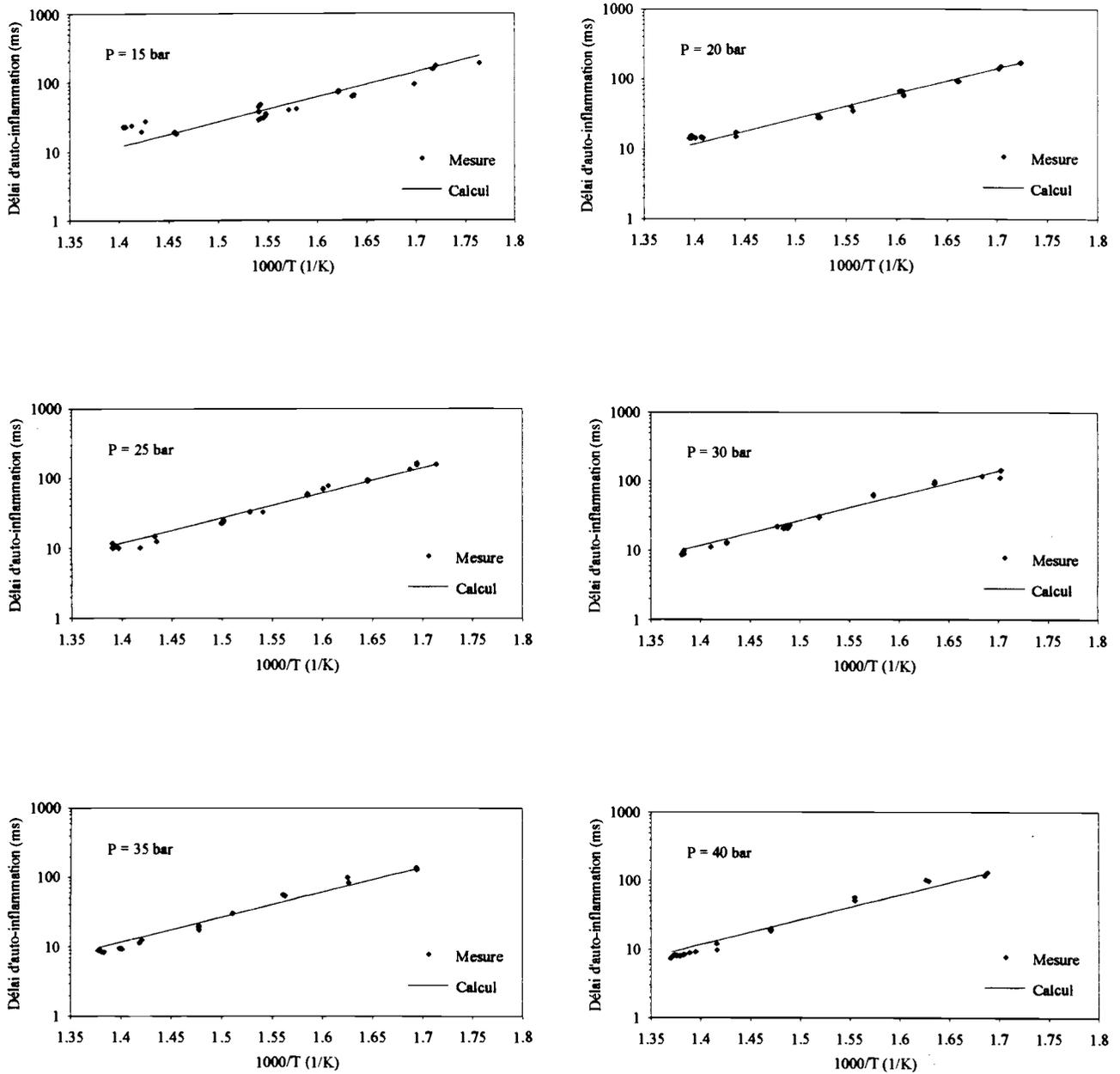


Figure {A12.1} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Bach en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)

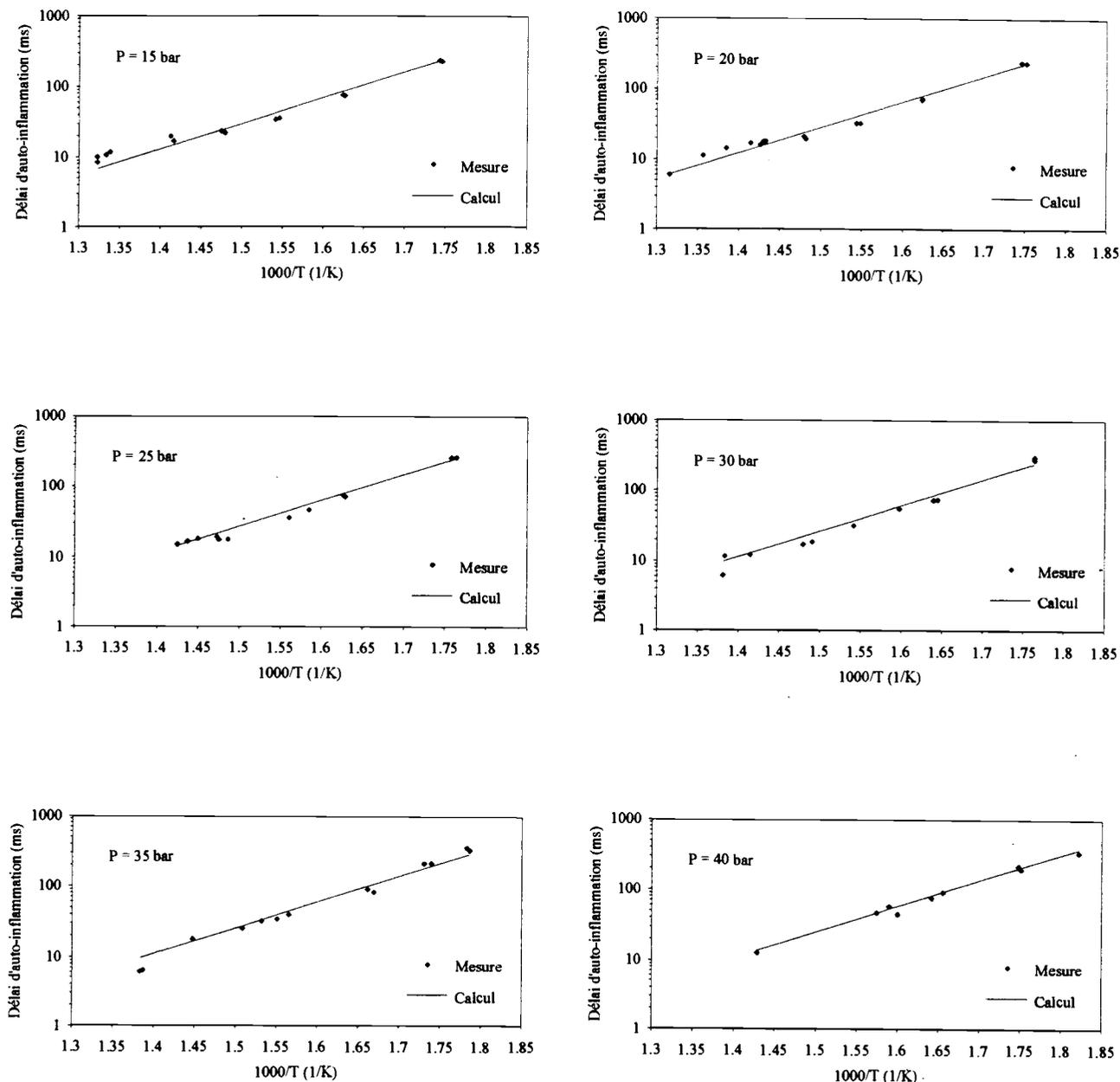


Figure {A12.2} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Beethoven en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)

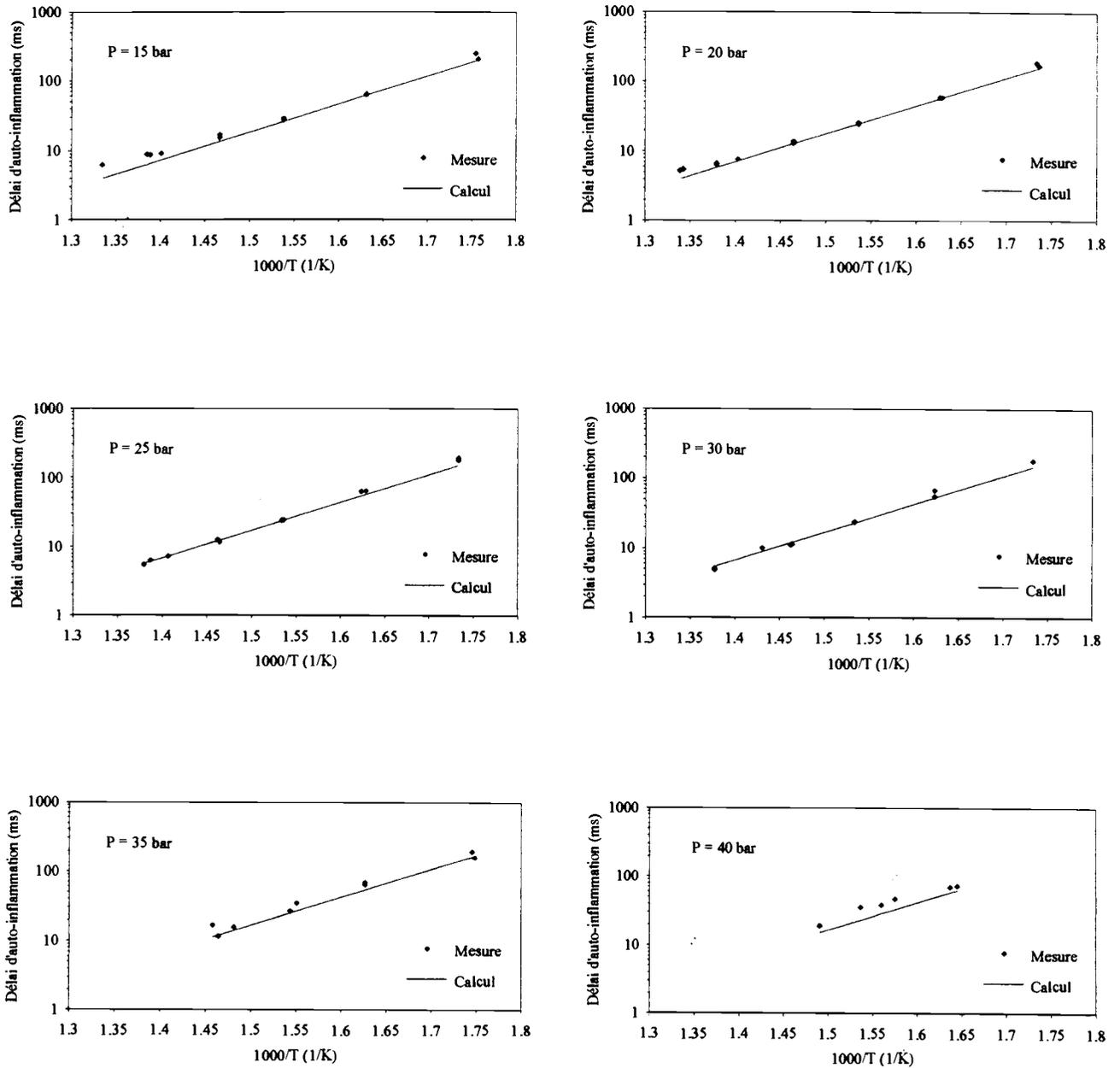


Figure {A12.3} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Berlioz en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)

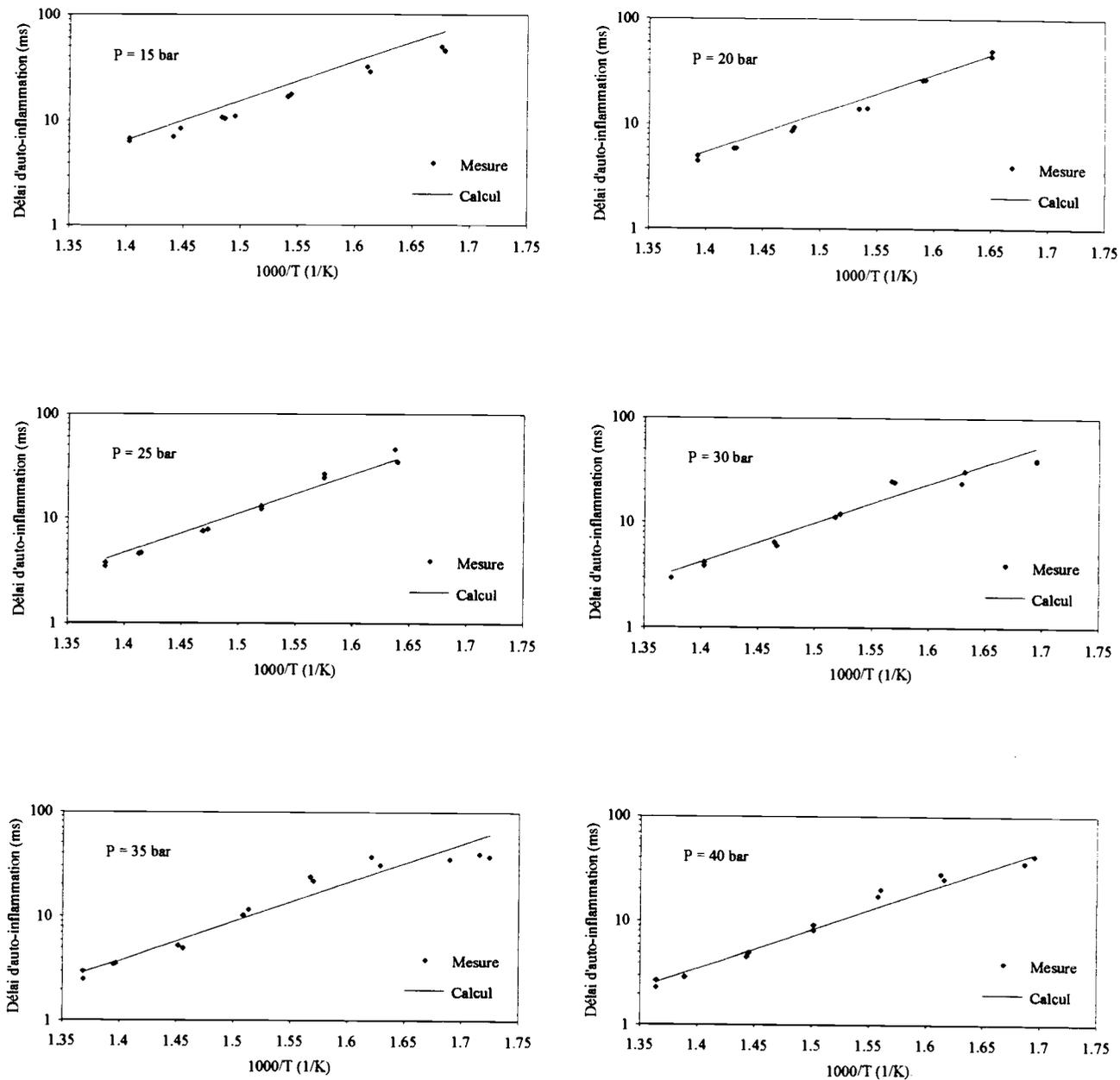


Figure {A12.4} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Mozart en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)

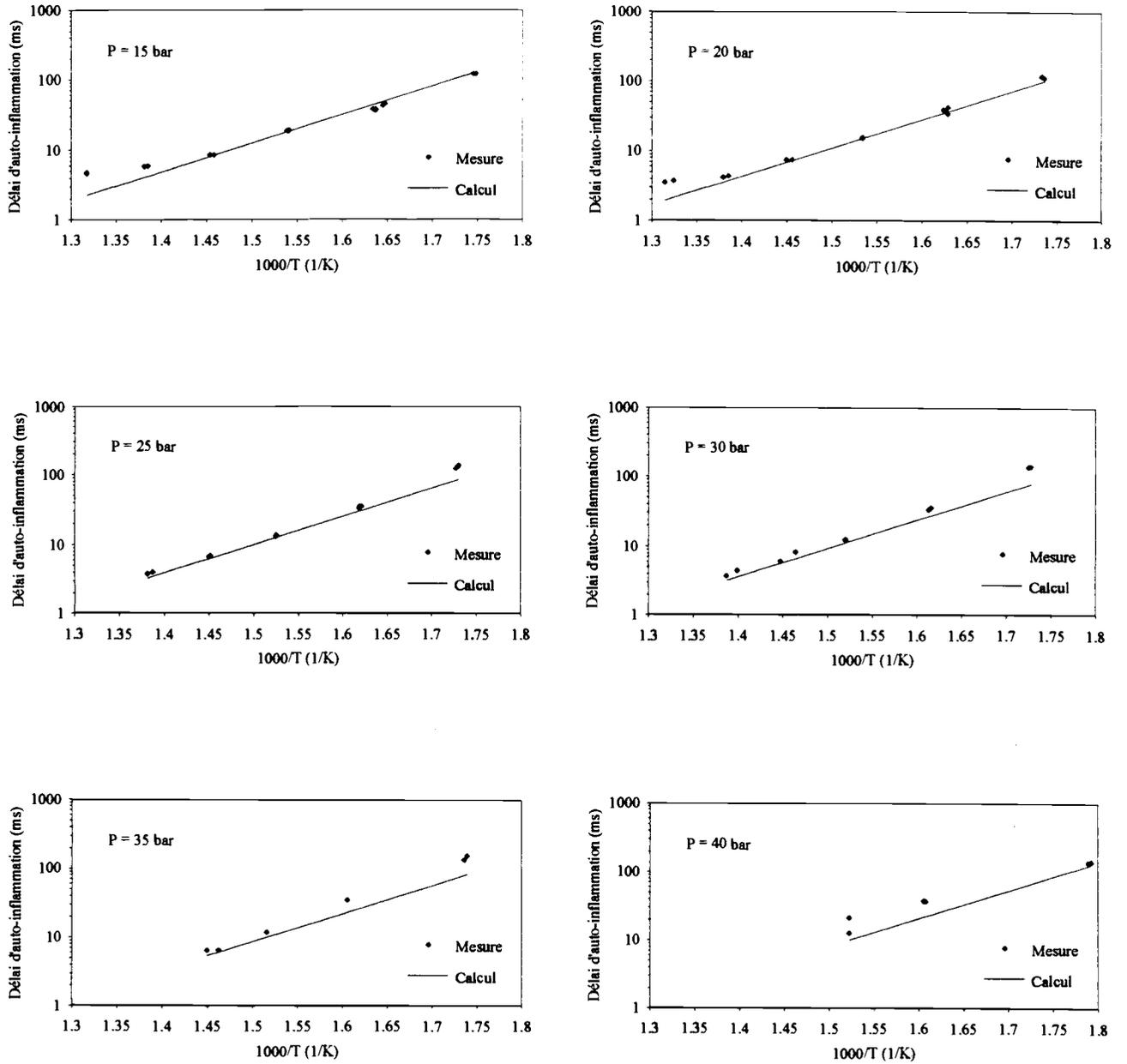


Figure {A12.5} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Schubert en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)

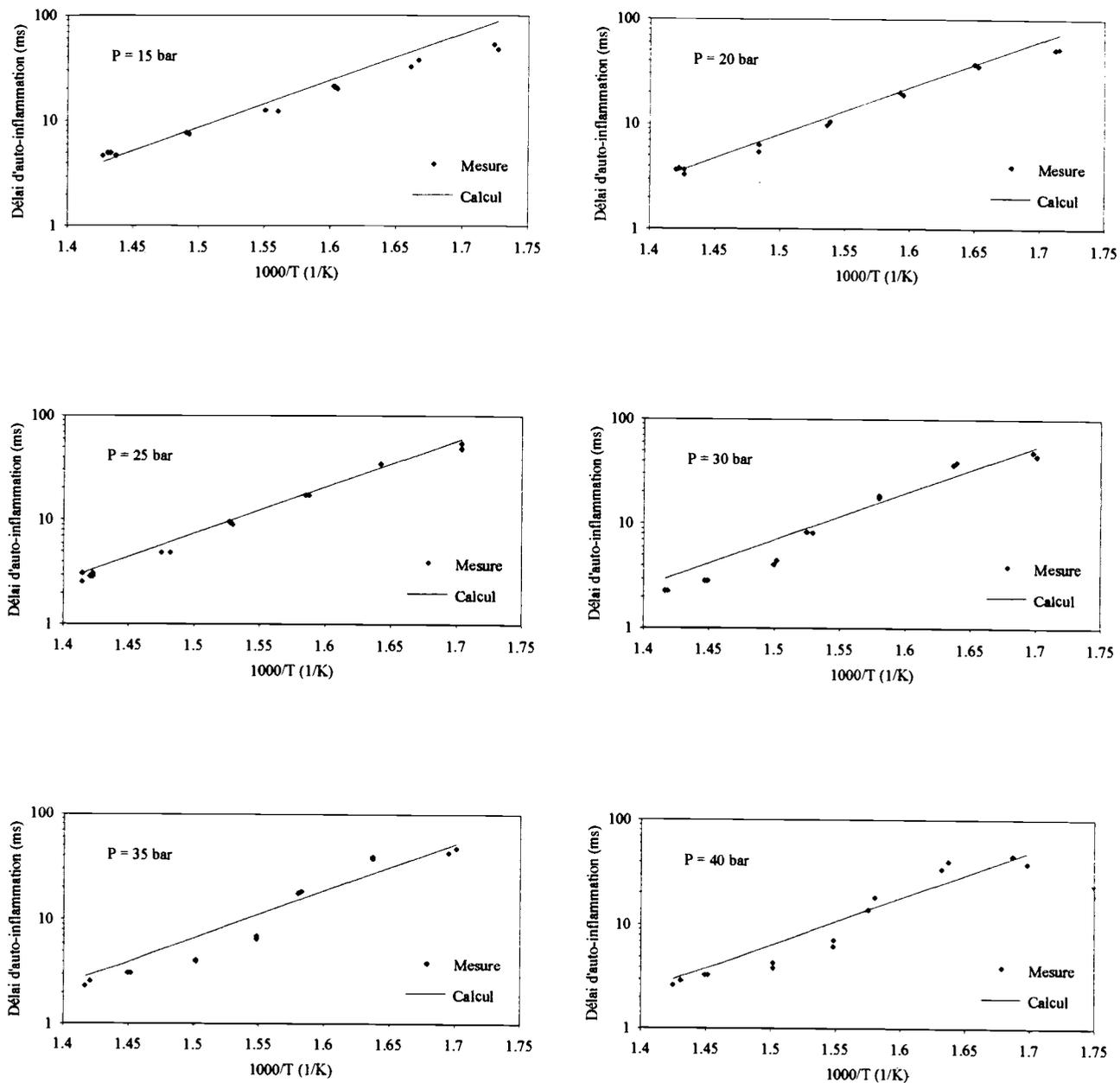


Figure {A12.6} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Häendel en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)

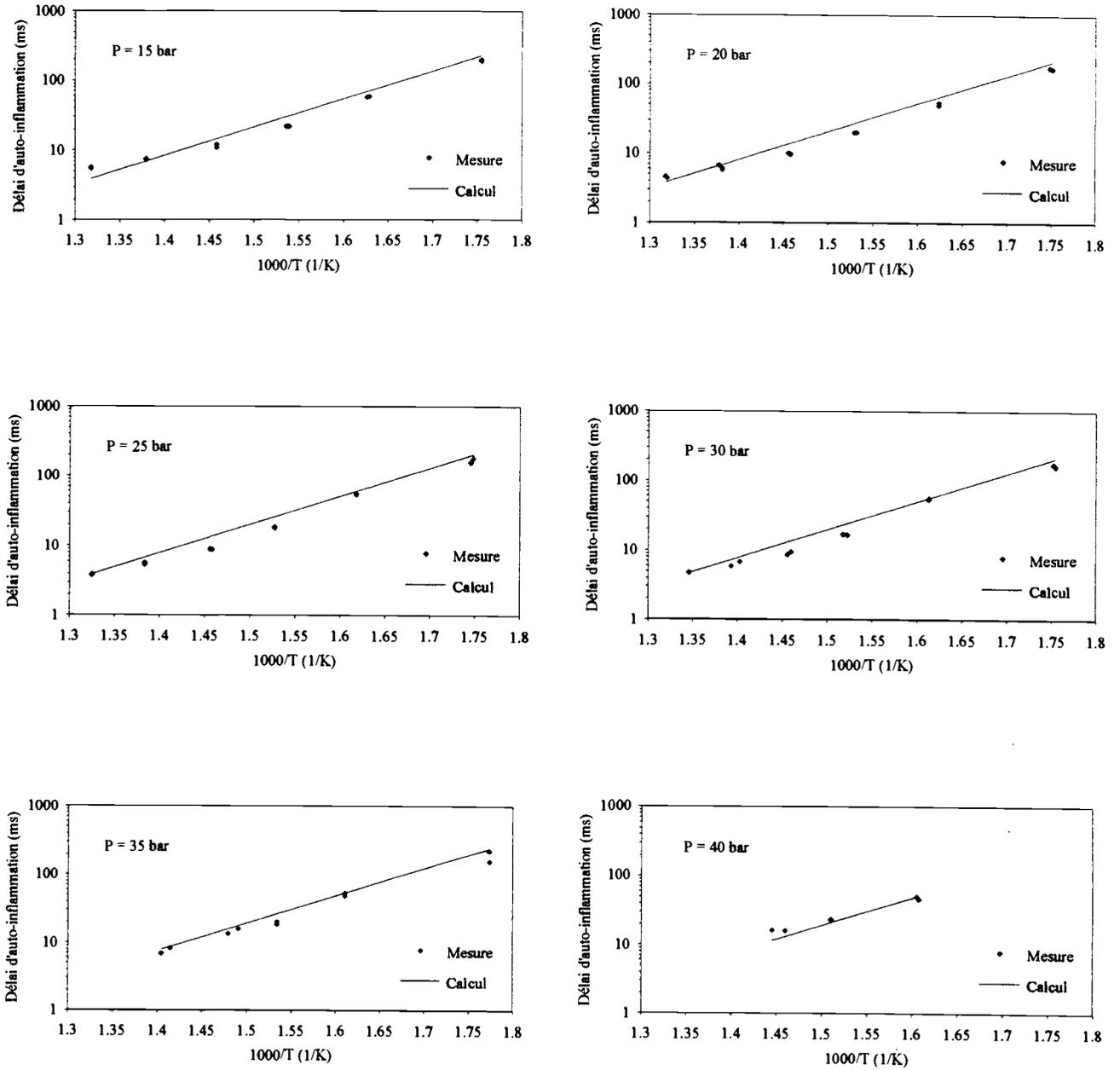


Figure {A12.7} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Scarlatti en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)

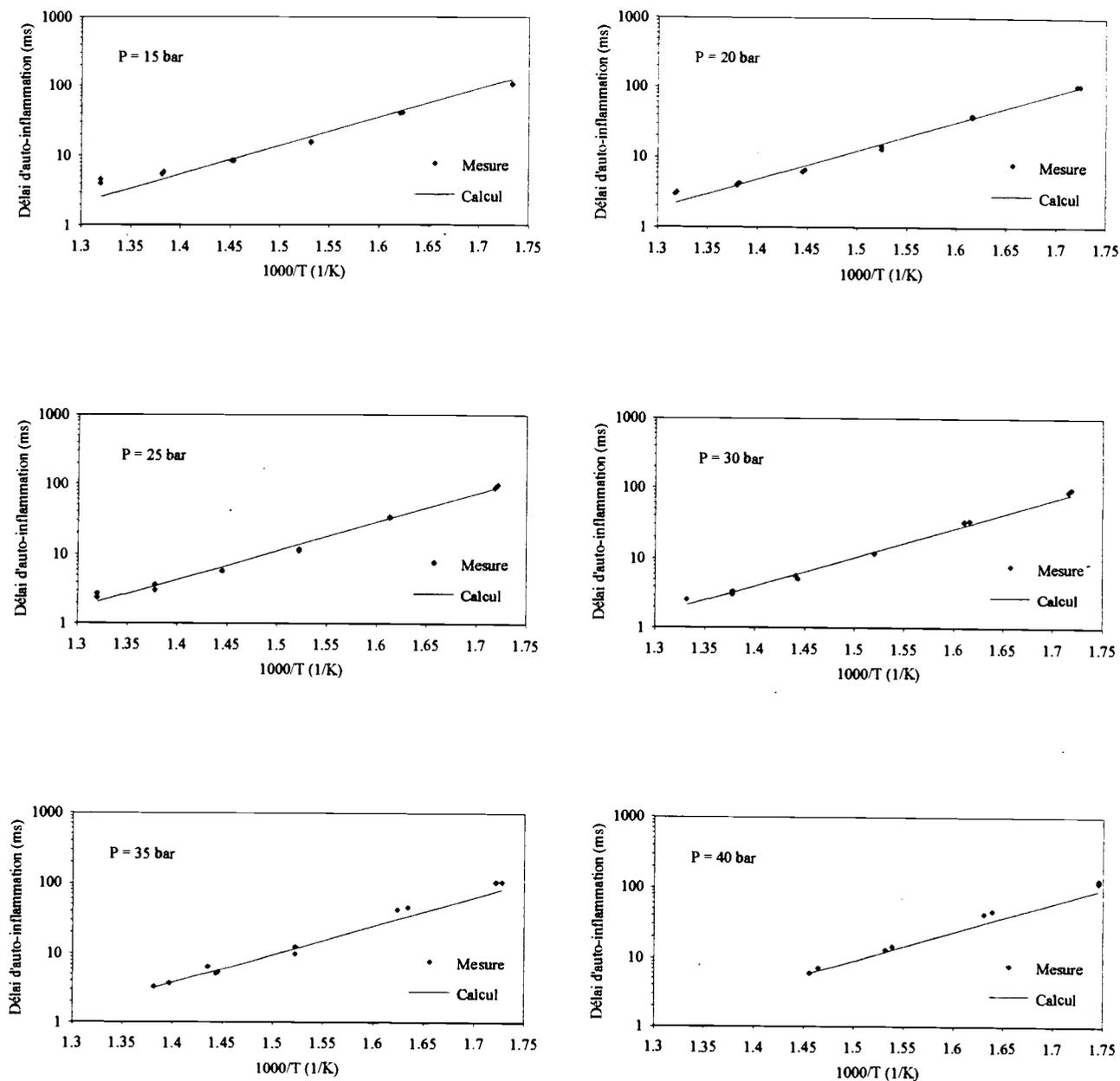


Figure {A12.8} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Rameau en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)

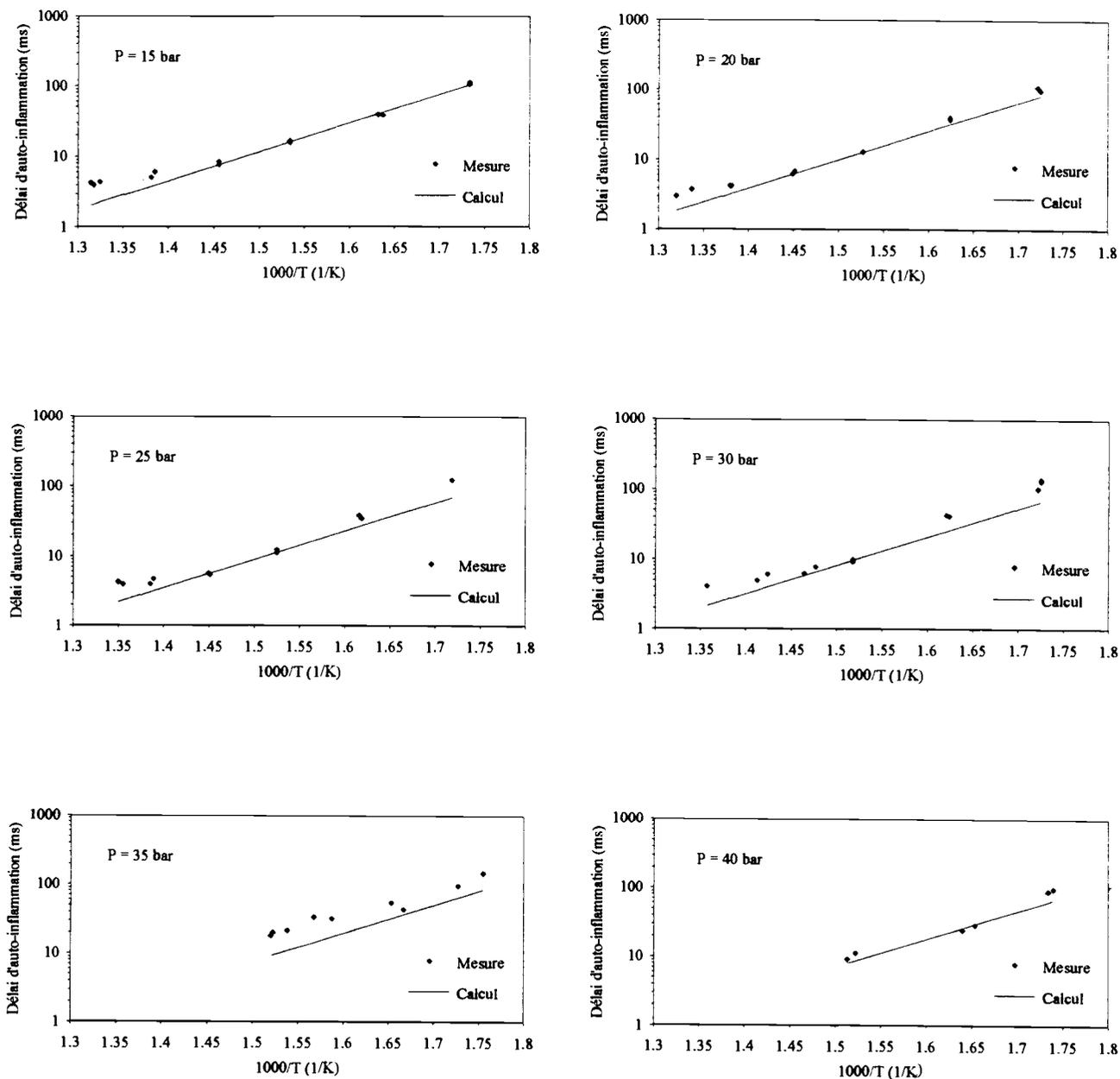


Figure {A12.9} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Vivaldi en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)

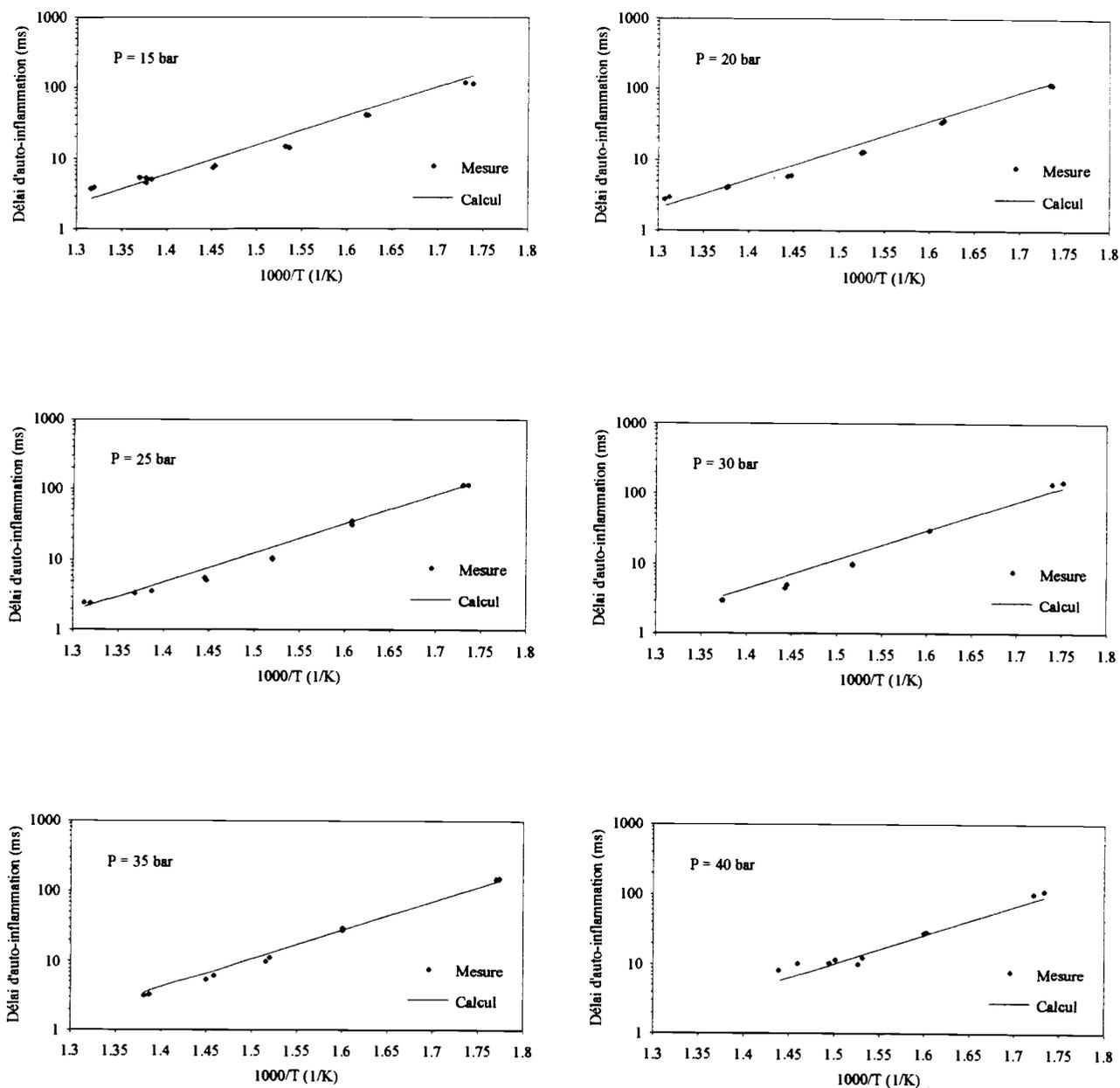


Figure {A12.10} : Evolution du délai d'auto-inflammation de Messian en fonction de la température pour différentes pressions initiales. Comparaison entre les mesures expérimentales et les délais calculés par la relation (VI.7)

dernière page de la thèse

AUTORISATION DE SOUTENANCE

Vu les dispositions de l'arrêté du 5 Juillet 1984, modifié par l'arrêté du 21 Mars 1988 et l'arrêté du 23 Novembre 1988,

Vu la demande du Directeur de Thèse

Mr J.C. CHAMPOUSSIN Professeur - Machines Thermiques - ECOLE
CENTRALE DE LYON,

et les rapports de

Mr F. FISSON Maître de Conférences - ENSMA - Chasseneuil en
Poitou - BP 109 - 86960 FUTUROSCOPE Cedex,

Mr K. SAHETCHIAN Directeur de Recherche - Labo. Mécanique
Physique - 78210 SAINT CYR L'ECOLE,

Mademoiselle **ALIGROT Catherine**

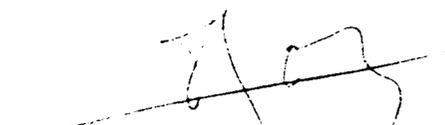
est autorisé à soutenir une thèse pour l'obtention

du titre de **DOCTEUR**

Spécialité : **THERMIQUE ET ENERGETIQUE**

Fait à Ecully, le 18 février 1994

P/Le Directeur de l'E.C.L.
Le Directeur
de l'Administration de la
Recherche



F. LEBOEUF

