

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

جامعة أبي بكر بلقايد - تلمسان -

Université Aboubakr Belkaïd – Tlemcen –

Faculté de TECHNOLOGIE



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du **diplôme** de **MASTER**

En : Génie Mécanique

Spécialité : Energétique

Par : REGGOUA Oussama

Sujet

Etude numérique de la combustion homogène à allumage par compression (HCCI) dans les moteurs à combustion interne.

Mme.SARI HASSOUN Hind,
M.Sidi Mohammed YOUSSEFI
M.BENMANSOUR Abdelkarim

MAA
MAB
MCB

Université de Tlemcen
Université de Tlemcen
Université de Tlemcen

Président
Examinateur
Encadreur

Année universitaire : 2025 /2026

Remerciements

Avant tout, je remercie Allah le Tout-Puissant de m'avoir accordé la force, la patience et la persévérance nécessaires pour mener à bien ce travail.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mon encadrant, **M.**

[BENMANSOUR Abdelkarim], pour son accompagnement, sa disponibilité, ses précieux conseils ainsi que son soutien constant tout au long de la réalisation de ce mémoire. Ses orientations et son expertise ont grandement contribué à l'aboutissement de ce travail.

J'adresse également mes sincères remerciements aux membres du jury, **M. [Sidi Mohammed YOUSSEFI]** et **Mme [SARI HASSOUN Hind]**, pour l'honneur qu'ils me font en acceptant d'évaluer ce travail. Je les remercie pour le temps qu'ils consacreront à son examen ainsi que pour leurs remarques et suggestions qui contribueront à son amélioration.

Enfin, je remercie toutes les personnes ayant participé, de près ou de loin, à la réalisation de ce mémoire.

Dédicace

Je dédie ce modeste travail à mes très chers parents, **[BOUDJEMAA]** et **[HALIMA]**, en témoignage de mon profond amour, de mon immense respect et de ma reconnaissance pour tous les sacrifices qu'ils ont consentis afin de m'offrir les meilleures conditions de réussite. Leur soutien, leurs encouragements et leurs prières ont toujours été ma plus grande source de motivation.

À mes chers frères **ABDELMADJID, ZAKARYA ET YOUSSEF**, pour leur affection, leur soutien moral et leur présence à mes côtés tout au long de mon parcours.

À tous les membres de ma famille, pour leurs encouragements et leur confiance.

À mes chers amis, qui ont partagé avec moi les moments de joie et de difficulté, et qui m'ont toujours apporté leur soutien et leur motivation.

À toutes les personnes qui me sont chères et qui ont contribué, de près ou de loin, à mon parcours académique et à la réalisation de ce travail.

Je leur dédie ce mémoire avec toute ma gratitude et mon affection.

Résumé

Ce mémoire présente une étude numérique de la combustion à allumage par compression de charge homogène (HCCI) appliquée à l'iso-octane dans un moteur à combustion interne. L'objectif principal est d'analyser le comportement thermodynamique ainsi que la cinétique de combustion de ce mode de fonctionnement afin d'évaluer son potentiel en matière d'amélioration du rendement énergétique et de réduction des émissions polluantes.

L'étude a été réalisée à l'aide du logiciel ANSYS Fluent 6.3. Après une analyse bibliographique des technologies modernes de combustion et des principes fondamentaux du procédé HCCI, un modèle numérique a été développé en intégrant les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Le modèle de combustion Finite Rate a été retenu afin de représenter les phénomènes cinétiques responsables de l'auto-inflammation du mélange air-carburant.

Les simulations ont permis d'étudier l'évolution de la pression, de la température, de la vitesse d'écoulement ainsi que la formation des émissions de NO_x au cours du cycle moteur. Les résultats obtenus mettent en évidence une augmentation significative de la pression et de la température à proximité du point mort haut, traduisant le déclenchement de l'auto-inflammation. Ils confirment également l'intérêt du mode HCCI pour améliorer les performances énergétiques tout en réduisant les émissions polluantes.

Mots-clés : HCCI, Iso-octane, Combustion, CFD, ANSYS Fluent, Auto-inflammation, Finite Rate, Émissions de NO_x.

Abstract

This dissertation presents a numerical study of Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) combustion applied to iso-octane in an internal combustion engine. The main objective is to analyze the thermodynamic behavior and combustion kinetics of this combustion mode in order to assess its potential for improving energy efficiency and reducing pollutant emissions.

The study was carried out using ANSYS Fluent 6.3 software. Following a bibliographic review of modern combustion technologies and the fundamental principles of HCCI combustion, a numerical model was developed by incorporating the conservation equations of mass, momentum, and energy. The Finite Rate combustion model was adopted to account for the chemical kinetic phenomena responsible for the auto-ignition of the air-fuel mixture.

The simulations made it possible to investigate the evolution of pressure, temperature, flow velocity, and NO_x emissions throughout the engine cycle. The obtained results reveal a significant increase in pressure and temperature near the top dead center, indicating the onset of auto-ignition. They also confirm the potential of the HCCI combustion mode to improve energy performance while reducing pollutant emissions.

Keywords: HCCI, Iso-octane, Combustion, CFD, ANSYS Fluent, Auto-ignition, Finite Rate, NO_x Emissions.

الملخص

تقدم هذه المذكرة دراسة عديدة لاحتراق الشحنة المتجانسة بالإشعال الذاتي بالانضغاط باستعمال الإيزوأوكتان في محرك احتراق داخلي. يهدف هذا العمل إلى تحليل السلوك الديناميكي الحراري وحركية الاحتراق لهذا النمط من التشغيل من أجل تقييم قدرته على تحسين المردود الطاقوي والحد من الانبعاثات الملوثة.

أنجزت الدراسة باستخدام برنامج أنسيس فلونت 6.3، حيث تم تطوير نموذج عددي يعتمد على معادلات حفظ الكتلة وكمية الحركة والطاقة. كما تم اعتماد نموذج معدل التفاعل المحدود لتمثيل الظواهر الحركية الكيميائية المسؤولة عن الاشتعال الذاتي لمزيج الهواء والوقود.

أتاحت المحاكاة دراسة تطور الضغط ودرجة الحرارة وسرعة الجريان، بالإضافة إلى تكوّن انبعاثات أكاسيد النيتروجين خلال دورة المحرك. وقد أظهرت النتائج ارتفاعاً ملحوظاً في الضغط ودرجة الحرارة بالقرب من النقطة الميتة العليا، مما يدل على بداية الاشتعال الذاتي للمزيج. كما أكدت النتائج الإمكانات الواعدة لهذا النمط من الاحتراق في تحسين الأداء الطاقوي وتقليل الانبعاثات الملوثة.

الكلمات المفتاحية الاحتراق بالإشعال الذاتي بالانضغاط، الإيزوأوكتان، الاحتراق، ديناميكا الموائع الحسابية، أنسيس فلونت، الاشتعال الذاتي، معدل التفاعل المحدود، أكاسيد النيتروجين.

Table des matières

Liste des abréviations.....	
Liste des Symboles.....	
Symboles Grecs.....	
Liste des tableaux	
Liste des figures	
Introduction générale.....	1
Chapitre 1 : Généralités sur les technologies modernes de combustion	3
1.1 Introduction aux nouvelles stratégies de combustion	4
1.2 Concept de la combustion à basse température (LTC)	5
1.3 Présentation de la combustion HCCI	5
1.4 Avantages des technologies modernes de combustion	6
1.5 Limites et défis	6
1.6 Comparaison entre les modes de combustion modernes.....	7
1.7 Formation du mélange air-carburant.....	8
1.8 Phénomène d'auto-inflammation.....	8
1.9 Rendement thermique des moteurs modernes.....	9
1.10 Émissions polluantes et impact environnemental.....	10
1.11 Applications et perspectives	10
1.12 Mécanisme détaillé de la combustion HCCI	11
1.13 Paramètres influençant la combustion HCCI.....	11
1.14 Contrôle de la combustion HCCI.....	12
1.15 Diagramme pression – angle de vilebrequin	13
Conclusion du chapitre 1	13
CHAPITRE 2 : RECHERCHE BIBLIOGRAPHIQUE	14
Introduction	15
2.2 Le processus d'auto-inflammation et contrôle du timing de la combustion.....	16
2.3. Analyse cinétique de l'auto-inflammation par la méthode CSP	16
2.4. Amélioration des performances du moteur HCCI par l'utilisation du double	17
2.5. Impact de la structure moléculaire des biocarburants trèn le comportement de la combustion HCCI.....	19
2.6. Rôle de la recirculation des gaz d'échappement (EGR) et effets des hétérogénéités thermiques.....	20
2.7. Analyse des performances et des défis mécaniques de l'hydrogène pur en mode HCCI ...	21
2.8. Analyse comparative technico-économique de l'ajout d'hydrogène et d'oxygène dans les moteurs HCCI au gaz naturel	22
Conclusion du chapitre 2	23

CHAPITRE 3 : Modélisation de la combustion	24
3.1 Modélisation de la combustion	25
3.2 Équations de base	25
3.2.1 Équation de conservation de la masse	25
3.2.2 Équation de la quantité de mouvement	26
3.2.3 Conservation Équation de l'énergie.....	27
3.3 Modélisation de l'écoulement réactif turbulent	28
3.3.1 Modèle k- ϵ standard	29
3.3.2 Viscosité turbulente	29
3.4 Modélisation de la combustion	30
3.4.1 Modèle à taux fini	30
3.5 Choix du modèle de combustion pour la simulation HCCI	31
CHAPITRE 4 : Étude Numérique et Simulation du système HCCI	33
Introduction	34
4.1. Configuration et Validation du Maillage (Mode Statique)	34
4.2. Environnement de Simulation Numérique : ANSYS Fluent 6.3	36
4.2.1. Présentation Générale du Logiciel	36
4.2.2. Configuration détaillée des modèles et paramètres du solveur	36
4.2.2 Modélisation des Propriétés Thermophysiques (Polynômes de la NASA);	37
4.2.3 Importance pour le Modèle HCCI	39
4.3 Mécanisme réactionnel :	40
4.4 Analyse Thermochimique du Mélange et Paramètres de Contrôle	41
4.4.1 Définition des Fractions Massiques (Y_i).....	41
4.4.2 Dosage, Richesse et Régimes de Combustion	41
4.4.3 Taux de Recirculation des Gaz d'Échappement (EGR)	42
4.4.4 Procédure de calcul pour la simulation	43
4.5 Paramétrage des conditions initiales et analyse du mélange	43
4.6 Composition massique du mélange admission (Initialisation)	43
4.6.1 Fractions massiques initiales des espèces chimiques dans le domaine.....	43
4.7 Interprétation des résultats de l'initialisation	45
4.8 Conditions aux limites de pression et de température	45
4.9 Conditions thermiques aux parois du domaine	46
4.10 Conditions opératoires de la simulation	46
4.11 Validation dynamique du piston et étude de la compression d'air	47
Introduction	47
4.12 Objectif de la validation dynamique	47

4.13 Description du domaine physique	47
4.13.1 Génération du maillage dynamique	48
4.13.2 Configuration du maillage dynamique sous Fluent	49
4.13.3 Méthodes utilisées :	49
4.13.4 Coordonnées géométriques du cylindre	50
4.13.5 Vitesse de rotation et angle de vilebrequin	50
4.13.6 Conditions initiales et aux limites	50
4.13.7 Conditions aux limites	51
4.13.8 Paramètres du solveur	51
4.13.9 Mouvement du piston	51
4.13.10 Validation de la qualité du maillage dynamique	52
4.14 Évolution thermodynamique de l'air comprimé	52
4.15 Modélisation de la cinématique du piston (Dynamic Mesh)	53
4.15.1 Paramètres de mise à jour du maillage (Mesh Update Methods)	53
4.15.2 Configuration géométrique du moteur (In-Cylinder)	54
4.15.3 Définition des zones dynamiques (Dynamic Mesh Zones)	54
4.15.5 Propriétés thermophysiques des gaz	54
4.16 Paramétrage Temporel et Discrétisation du Temps	55
4.16.1 Calcul du Pas de Temps (Time Step Size)	55
4.16.2 Mon travail :	55
4.16.3 Détermination du Nombre de Pas de Temps (Number of Time Steps)	56
4.16.4 Variation et control (Adaptative Time Stepping)	56
4.16.5 Synthèse des Paramètres Introduits (Tableau Récapitulatif)	57
4.17 Simulation de la combustion du iso-octane avec maillage dynamique	57
Introduction	57
4.18 Description du domaine physique	57
4.18.1 Maillage dynamique	58
4.18.2 Configuration du solveur	58
4.18.3 Modélisation thermodynamique	58
4.19 Injection du carburant	59
4.20 Modèle de combustion Finite Rate	61
4.21 Réactions chimiques	61
4.22 Conditions initiales et aux limites	64
4.22.1 Conditions initiales	64
4.22.2 Conditions aux limites	64
4.22.3 Paramètres temporels	64

4.23 Facteurs de sous-relaxation	64
4.23.1 Définition et Fonctionnement	64
4.23.2 Utilité et Avantages	65
Chapitre 5 : Résultats et interprétation.....	67
5.1 Étude statique de la compression et analyse thermodynamique.....	68
Introduction	68
5.1.1 Analyse des contours de pression	68
5.1.2 Analyse des contours de température	70
5.1.3 Analyse combinée pression-température	72
5.1.4 Validation et comparaison avec la littérature	72
5.1.5 Conclusion	73
5.2 Étude du maillage dynamique sans combustion.....	73
Introduction	73
5.2.1 Analyse du déplacement dynamique du piston	74
5.2.2 Analyse des contours de pression	75
5.2.3 Analyse des contours de température	78
5.2.3 Évolution de la densité en fonction du crank angle	81
5.2.4 Influence du maillage dynamique sur la stabilité numérique	83
Conclusion	83
5.3 Étude réactive avec injection du iso-octane et combustion dynamique.....	83
Introduction	83
5.3.1 Analyse de la pression durant la combustion	84
5.3.2 Analyse de la température durant la combustion	86
5.3.3 Analyse de la vitesse durant la combustion	88
5.3.4 Analyse globale de la combustion	90
5.3.5 Évaluation et quantification des émissions de Nox	91
Conclusion	92
Conclusion Générale	93
Bibliography	95

Liste des abréviations

Abréviation	Signification
ANSYS	Analysis System
BDC	Bottom Dead Center (Point Mort Bas)
BMEP	Brake Mean Effective Pressure
CA	Crank Angle (Angle du Vilebrequin)
CAD	Computer Aided Design (Conception Assistée par Ordinateur)
CFD	Computational Fluid Dynamics (Mécanique des Fluides Numérique)
CFD-ACE	Computational Fluid Dynamics – Advanced Combustion Environment
CFL	Courant–Friedrichs–Lewy (Condition de Courant)
CPU	Central Processing Unit
DNS	Direct Numerical Simulation
DPM	Discrete Phase Model
EDM	Eddy Dissipation Model

Abréviation	Signification
EGR	Exhaust Gas Recirculation (Recirculation des Gaz d'Échappement)
EOC	End Of Combustion
EOI	End Of Injection
FSI	Fluid Structure Interaction
FVM	Finite Volume Method (Méthode des Volumes Finis)
GUI	Graphical User Interface (Interface Graphique)
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition
F	Fuel(carburant)
IC / ICE	Internal Combustion Engine (Moteur à Combustion Interne)
IMEP	Indicated Mean Effective Pressure
LES	Large Eddy Simulation
PDF	Probability Density Function

Abréviation	Signification
PISO	Pressure Implicit with Splitting of Operators
PMB	Point Mort Bas
PMH	Point Mort Haut
RAM	Random Access Memory
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
RNG	Renormalization Group
RPM	Revolutions Per Minute (Tours par Minute)
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations
SOC	Start Of Combustion
SOI	Start Of Injection
TDC	Top Dead Center (Point Mort Haut)
TKE	Turbulent Kinetic Energy

Abréviation	Signification
UDF	User Defined Function
UHC	Unburned Hydrocarbons (Hydrocarbures Imbrûlés)

Liste des Symboles

Symbole	Désignation	Unité (SI)
P	Pression absolue	Pa ou bar
u, v, w	Composantes de la vitesse	m/s
t	Temps	s
V	Volume du cylindre	m^3 ou cm^3
m	Masse	kg
k	Énergie cinétique turbulente	m^2/s^2
S	Terme source (Masse, Quantité de mouvement, Énergie)	Dépend de l'équation
h	Enthalpie spécifique	J/kg
Dp	Diamètre des gouttelettes de carburant (DPM)	m\$ ou \$μm
Cp	Capacité thermique massique à pression constante	J/(kg · K)
R	Constante universelle des gaz parfaits	J/(mol · K)
Yi	Fraction de masse de l'espèce chimique i	-

Symboles Grecs

Symbole	Désignation	Unité (SI)
ρ	Masse volumique (Densité)	kg/m^3
θ	Angle du vilebrequin (Crank angle)	$^{\circ}CA$
ϵ	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente	m^2/s^3
ω	Taux de dissipation spécifique (Modèle $k-\omega$)	$1/s$
μ	Viscosité dynamique	$Pa \cdot s$ ou $kg/(m \cdot s)$
μ_t	Viscosité turbulente	$Pa \cdot s$
λ	Conductivité thermique	$W/(m \cdot K)$
ϕ	Richesse du mélange (Equivalence ratio)	—
τ	Contrainte de cisaillement / Délai d'inflammation	Pa ou s

Liste des tableaux

Tableau 1 Configuration des modèles physiques pour la simulation de la combustion HCCI.....	39
Tableau 2 Configuration des modèles physiques pour la simulation de la combustion HCCI.....	39
Tableau 3 Paramètres cinétiques et stœchiométriques de la réaction de combustion	40
Tableau 4 Composition massique du mélange initial (Mass Fractions)	44
Tableau 5 Spécifications géométriques et paramètres de fonctionnement du moteur étudié.....	49
Tableau 6 Conditions thermiques imposées aux parois de la chambre de combustion.....	51
Tableau 7 Valeurs initiales introduites pour le démarrage de la simulation (Solution Initialization).....	51
Tableau 8 Configuration générale du solveur sous ANSYS Fluent.....	51
Tableau 9 Description fonctionnelle des méthodes de gestion du maillage en mouvement	53
Tableau 10 Paramètres de contrôle du maillage dynamique (Smoothing et Layering).....	53
Tableau 11 Définition et rôle des paramètres cinématiques dans le module In-Cylinder.....	54
Tableau 12 Points d'interpolation de la capacité thermique (Cp) selon le modèle Piecewise-linear.	55
Tableau 13 Paramètres du pas de temps et critères de convergence	56
Tableau 14 Spécifications géométriques et paramètres cinématiques du moteur.....	57
Tableau 15 Synthèse des paramètres généraux du solveur et modèles physiques.	58
Tableau 16 Paramètres de configuration des injecteurs (Modèle DPM)	60
Tableau 17 Points d'interpolation de la capacité thermique (Cp) pour les différentes espèces chimiques.....	62
Tableau 18 Cinétique de la réaction et fractions massiques initiales	63
Tableau 19 Synthèse des conditions initiales de la simulation.	64
Tableau 20 Récapitulatif des conditions aux limites (Boundary Conditions).	64
Tableau 21 Paramètres de discrétisation temporelle pour le calcul instationnaire.	64
Tableau 22 Factors de sous-relaxation.....	66
Tableau 23 Synthèse comparative des travaux antérieurs sur l'optimisation des performances et des émissions des moteurs HCCI.	72

Liste des figures

Figure 1 : Évolution des technologies de combustion dans les moteurs à combustion interne. (réalisation personnelle).....	4
Figure 2 : Schéma du principe de la combustion à basse température (LTC) et réduction des émissions. (Musculus, 2013).....	5
Figure 3 : Principe de fonctionnement de la combustion HCCI avec mélange homogène et auto-inflammation. (Kalghatgi G. T., 2005).....	6
Figure 4 : Illustration des contraintes de contrôle dans les moteurs HCCI. (Heywood, 1988).....	7
Figure 5: Comparaison entre les modes de combustion (Essence, Diesel et HCCI). (Heywood, 1988).....	8
Figure 6: Processus d'auto-inflammation du mélange air-carburant dans le mode (Glassman, 2014).....	9
Figure 7 : Variation du rendement thermique selon le type de combustion. (Reitz, Directions in internal combustion engine research., 2013).....	10
Figure 8 : Formation des émissions polluantes (NO_x, CO, HC) dans les moteurs thermiques. (Turns, An Introduction to Combustion: Concepts and Applications (3rd ed.). McGraw-Hill., 2012).	10
Figure 9 : Applications des technologies modernes de combustion dans l'industrie automobile. (Agarwal A. K., 2017).....	11
Figure 10 : Influence des paramètres (température, pression, EGR) sur la combustion HCCI. (Christensen M. &, 2000)	12
Figure 11: Techniques de contrôle de la combustion HCCI (EGR, VVT, température d'admission). (Johansson, HCCI combustion review, 2002)	12
Figure 12: Variation de la pression en fonction de l'angle de vilebrequin (Heywood, 1988)	13
Figure 13 : Influence de la température initiale d'admission <i>T_{init}</i> sur l'évolution de la pression (Sjöberg & Dec, J. E, 2007)	15
Figure 14: Comparaison des modes de combustion entre les moteurs à allumage commandé (Dec J. E., Advanced compression-ignition engines, 2009).....	15
Figure 15 : Caractérisation des phases de combustion HCCI : Évolution de la pression et du taux de dégagement de chaleur (HRR) en fonction de l'angle vilebrequin. (Heywood, 1988).....	16
Figure 16: Effet de la vitesse de rotation du moteur (RPM) sur le taux de dégagement de chaleur (Rate of Heat Release) en mode HCCI. (Sjöberg & Dec, J. E, Combined effects of fuel type and engine speed on intake temperature requirements and high-load limits for HCCI engines, 2003)).....	17
Figure 17: Représentation schématique de l'installation expérimentale et du système d'acquisition de données pour un moteur à double carburant (Dual Fuel). (Latusek, Kettner, M, & Volk, W, 2019).....	18
Figure 18 : Schéma détaillé d'un banc d'essai moteur Diesel/Biodiesel enrichi à l'hydrogène avec système d'acquisition et d'analyse des gaz. (Saravanan & Nagarajan, G, 2008).....	18
Figure 19 : Schéma de principe d'un moteur HCCI monocylindre équipé d'un système de préchauffage d'air et d'une ligne de recirculation des gaz d'échappement (EGR). (Sjöberg & Dec, J. E, Combined effects of fuel type and engine speed on intake temperature requirements and high-load limits for HCCI engines, 2003)	19
Figure 20 : Schéma des filières de production des biocarburants de première génération (Biodiesel et Bioéthanol). (Agarwal A. K., 2007).....	20
Figure 21 : Architecture d'un système de recirculation des gaz d'échappement à haute pression (HP-EGR) avec refroidissement et suralimentation. (Zheng & Hawley, J. G, 2004)	21
Figure 22 : Caractéristiques de performance, de combustion et d'émissions polluantes d'un moteur HCCI en fonction de la richesse du mélange (Law, 2006).....	22

Figure 23 : Évolution des émissions de HC en fonction du débit du gaz HHO pour différentes vitesses de rotation à une charge constante (MAP = 45 kPa). (Yılmaz, Gümüş, M, & Atılması, S, 2010).....	23
Figure 24 Représentation du maillage structuré de la géométrie 2D de la chambre de combustion généré sous GAMBIT.....	35
Figure 25: Évolution du maillage dynamique de la chambre de combustion à différents angles du vilebrequin. Maillage au Point Mort Haut (PMH) - Volume minimal.....	48
Figure 26: Évolution du maillage dynamique de la chambre de combustion à différents angles du vilebrequin. Maillage au Point Mort Bas (PMB) - Volume maximal.....	48
Figure 27 : Contour de pression dans la chambre de combustion	68
Figure 28: Évolution de la pression en fonction de position	69
Figure 29: Contour de température dans la chambre de combustion	70
Figure 30 : Évolution de la température en fonction de position	71
Figure 31: Déformation du maillage durant le déplacement du piston.....	75
Figure 32: Contours de pression dans le cylindre sans combustion.....	76
Figure 33: Évolution de la pression en fonction du crank angle	77
Figure 34: Contours de température dans le cylindre sans combustion	79
Figure 35: Évolution de la température en crank angle.....	80
Figure 36: Variation de la densité en fonction du crank angle	82
Figure 37: Contours de pression durant la combustion du iso-octane	85
Figure 38 : Variation de la pression en fonction du crank angle.....	85
Figure 39: Contours de température durant la combustion.....	87
Figure 40: Variation de la température en fonction du crank angle.....	87
Figure 41: Contour de vitesse durant la combustion	89
Figure 42: Variation de la vitesse en fonction du crank angle.....	89
Figure 43 Variation de emission NOx en fonction du crank angle.....	91

Introduction générale

Les moteurs à combustion interne jouent aujourd'hui un rôle crucial dans la vie de tous les jours. On retrouve principalement les moteurs à combustion interne dans le secteur des transports, mais ils sont également utilisés dans diverses applications industrielles. Les avancées technologiques ont largement favorisé l'évolution de l'utilisation des moteurs à combustion interne au fil du temps. L'évolution technologique a favorisé l'amélioration des performances et de la fiabilité des moteurs à combustion interne.

Les moteurs traditionnels ont une forte consommation de combustibles fossiles. Cette consommation engendre une forte dépendance énergétique. Les moteurs traditionnels produisent des émissions nuisibles, y compris les oxydes d'azote (NOx), le monoxyde de carbone (CO) et les hydrocarbures non brûlés (HC). Les émissions de polluants ont un impact négatif sur l'environnement et la santé humaine.

À mon sens, il faut chercher des solutions pour réduire ces effets tout en gardant de bonnes performances énergétiques. Dans cette optique, on a développé de nouvelles stratégies de combustion. Parmi ces stratégies, la combustion HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) se présente comme une solution intéressante.

Le principe de la combustion HCCI consiste à préparer un mélange homogène d'air et de carburant qui s'enflamme quand le piston comprime le mélange, sans recourir à une bougie d'allumage. La combustion HCCI réunit les points forts des moteurs à essence et des moteurs diesel. La combustion HCCI offre un meilleur rendement et réduit les émissions polluantes.

Malgré ses avantages, la technologie HCCI a encore des difficultés, surtout pour contrôler la combustion et garantir la stabilité du fonctionnement. C'est pourquoi elle fait encore l'objet de nombreuses recherches.

Ce travail de fin d'études se insère dans ce cadre et cherche à étudier le comportement de la combustion HCCI grâce à la modélisation et à la simulation. Le but est de comprendre le fonctionnement de la combustion HCCI et d'évaluer les performances de la combustion HCCI.

Ce mémoire est organisé en plusieurs chapitres. Le premier chapitre présente des généralités sur les moteurs à combustion interne ainsi que le principe de la combustion HCCI. Les chapitres suivants seront consacrés à la méthodologie adoptée, aux résultats obtenus et à leur analyse.

Chapitre 1 : Généralités sur les technologies modernes de combustion

1.1 Introduction aux nouvelles stratégies de combustion

Depuis quelques années, l'augmentation des coûts des énergies fossiles couplée à la pression environnementale incitent les experts en moteurs thermiques à revoir radicalement les techniques de combustion actuelles. Le contexte a évolué : de nos jours, l'innovation n'est plus une simple option, mais un impératif face à des normes de plus en plus sévères. Les méthodes récentes visent en fait deux objectifs : améliorer l'efficacité tout en diminuant les émissions nuisibles, telles que les oxydes d'azote ou les particules. Assurément, des approches telles que la combustion HCCI ou les modes à basse température se démarquent. Elles offrent un contrôle plus précis du mélange et du moment de l'auto-allumage. Une avancée notable. (Dec J. E., Advanced compression-ignition engines, 2009) (Reitz, low-emission internal combustion engine combustion strategies., 2020) (Saxena & Bedoya , I.D , 2013)

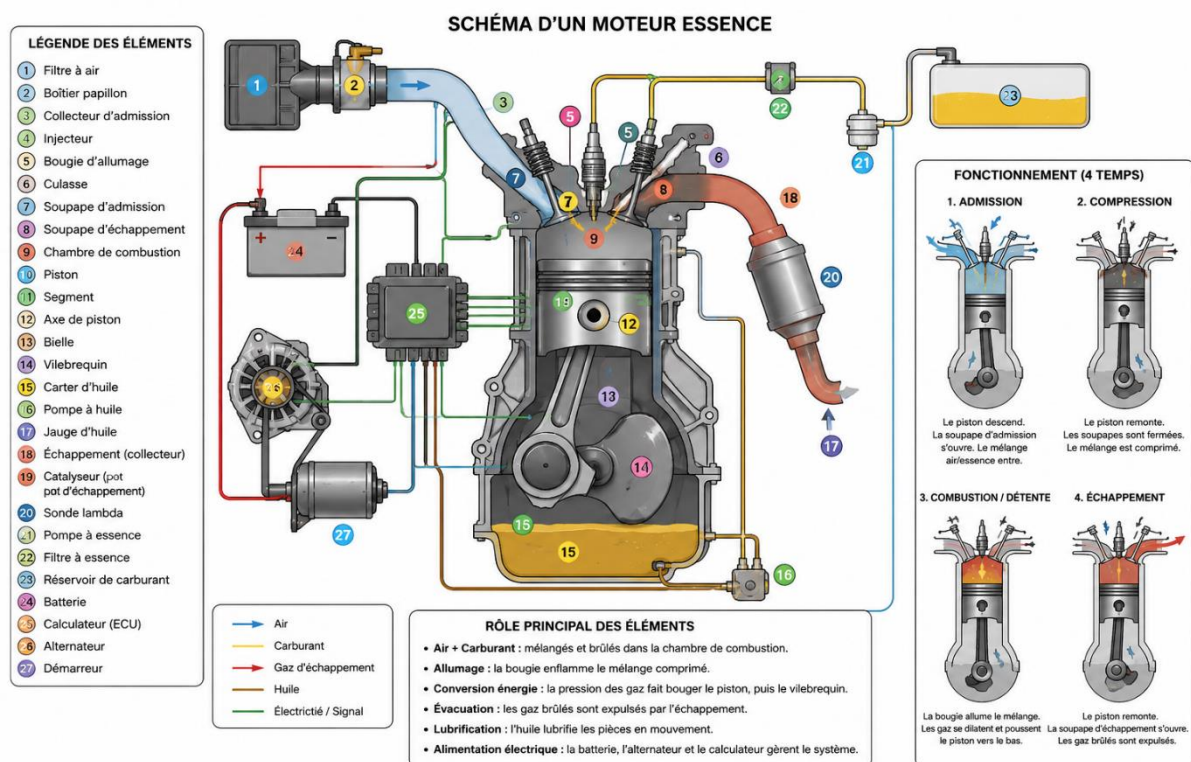


Figure 1 : Évolution des technologies de combustion dans les moteurs à combustion interne.

1.2 Concept de la combustion à basse température (LTC)

Dans les moteurs modernes, une approche de plus en plus courante repose sur une combustion à température réduite, connue sous le nom de **LTC (Low Temperature Combustion)**. Cette stratégie se distingue des méthodes conventionnelles par un contrôle plus efficace de l'intensité thermique du processus de combustion.

Maîtriser l'élévation de la chaleur permet de réduire considérablement la production d'oxydes d'azote (NO_x) et de particules fines. Pour atteindre cet objectif, on procède généralement à une forte dilution du mélange air-carburant, souvent par l'introduction de gaz d'échappement recyclés (EGR). Cette dilution entraîne une modification de la gestion du cycle thermodynamique, en abaissant la température de flamme en dessous du seuil de formation thermique des NO_x (environ 1800 K).

Néanmoins, la LTC se présente comme une option robuste pour diminuer l'empreinte écologique des moteurs à combustion interne, tout en conservant un rendement thermique satisfaisant.. (Musculus, 2013) (Turns, An Introduction to Combustion: Concepts and Applications (3rd ed.). McGraw-Hill., 2012)

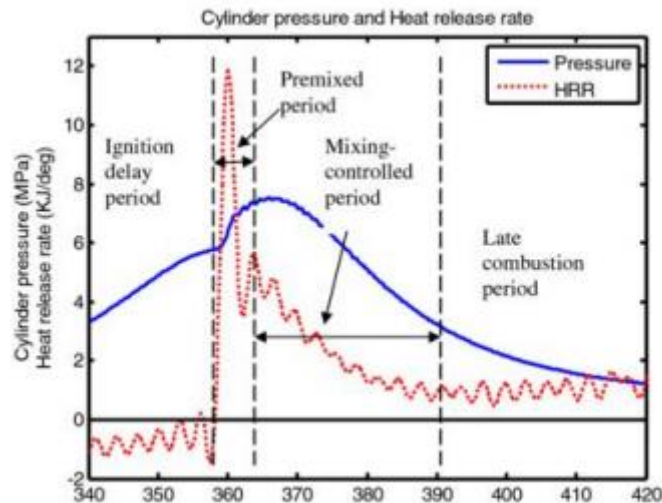


Figure 2 : Schéma du principe de la combustion à basse température (LTC) et réduction des émissions. (Musculus, 2013)

1.3 Présentation de la combustion HCCI

La combustion **HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition)** est l'un des modes les plus représentatifs de la LTC. Son principe repose sur la préparation d'un mélange homogène d'air et de carburant qui s'auto-enflamme sous l'effet de la compression du piston, sans recours à une bougie d'allumage ni à une injection directe pilotée.

Chapitre 1 : Généralités sur les technologies modernes de combustion

Contrairement aux moteurs diesel où la combustion est hétérogène et localisée, et aux moteurs à allumage commandé où elle est initiée par une étincelle, le HCCI exploite la cinétique chimique du mélange pour déclencher la réaction de manière simultanée dans tout le volume de la chambre. Cette caractéristique lui confère un rendement thermique élevé, comparable à celui du diesel, tout en produisant très peu de NOx et de particules.

Cependant, l'absence de contrôle direct de l'allumage rend ce mode de combustion difficile à maîtriser, en particulier sur une large plage de charge et de régime. Le timing de l'auto-inflammation dépend fortement de la température d'admission, de la pression, de la composition du mélange et du taux d'EGR, ce qui en fait un sujet de recherche encore très actif. (Onishi & Shoda., 1979) (Heywood, 1988)

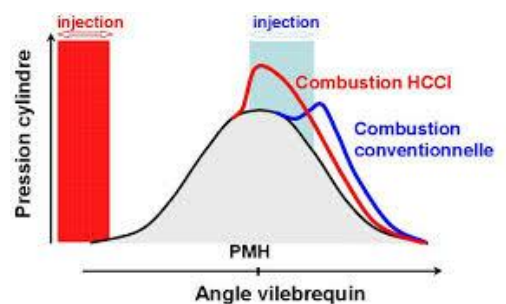


Figure 3 : Principe de fonctionnement de la combustion HCCI avec mélange homogène et auto-inflammation. (Kalghatgi G. T., 2005)

1.4 Avantages des technologies modernes de combustion

Les technologies de combustion modernes offrent de nombreux bénéfices que les solutions traditionnelles précédemment mentionnées ne peuvent proposer. Ces techniques permettent d'améliorer l'efficacité énergétique exploitée à partir de l'énergie présente dans le combustible. Ces technologies offrent aussi la possibilité de diminuer les émissions polluantes telles que les oxydes d'azote et les particules fines, conformes aux normes environnementales actuelles. Elles offrent aussi de nouvelles opportunités d'intégration par hybridation et de broyage de nouveaux genres de combustibles. (Reitz, Directions in internal combustion engine research., 2013) (Kalghatgi G. , 2014)

1.5 Limites et défis

Bien que les technologies de combustion avancées offrent de nombreux bénéfices, leur utilisation pratique reste cependant très restreinte. Dans le mode HCCI, la maîtrise du processus de combustion laisse souvent à désirer. Pour l'auto-inflammation, il est nécessaire de respecter

certaines conditions de température et de pression, ce qui rend son optimisation complexe. De plus, sa plage de fonctionnement limitée pose des problèmes dans certaines situations d'utilisation. Il faut également apporter des modifications aux aspects sensibles du démarrage à froid et de la stabilité de la combustion. (Dec J. E., Challenges of HCCI engines, 2014) (Johansson, HCCI combustion review, 2002)

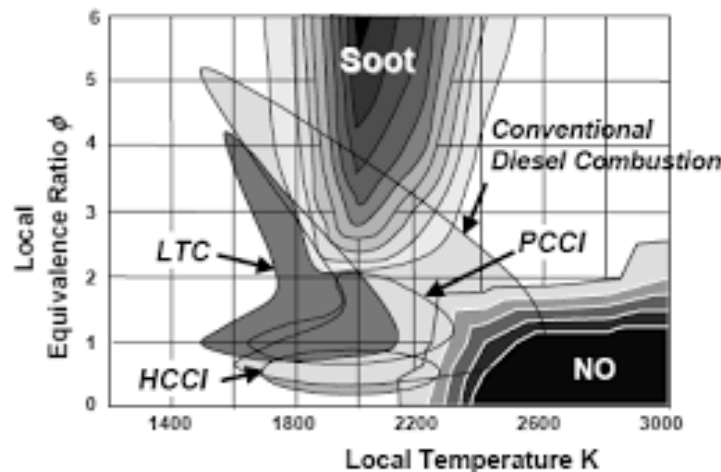


Figure 4 : Illustration des contraintes de contrôle dans les moteurs HCCI. (Heywood, 1988)

1.6 Comparaison entre les modes de combustion modernes

Dans le domaine de la combustion, il est courant de différencier les divers modes d'allumage en fonction du type d'allumage, du type de mélange et de l'efficacité des méthodes. Ainsi, la combustion HCCI est considérée comme un mode de mélange homogène avec auto-inflammation, tandis que le diesel est classé dans le mode d'injection en régime transitoire avec allumage localisé. Le moteur à allumage commandé, pour sa part, utilise une bougie qui offre un excellent contrôle, bien que cela puisse entraîner une augmentation des émissions dans certaines circonstances. Il est à noter que chaque technologie présente des atouts et des points faibles, et qu'il est approprié, dans un cadre idéal, d'explorer des compromis entre les trois aspects : les émissions, la performance et le contrôle. (Heywood, 1988) (Dec, Reitz R.D., Saxena , & Bedoya I.D , 2009)

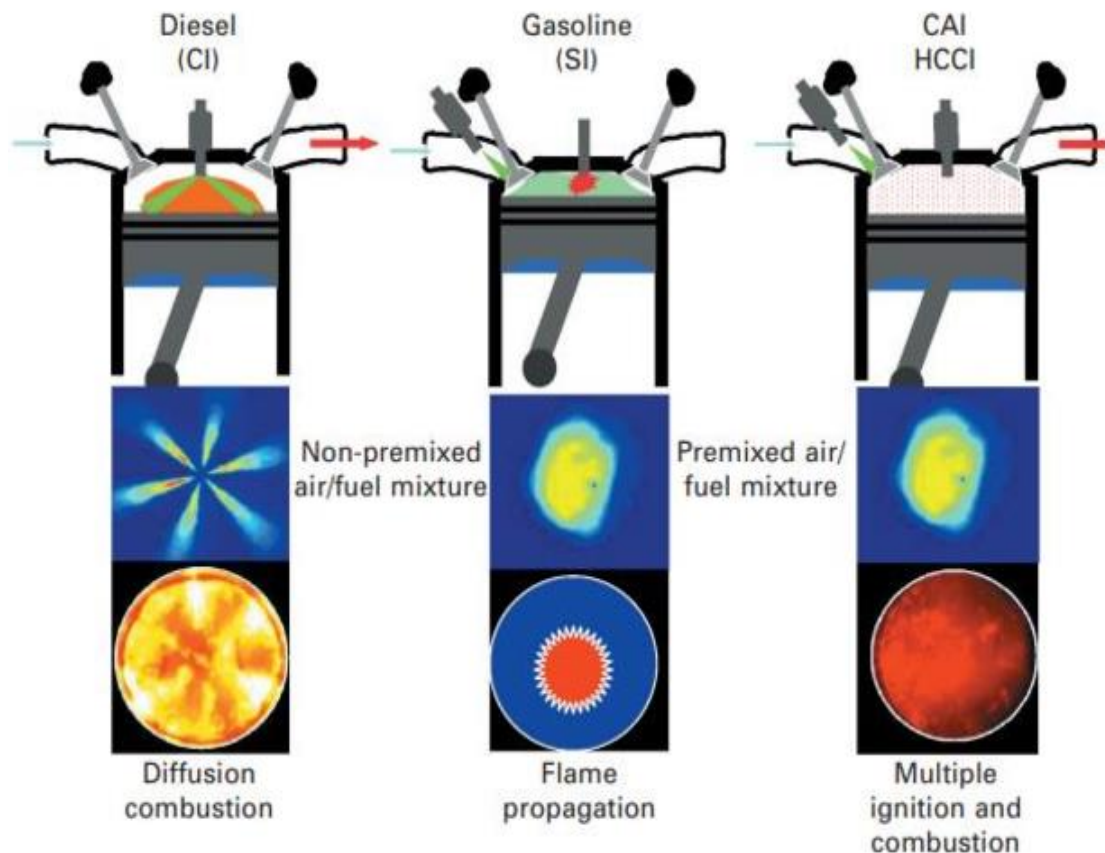


Figure 5: Comparaison entre les modes de combustion (Essence, Diesel et HCCI).
(Heywood, 1988)

1.7 Formation du mélange air-carburant

L'un des nombreux facteurs affectant le fonctionnement optimal des moteurs contemporains est la qualité du mélange air-carburant. Pour obtenir une combustion uniforme dans le HCCI, il est impératif d'optimiser autant que possible l'homogénéité du mélange. Cela peut être réalisé par une injection anticipée ou en utilisant des carburants de qualité. Un mélange mal préparé peut entraîner une combustion incomplète, ce qui nuit aux performances et augmente les émissions. L'ajustement du rapport air-carburant influence aussi l'initiation de l'auto-inflammation. (Turns, *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications* (3rd ed.). McGraw-Hill., 2012) (Kalghatgi G. T., 2005) (Maurya & Agarwal, 2011)

1.8 Phénomène d'auto-inflammation

Le concept essentiel des moteurs HCCI se base sur l'auto-inflammation, qui est l'initiation spontanée de la combustion du mélange par compression. Plusieurs facteurs comme la

température, la pression et la composition du mélange influencent cette auto-inflammation. Lorsque réunies, les réactions chimiques se déclenchent rapidement et génèrent de l'énergie. Néanmoins, l'apprentissage de cette technique demeure ardu, car contrôler le moment de l'auto-inflammation reste complexe. (Dec J. E., Challenges of HCCI engines, 2014) (Glassman, 2014)

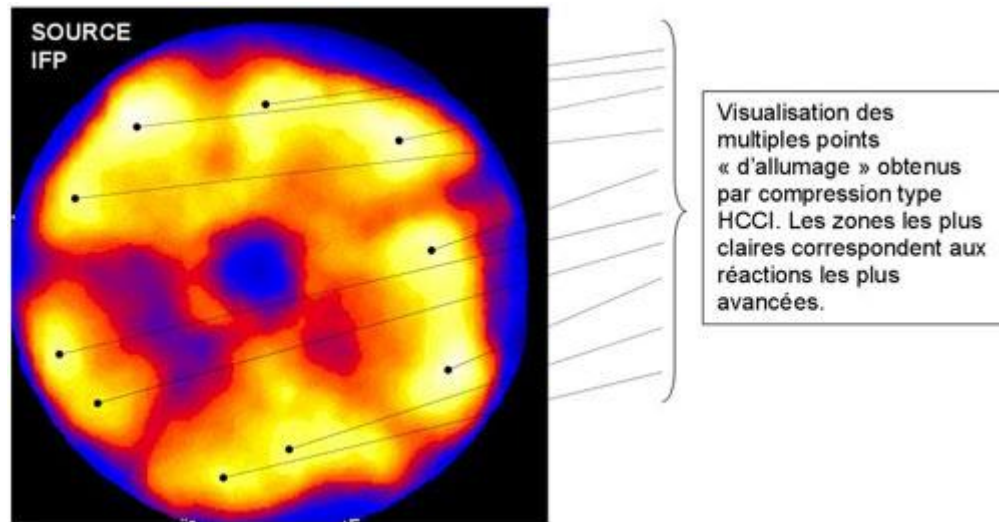


Figure 6: Processus d'auto-inflammation du mélange air-carburant dans le mode
(Glassman, 2014)

1.9 Rendement thermique des moteurs modernes

La possibilité d'évaluer l'efficacité du moteur, à savoir sa capacité à convertir l'énergie du carburant en énergie utile, peut être caractérisée par le rendement thermique. Le mode HCCI, technologie moderne, peut être caractérisé par des rendements plus élevés, en particulier grâce à une combustion plus rapide et plus homogène dans la chambre, ce qui peut limiter les pertes d'énergie. Cependant, cette conception du moteur ne peut assurer cela dans tous les modes de fonctionnement. (Heywood, J.B., 1988) (Reitz, R.D., 2013)

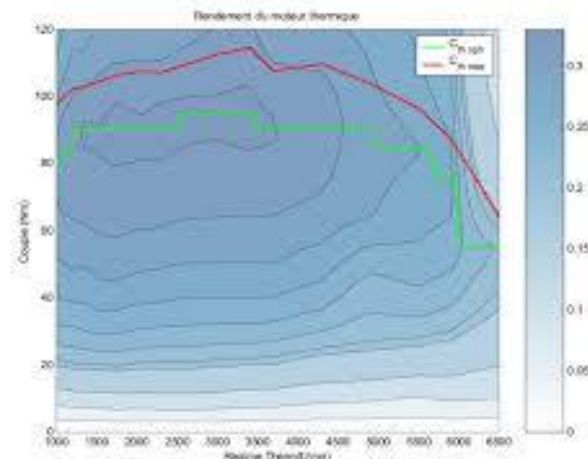


Figure 7 : Variation du rendement thermique selon le type de combustion. (Reitz, *Directions in internal combustion engine research.*, 2013)

1.10 Émissions polluantes et impact environnemental

Les moteurs à combustion constituent une source importante de pollution atmosphérique. Les gaz principaux dérivés de ce processus comprennent les oxydes d'azote, qui incluent l'oxyde d'azote et le monoxyde de carbone, ainsi que les hydrocarbures non brûlés. Les stratégies modernes de combustion visent à diminuer une partie de ces émissions, grâce à une combustion à température réduite et une meilleure uniformité de l'innocuité du mélange. Cependant, certaines émissions peuvent subsister en cas d'absence de combustion complète. (Turns, *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications* (3rd ed.). McGraw-Hill., 2012) (Kalghatgi G. , 2014)

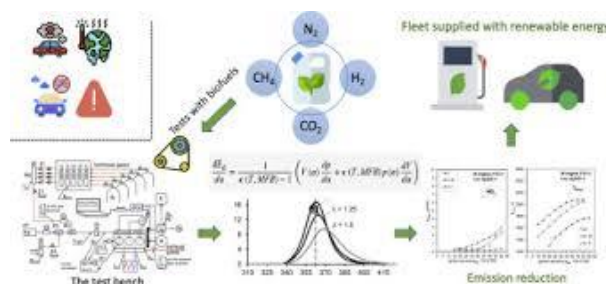


Figure 8 : Formation des émissions polluantes (NO_x, CO, HC) dans les moteurs thermiques. (Turns, *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications* (3rd ed.). McGraw-Hill., 2012)

1.11 Applications et perspectives

L'étude des technologies de combustion avancées se déroule dans divers secteurs, dont l'automobile, avec une attention particulière portée au mode de combustion HCCI en raison de

son potentiel pour améliorer l'efficacité énergétique et réduire les émissions. À l'avenir, ces dernières pourraient être incorporées dans des systèmes mixtes ou exploiter des combustibles alternatifs pour s'attaquer aux défis énergétiques et écologiques. (Onorati, 2020) (Agarwal A. K., 2017)



Figure 9 : Applications des technologies modernes de combustion dans l'industrie automobile. (Agarwal A. K., 2017)

1.12 Mécanisme détaillé de la combustion HCCI

Le processus de combustion HCCI s'appuie sur un mécanisme complexe qui comporte plusieurs phases. Dans un premier temps, des réactions à froid se déroulent, menant à la création de radicaux chimiques. Puis, avec l'élévation de la température et de la pression, une phase de réactions rapides démarre, entraînant l'auto-inflammation du mélange à travers toute la chambre. Cette méthode favorise une combustion rapide tout en compliquant le contrôle du processus. (Dec J. E., Advanced compression-ignition engines, 2009) (Glassman, 2014)

1.13 Paramètres influençant la combustion HCCI

Plusieurs facteurs influencent le comportement de la combustion HCCI. Le moment de l'auto-inflammation est directement affecté par la température et la pression initiales. L'emploi du recyclage des gaz d'échappement fait baisser la température de combustion en modifiant ces conditions. En outre, le type de combustible a une incidence significative sur la réactivité du mélange.

Il est indispensable de bien comprendre ces paramètres pour garantir une opération stable. (Christensen M. &., 2000) (Stanglmaier, 1999)

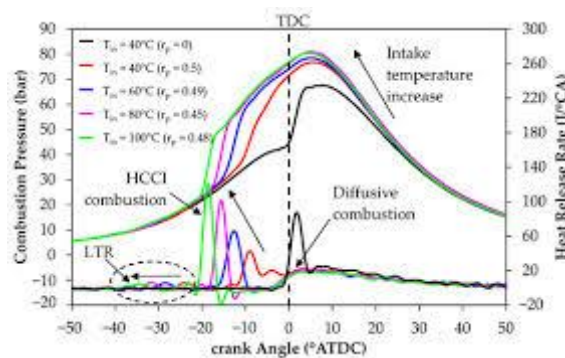


Figure 10 : Influence des paramètres (température, pression, EGR) sur la combustion HCCI. (Christensen M. &, 2000)

1.14 Contrôle de la combustion HCCI

Le contrôle de la combustion HCCI demeure un enjeu technique de taille. Sans un système d'allumage direct, il faut intervenir sur les réglages du moteur pour modifier le timing de l'auto-inflammation.

On peut mentionner, parmi les méthodes employées, le changement du taux de compression, la gestion de la température d'entrée ou encore l'usage du système EGR.

Ces méthodes contribuent à une amélioration partielle du contrôle, cependant des études supplémentaires sont indispensables pour perfectionner ce mode d'opération. (Johansson, HCCI combustion review, 2002) (Dec J. E., Challenges of HCCI engines, 2014) (Najt & Foster,, 1983)

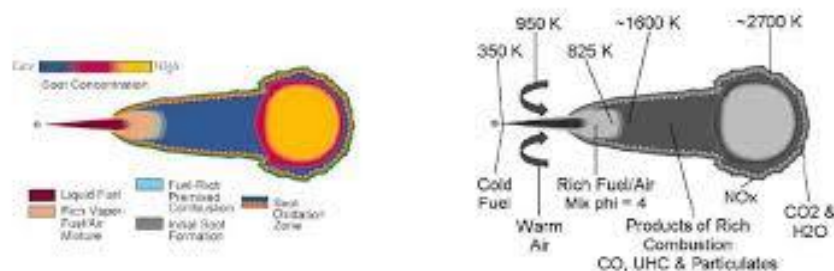


Figure 11: Techniques de contrôle de la combustion HCCI (EGR, VVT, température d'admission). (Johansson, HCCI combustion review, 2002)

1.15 Diagramme pression – angle de vilebrequin

L'analyse de la pression en rapport avec l'angle du vilebrequin est essentielle pour évaluer le développement de la combustion. Pour le HCCI, la progression rapide de la pression indique généralement une combustion intense. Cet aspect contribue à l'amélioration de la performance, mais il peut également entraîner des contraintes mécaniques significatives. L'examen des courbes est naturellement crucial dans les travaux de simulation. (Heywood, 1988) (Reitz, Directions in internal combustion engine research., 2013) (Eng, 2002)

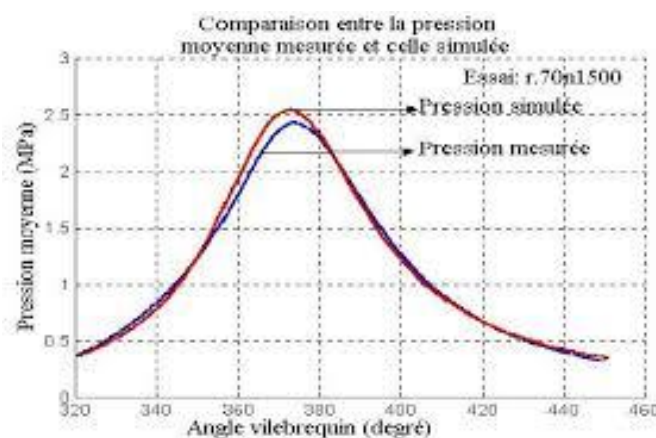


Figure 12: Variation de la pression en fonction de l'angle de vilebrequin (Heywood, 1988)

Conclusion du chapitre 1

Dans ce chapitre, nous avons exposé les traits caractéristiques des technologies de combustion actuelles, en mettant l'accent sur le mode HCCI qui offre l'avantage de rehausser l'efficacité énergétique tout en diminuant les rejets polluants. Néanmoins, en dépit de ses perspectives encourageantes, le mécanisme de la combustion HCCI reste l'objet d'un vaste éventail de recherches visant à surmonter les nombreux défis actuels liés au contrôle et à la stabilité. Le prochain chapitre se concentrera sur la modélisation et la simulation de la combustion HCCI pour une meilleure précision dans l'analyse de son comportement.

CHAPITRE 2 : RECHERCHE BIBLIOGRAPHIQUE

Introduction

La technologie HCCI ou Homogène Charge Compression Ignition est une alternative révolutionnaire aux moteurs à essence et Diesel. C'est l'allumage par compression d'un mélange homogène basé sur l'autodéclenchement de combustion. Elle utilise un degré de chaleur de la flamme relativement bas, bloquant la formation de NOx par la température dans la source. En termes de propreté, ces moteurs montrent une haute efficacité thermique, aidant non seulement à répondre aux normes environnementales actuelles mais également à réduire l'empreinte carbone. (Komninos & Rakopoulos,, 2012) (Christensen, Johansson, B, & Amnéus, P., 1998) (Sjöberg & Dec, J. E, 2007)

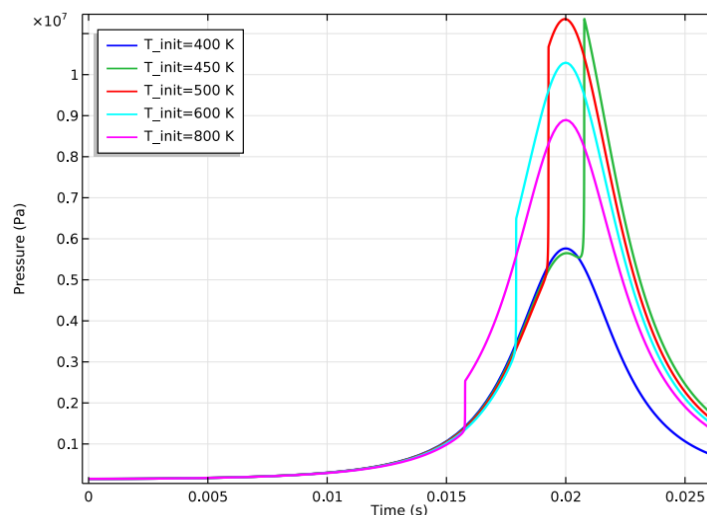


Figure 13 : Influence de la température initiale d'admission (T_{init}) sur l'évolution de la pression (Sjöberg & Dec, J. E, 2007)

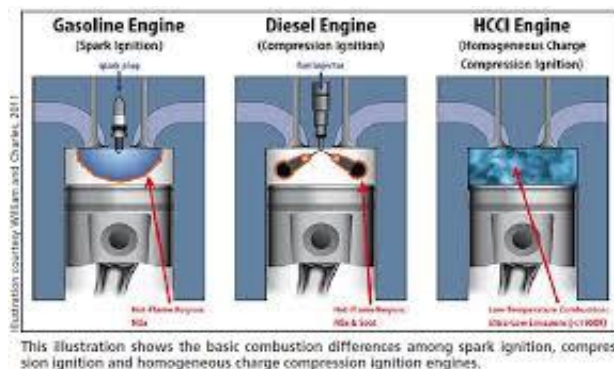


Figure 14: Comparaison des modes de combustion entre les moteurs à allumage commandé (Dec J. E., Advanced compression-ignition engines, 2009)

2.2 Le processus d'auto-inflammation et contrôle du timing de la combustion

Le timing de la combustion est donc déterminé par des réactions chimiques complexes qui se produisent au cours de la phase de compression pendant des délais d'auto-inflammation. Étant donné que le mélange n'est pas allumé par une étincelle contrôlée comme dans les moteurs à essence standard, cette période d'auto-inflammation doit être bien comprise pour éviter tout cliquetis - lors de la combustion trop rapide - ou tout raté - lorsque le mélange ne s'allume pas du tout, garantissant un moteur en marche régulière sur tout le domaine de fonctionnement. (Tanaka, Ayala, F, Keck, J. C, & Heywood, J. B, 2003) (Sjöberg & Dec, J. E, An investigation into lowest power limits for hydrocarbon fueled HCCI engines, 2005)

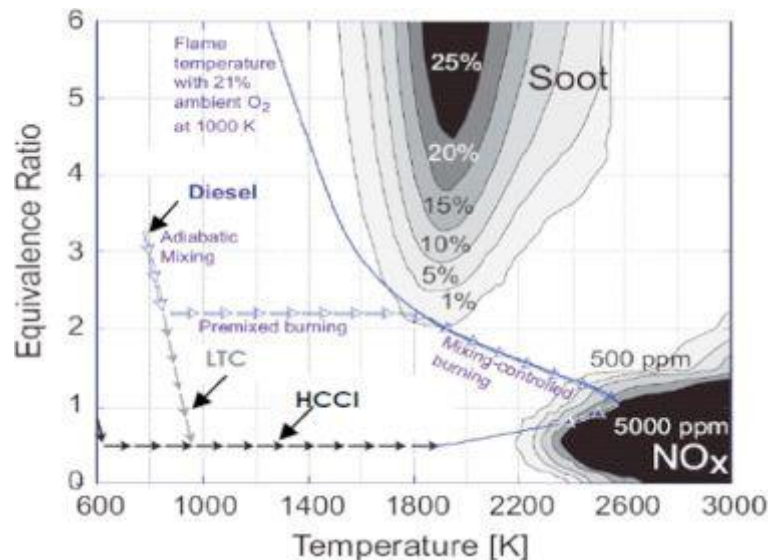


Figure 15 : Caractérisation des phases de combustion HCCI : Évolution de la pression et du taux de dégagement de chaleur (HRR) en fonction de l'angle vilebrequin. (Heywood, 1988)

2.3. Analyse cinétique de l'auto-inflammation par la méthode CSP

En utilisant la méthode mathématique CSP (Computational Singular Perturbation), on peut analyser les étapes de l'auto-inflammation en repérant les réactions principales. Cette analyse divise la combustion en trois phases : une phase à basse température (LTC) où les premières réactions se produisent, une phase de transition, et une phase à haute température (HTC) où l'énergie est diffusée fortement. Avec le CSP, on peut trouver les éléments chimiques qui lancent la réaction, ce qui aide à créer des modèles numériques plus simples et plus rapides. (Persson, Hultqvist, Johansson, & Remón, 2007) (Kevrekidis, Lam, C. K, & Lam, S. H, 1985)

(Dec J. E., A conceptual model of HCCI combustion based on laser-sheet imaging and chemical kinetics, 2002)

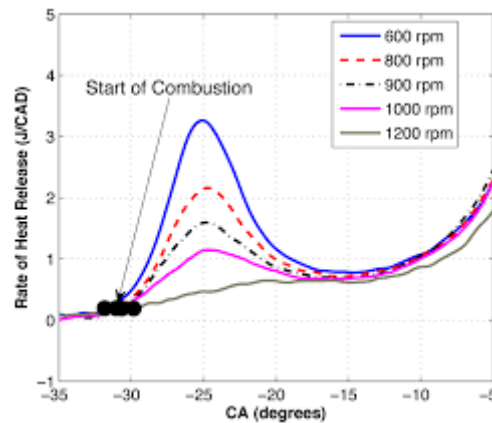


Figure 16: Effet de la vitesse de rotation du moteur (RPM) sur le taux de dégagement de chaleur (Rate of Heat Release) en mode HCCI. (Sjöberg & Dec, J. E, Combined effects of fuel type and engine speed on intake temperature requirements and high-load limits for HCCI engines, 2003))

2.4. Amélioration des performances du moteur HCCI par l'utilisation du double

Combiner hydrogène et gaz naturel dans les moteurs Diesel HCCI est une bonne façon de gérer les problèmes de ce type de combustion, comme le contrôle de l'allumage et les limites de charge. L'hydrogène, qui brûle vite et réagit bien, aide à stabiliser la combustion et réduit le monoxyde de carbone (CO) et les hydrocarbures (HC) dans les zones froides. Le gaz naturel, avec son indice d'octane élevé, retarde l'inflammation et évite le cliquetis à forte charge, ce qui rend le moteur plus flexible. Ensemble, ces deux gaz permettent de réduire presque à zéro les émissions de NOx et d'améliorer le rendement du moteur en ajustant la réactivité selon les conditions. (Hairuddin, Yusaf, T, & Wandel, A. P, 2014) (Shudo & Suzuki, H, 2002) (Reitz & Duraisamy, G., Review of high efficiency dual-fuel reactivity controlled compression ignition (RCCI) combustion in internal combustion engines., 2015) (Reitz & Duraisamy, G., Review of high efficiency dual-fuel reactivity controlled compression ignition (RCCI) combustion in internal combustion engines., 2015)

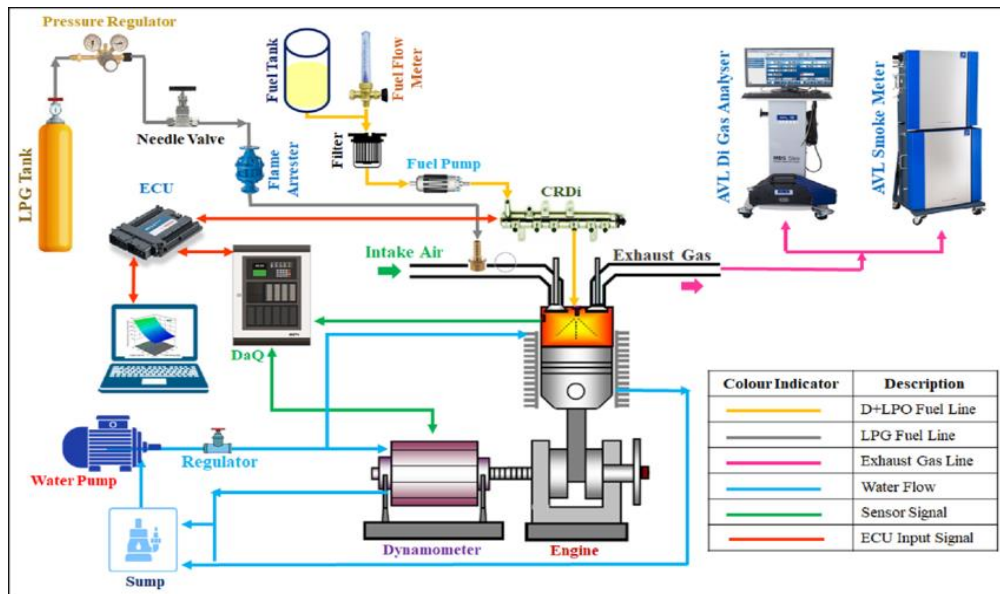


Figure 17: Représentation schématique de l'installation expérimentale et du système d'acquisition de données pour un moteur à double carburant (Dual Fuel). (Latusek, Kettner, M, & Volk, W, 2019)

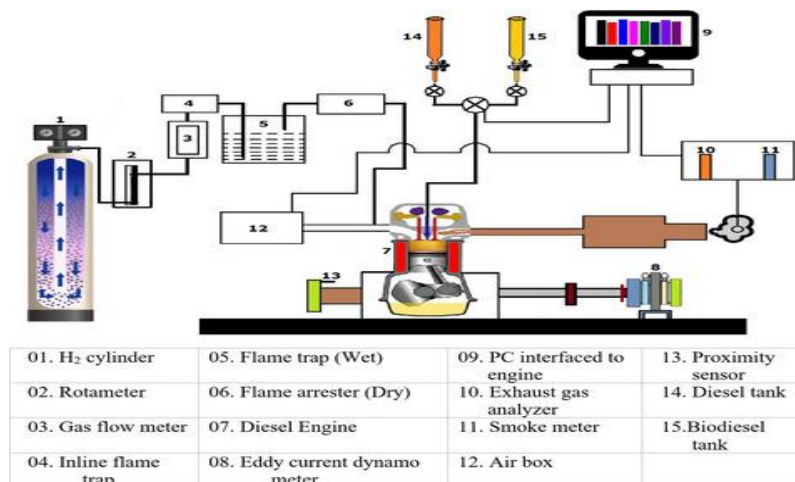


Figure 18 : Schéma détaillé d'un banc d'essai moteur Diesel/Biodiesel enrichi à l'hydrogène avec système d'acquisition et d'analyse des gaz. (Saravanan & Nagarajan, G, 2008)

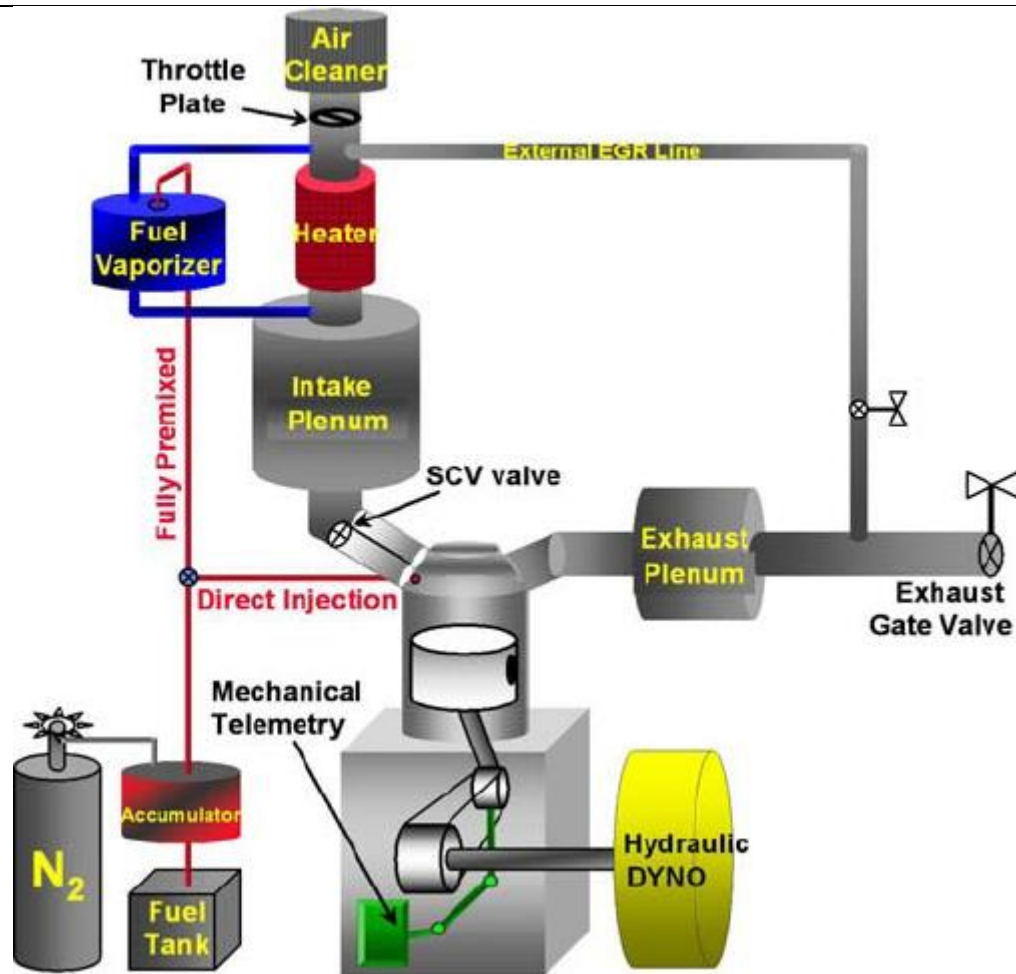


Figure 19 : Schéma de principe d'un moteur HCCI monocylindre équipé d'un système de préchauffage d'air et d'une ligne de recirculation des gaz d'échappement (EGR). (Sjöberg & Dec, J. E, Combined effects of fuel type and engine speed on intake temperature requirements and high-load limits for HCCI engines, 2003)

2.5. Impact de la structure moléculaire des biocarburants trèn le comportement de la combustion HCCI

Les biocarburants, comme l'éthanol ou le biodiesel, représentent une voie vers la réduction des émissions de carbone étant donné leur origine renouvelable. Néanmoins, leur structure moléculaire a une incidence importante sur la façon dont ils brûlent. Par exemple, certains carburants avec des chaînes carbonées particulières ont tendance à s'enflammer en deux temps. Les simulations numériques indiquent que le temps nécessaire pour que le carburant s'enflamme dépend de la proportion de carburant par rapport à l'oxygène, alors que la vitesse à laquelle il brûle est liée à son indice d'octane. Il est donc nécessaire d'ajuster les paramètres

CHAPITRE 2 : RECHERCHE BIBLIOGRAPHIQUE

d'injection pour améliorer l'utilisation de ces carburants écologiques dans les systèmes HCCI. (Komminos & Rakopoulos,, 2012) (Agarwal A. K., 2007) (Law, 2006)

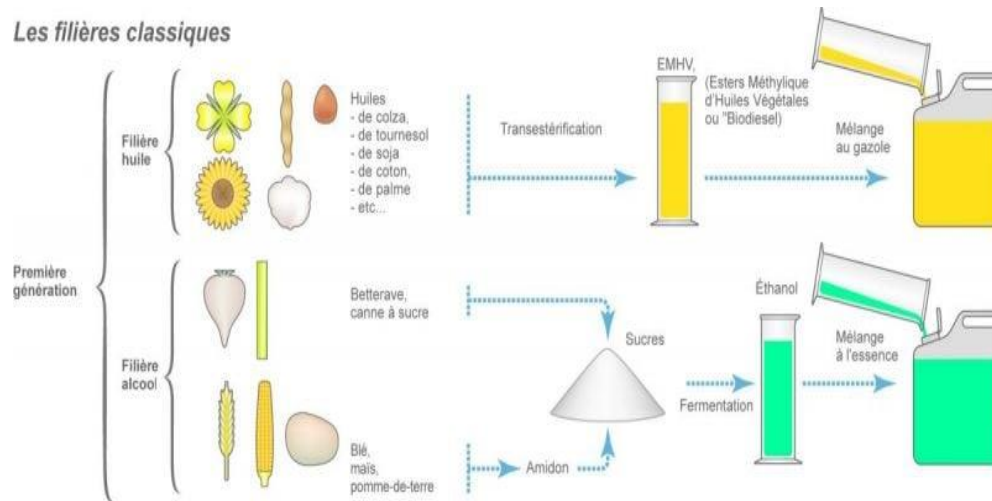


Figure 20 : Schéma des filières de production des biocarburants de première génération (Biodiesel et Bioéthanol). (Agarwal A. K., 2007)

2.6. Rôle de la recirculation des gaz d'échappement (EGR) et effets des hétérogénéités thermiques

Pour contrôler la combustion et minimiser les fortes variations de pression, on se sert fréquemment de la recirculation des gaz d'échappement (EGR). L'EGR sert à diluer le mélange et à augmenter sa capacité à retenir la chaleur, ce qui modère la vitesse de la réaction chimique. Les études montrent aussi que les différences de température sont importantes : les zones froides près des parois du cylindre causent souvent l'émission d'hydrocarbures non brûlés (HC) et de monoxyde de carbone (CO). Il est donc crucial de bien gérer la température à l'entrée et la façon dont les gaz sont répartis pour que la combustion soit complète et propre. (Liu, Yao, M., & Zhang, B, 2011) (Zheng & Hawley, J. G, 2004) (Dec J. E., Advanced compression-ignition engines, 2009)

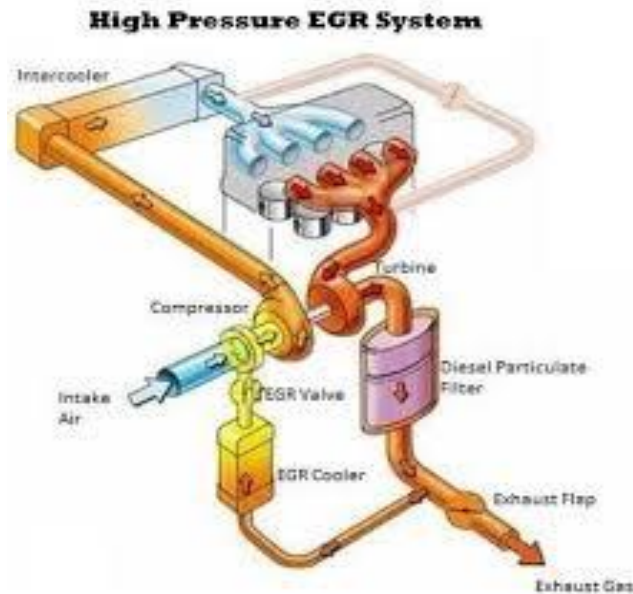


Figure 21 : Architecture d'un système de recirculation des gaz d'échappement à haute pression (HP-EGR) avec refroidissement et suralimentation. (Zheng & Hawley, J. G, 2004)

2.7. Analyse des performances et des défis mécaniques de l'hydrogène pur en mode HCCI

L'examen des performances des moteurs HCCI alimentés à l'hydrogène révèle son fort potentiel pour une combustion sans carbone et une efficacité thermodynamique améliorée. L'étude montre que l'hydrogène, grâce à sa grande diffusivité et à sa vitesse de flamme rapide, permet de fonctionner avec des mélanges très pauvres, ce qui diminue les pertes par pompage et réduit les transferts de chaleur aux parois. Son usage pur en mode HCCI rend le contrôle de l'auto-inflammation plus compliqué. Sa forte réactivité chimique peut accélérer la combustion, ce qui risque d'augmenter brutalement la pression et de provoquer des cliquetis lorsque la charge augmente. Les résultats suggèrent que, pour stabiliser le fonctionnement, il est nécessaire d'agir sur la stratification de la température ou d'utiliser des taux élevés de recirculation des gaz d'échappement (EGR) pour modérer la cinétique chimique. En conclusion, cet article met en avant que, bien que l'hydrogène soit un carburant idéal pour supprimer les émissions de CO₂ et de HC, son application en mode HCCI demande une stratégie de contrôle stricte pour assurer la sécurité mécanique du moteur tout en conservant ses avantages écologiques. (Law, 2006) (Antunes & Mikalsen, R., 2008) (Shudo & Suzuki, H, 2002)

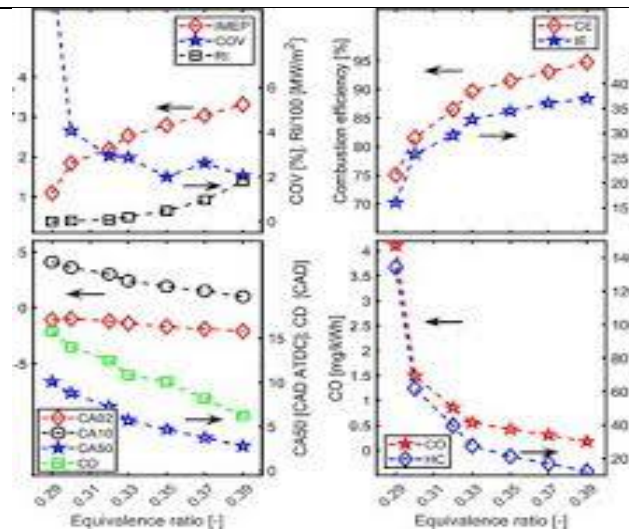


Figure 22 : Caractéristiques de performance, de combustion et d'émissions polluantes d'un moteur HCCI en fonction de la richesse du mélange (Law, 2006)

2.8. Analyse comparative technico-économique de l'ajout d'hydrogène et d'oxygène dans les moteurs HCCI au gaz naturel

Une analyse comparative chiffrée de l'ajout d'hydrogène, d'oxygène, ou des deux, dans un moteur HCCI alimenté au gaz naturel montre des différences importantes en termes de performance thermique, cinétique, et de coût. L'étude montre que l'ajout d'hydrogène (H_2) est le moyen le plus efficace pour avancer le moment de l'allumage et augmenter la vitesse à laquelle la chaleur est produite, ce qui est important pour le gaz naturel qui réagit lentement. L'ajout d'oxygène (O_2), lui, améliore la stabilité de la combustion et permet d'utiliser des mélanges plus pauvres, ce qui réduit les émissions d'hydrocarbures non brûlés. L'utilisation des deux ($H_2 + O_2$) offre le meilleur compromis technique pour ajuster le temps nécessaire à l'auto-inflammation, mais l'analyse des coûts indique que l'hydrogène reste le composant le plus cher à utiliser. Les résultats montrent que l'ajout d'oxygène est souvent une solution plus rentable pour améliorer le rendement thermique, alors que l'hydrogène reste essentiel pour bien contrôler le moment de la combustion, ce qui nécessite un choix entre performance maximale et coût d'utilisation réduit. (Zheng & Hawley, J. G, 2004) (Reitz & Duraisamy, G., Review of high efficiency dual-fuel reactivity controlled compression ignition (RCCI) combustion in internal combustion engines., 2015) (Moradi, Mirsalim, M, & Ghareghani, A, 2020)

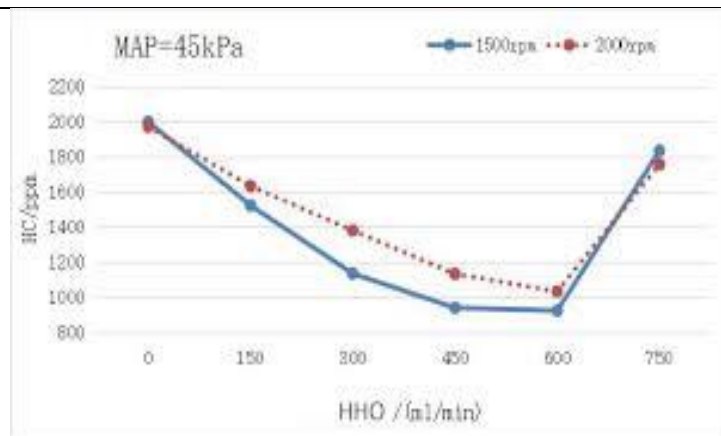


Figure 23 : Évolution des émissions de HC en fonction du débit du gaz HHO pour différentes vitesses de rotation à une charge constante (MAP = 45 kPa). (Yılmaz, Gümüüş, M, & Atılması, S, 2010)

Conclusion du chapitre 2

En résumé, cette étude a mis en lumière les problèmes clés liés à l'amélioration de la combustion, en se concentrant surtout sur la technologie HCCI (allumage par compression de charge homogène) comme solution importante pour les futurs moteurs thermiques. L'examen détaillé des mécanismes physiques et chimiques a montré que, même si le mode HCCI permet une forte baisse des émissions de NO_x et de particules fines tout en assurant une meilleure efficacité thermique, son succès dépend absolument de la maîtrise de l'auto-inflammation. Nous avons donc insisté sur le fait que ce processus, sans pilotage physique direct, est régi par une cinétique chimique compliquée dont les régimes d'allumage (LTC et HTC) peuvent être compris grâce à des outils d'analyse pointus comme la méthode CSP (perturbation singulière computationnelle). L'étude a aussi montré l'importance de la flexibilité énergétique : l'emploi de biocarburants, associé à l'apport utile de l'hydrogène pour encourager la réactivité et du gaz naturel pour éviter le cliquetis, donne des chances concrètes d'augmenter la plage de fonctionnement de ces moteurs. Finalement, l'ajout de ces sources d'énergie, couplé à des méthodes de gestion thermique comme la recirculation des gaz d'échappement (EGR), est une excellente façon de concevoir des systèmes de propulsion durables. Ce projet confirme que l'association entre la simulation numérique cinétique et l'innovation sur les mélanges de carburants est essentielle pour atteindre les buts de décarbonation et les normes environnementales les plus strictes de l'industrie auto actuelle.

CHAPITRE 3 : Modélisation de la combustion

3.1 Modélisation de la combustion

L'étude des écoulements réactifs s'appuie sur la résolution des équations de transfert, complétées par des hypothèses de fermeture appropriées basées sur l'approximation du milieu continu. Cette condition est formellement satisfaite lorsque le nombre de Knudsen — traduisant le rapport entre le libre parcours moyen moléculaire et l'échelle physique caractéristique de l'écoulement — demeure infinitésimal, ce qui permet de négliger les fluctuations discrètes à l'échelle atomique pour conférer au fluide des propriétés spatialement homogènes. Dans le cadre d'un mélange gazeux composé de N constituants chimiques, l'assimilation de chaque espèce à un continuum physique autorise l'application directe des principes de la thermodynamique et de la mécanique pour définir des variables d'état globales, sans qu'il soit nécessaire de caractériser la cinétique individuelle des molécules. En dynamique des fluides, ce couplage structure le système des équations de Navier-Stokes (conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie), dont la modélisation réactive s'articule d'abord par l'établissement des équations instantanées en régime laminaire, puis par un traitement statistique visant à restituer le comportement de la turbulence. L'introduction de ces opérateurs de moyenne génère des corrélations fluctuantes additionnelles dont la résolution, particulièrement pour les fluides compressibles ou réactifs, requiert l'adjonction de la décomposition de Favre (moyennage pondéré par la masse) associée à un modèle de fermeture au premier ordre à deux équations de transport, régissant l'évolution conjointe de l'énergie cinétique turbulente et de son taux de dissipation.. (Poinsot & Veynante, D, 2012)

3.2 Équations de base

3.2.1 Équation de conservation de la masse

La conservation de la masse totale s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0 \quad (3.1)$$

Ici, ρ désigne la masse volumique du mélange et u_j représente la $j^{\text{ème}}$ composante du vecteur vitesse. Pour un système gazeux composé de N espèces chimiques, la loi de conservation de la masse est appliquée de façon similaire à chaque constituant k . Ainsi, la sommation de ces N

CHAPITRE 3 : Modélisation de la combustion

équations de transport d'espèces permet de retrouver directement l'équation globale de conservation de la masse totale.:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_j}(-J_{jk}^s) + \rho \omega_k \quad (3.2)$$

Dans cette formulation, J_{jk}^s désigne le flux de diffusion de l'espèce k suivant la direction j au sein du mélange, tandis que ω_k spécifie le taux de génération ou de consommation chimique de cette même espèce k. Par ailleurs, ce phénomène de diffusion moléculaire est modélisé conformément à la loi de Fick sous la forme :

$$J_{jk}^s = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho D_k Y_k) \quad (3.3)$$

Ici, D_k représente le coefficient de diffusion de l'espèce k au sein du mélange. Cette formulation repose sur l'hypothèse sous-jacente que la diffusion thermique induite par les gradients de température (l'effet Soret) est négligeable. Enfin, les termes sources chimiques ω_k , qui régissent la production ou la destruction instantanée de chaque espèce, sont directement déterminés par le modèle de combustion sélectionné.

3.2.2 Équation de la quantité de mouvement

L'équation de bilan de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij} - p \delta_{ij}) + \rho S_i \quad (3.4)$$

Dans cette expression, p représente la pression statique, τ_{ij} désigne la composante spatiale du tenseur des contraintes visqueuses et S_i spécifie le terme source des forces volumiques agissant selon la direction i (telles que la gravité ou les forces électromagnétiques), ces dernières étant négligées dans le cadre de ce travail. Par ailleurs, le tenseur des contraintes visqueuses se formule ainsi :

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij} \right) \quad (3.5)$$

Avec

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)$$

Ici, μ désigne la viscosité dynamique, S_{ij} représente le tenseur des taux de déformation, δ_{ij} est le symbole de Kronecker et l'indice l est un indice muet de sommation. Dans cette étude, les milieux fluides sont traités comme des fluides newtoniens, caractérisés par une relation linéaire et isotrope entre le tenseur des contraintes visqueuses et celui des vitesses de déformation. De plus, les coefficients de proportionnalité de cette loi linéaire dépendent exclusivement de la température T .

3.2.3 Conservation Équation de l'énergie

Le bilan de l'énergie totale du mélange est défini par :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_t) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j e_t) = \frac{\partial}{\partial x_j}(-J_j^{e_t} + \sigma_{ij} u_j) + \rho S^{e_t} \quad (3.6)$$

$$e_t = h_t - p/\rho$$

Avec

$$h_t = \int_{T_0}^T C_p dT + \sum_{k=1}^n \Delta h_{f,k}^0 Y_k + 1/2 u_i u_i$$

où $J_j^{e_t}$ est le flux d'énergie totale dans la direction j , σ_{ij} est la composante i,j du tenseur défini par :

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij}$$

et S^{e_t} est le terme source d'énergie totale (travail des forces volumiques, rayonnement, ...), qui seront négligés. Le flux d'énergie totale dans la direction j s'écrit :

$$J_j^{e_t} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N \Delta h_k D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad (3.7)$$

CHAPITRE 3 : Modélisation de la combustion

Dans cette formulation, les transferts thermiques par conduction (régis par la loi de Fourier) et la diffusion massique des espèces sont pris en compte, tandis que les effets du rayonnement ainsi que la diffusion thermique induite par les gradients de concentration (l'effet Dufour) sont négligés. Le terme λ représente la conductivité thermique globale du mélange. Ainsi, le système aérothermochimique est décrit par un ensemble de $N + 4$ équations différentielles, où le vecteur des inconnues est constitué des variables conservatives $\rho Y_1, \dots, \rho Y_N, \rho u, \rho e_t$. Pour fermer ce système mathématique, il est nécessaire d'adjoindre une équation d'état reliant la pression aux autres variables thermodynamiques, sous la forme $p = f(\rho, T)$.

3.3 Modélisation de l'écoulement réactif turbulent

Le comportement dynamique au sein d'un foyer de combustion s'inscrit généralement dans un régime turbulent, caractérisé par des fluctuations spatio-temporelles continues de la vitesse, de la pression et de la température. Ce mouvement macroscopique engendre une structure tourbillonnaire multi-échelle, où les entités de grande taille extraient l'énergie de l'écoulement moyen pour la transférer progressivement vers les structures plus fines, responsables de la dissipation visqueuse. Ce mécanisme de transfert inter-échelle correspond à la cascade d'énergie de Kolmogorov, dont l'intensité est gouvernée par le nombre de Reynolds, traduisant le rapport entre les forces inertielles et visqueuses.

En raison de la non-linéarité des équations de Navier-Stokes, leur résolution analytique est irréalisable pour ces configurations, imposant le recours à la modélisation numérique. L'approche statistique RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) est ici retenue pour son coût computationnel avantageux ; elle repose sur la décomposition des variables d'état en une contribution moyenne et une composante fluctuante. Ce formalisme introduit néanmoins le tenseur des contraintes de Reynolds, dont la fermeture mathématique est indispensable pour restituer l'influence de la turbulence sur l'écoulement global.

Cependant, la présence de fronts de flamme et de fortes variations thermiques génère d'importants gradients de masse volumique, limitant l'usage du moyennage de Reynolds classique. Pour surmonter cette restriction, la décomposition de Favre est introduite. Ce procédé de pondération par la masse volumique permet de conserver la structure formelle des équations de transport en fluide compressible, garantissant ainsi une modélisation rigoureuse des

CHAPITRE 3 : Modélisation de la combustion

interactions thermomécaniques caractéristiques des flammes turbulentes. (Pope, 2000) (Poinso & Veynante, D, 2012)

3.3.1 Modèle k-ε standard

Ce formalisme est largement reconnu pour sa robustesse, son coût computationnel réduit et sa grande stabilité lors de la résolution d'écoulements complexes. Les équations de transport régissant l'évolution de l'énergie cinétique turbulente k et de son taux de dissipation ϵ se formulent de la manière suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \epsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (G_k + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k} + S_\epsilon \quad (3.9)$$

Où G_b est le terme lié à l'effet de la gravité, qui est négligé dans ce travail, G_k représente la génération de l'énergie cinétique turbulente due aux gradients de la vitesse moyenne eq (3.12) :

$$G_k = \mu_t S^2 \quad (3.10)$$

$$S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \quad (3.11)$$

3.3.2 Viscosité turbulente

S'écrit :

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (3.12)$$

Les valeurs des constantes du modèle (k, ϵ) standard, $C_{1\epsilon}$, $C_{2\epsilon}$, C_μ , σ_k et σ_ϵ sont gardées par défaut :

$$C_{1\epsilon} = 1,44, \quad C_{2\epsilon} = 1,92, \quad C_\mu = 0,09, \quad \sigma_k = 1,0, \quad \text{et} \quad \sigma_\epsilon = 1,3$$

3.4 Modélisation de la combustion

Dans le contexte des écoulements réactifs, le modèle de combustion doit être capable de déterminer la composition chimique moyenne du mélange en tout point du domaine, ainsi que le terme source d'énergie associé aux transferts thermiques (libération ou absorption de chaleur) issus des réactions exo- ou endothermiques. La méthodologie employée repose sur la résolution d'une équation de transport pour la fraction massique de chaque constituant intégré au mécanisme cinétique retenu, une approche communément appelée modèle de taux fini généralisé (Magnussen).

Au sein de l'équation de conservation de l'espèce i , le terme de production ou de consommation nette traduit l'évolution de ce constituant sous l'effet de l'activité chimique. Concernant le transport massique, le flux de diffusion laminaire est couplé au gradient de fraction massique via le coefficient de diffusion moléculaire $D_{i,m}$ de l'espèce dans le milieu. En régime turbulent, un coefficient de diffusion quadratique additionnel est introduit pour modéliser le flux diffusif moyen. Cette contribution turbulente est évaluée par le ratio entre la viscosité turbulente et le nombre de Schmidt turbulent, soit μ_t/Sc_t .

Enfin, la cinétique chimique globale présente une dépendance fortement non linéaire vis-à-vis de la température et des concentrations locales. De ce fait, l'évaluation directe du terme source moyen à partir des seules grandeurs moyennes de température et de fraction massique s'avère insuffisante et induit des écarts de calcul significatifs. (Versteeg & W. Malalasekera, 2007) (Turns, An introduction to combustion: concepts and applications, 2012)

3.4.1 Modèle à taux fini

Le terme de production chimique ω_k dans un écoulement à M réactions et N espèces chimiques : Réactions $j=1, \dots, M$

$$\sum_{j=1}^M v'_{kj} \mathcal{M}_k = \sum_{j=1}^M v''_{kj} \mathcal{M}_k \quad (3.13)$$

$\mathcal{M}_k$ Symbole de l'espèce chimique (H₂O, CH₄, CO₂ ...)

$$v_{kj} = v'_{kj} - v''_{kj}$$

Masse de l'espèce :

$$\sum_1^N v_{kj}^i M_k = \sum_1^N v_{kj}^{i'} M_k \Rightarrow \sum_1^N v_{kj} = 0 \quad (3.14)$$

M_k masse molaire

$$\dot{\omega}_k = \sum_1^N \dot{\omega}_{kj}$$

$$\dot{\omega}_{kj} = Q_j M_k v_{kj}$$

Q_j est le taux d'avancement de la réaction en mol/s

$$Q_j = K_{fj} \prod (n_k)^{v'_{kj}} - K_{rj} \prod (n_k)^{v''_{kj}} \quad (3.16)$$

- K_{fj} sens directe de la réaction
- K_{rj} sens inverse

$$K_{fj} = A_{fj} e^{-E_j/RT} T^{B_j}$$

- A_{fj} est le facteur pré-exponentiel (tables des mécanismes cinétiques)
- E_j énergie d'activation (tables des mécanismes cinétiques)
- B_j exposant de température (tables des mécanismes cinétiques)

$$K_{rj} = K_{fj}/K_p$$

K_p est la constante d'équilibre

3.5 Choix du modèle de combustion pour la simulation HCCI

Bien que le modèle EDM soit largement utilisé pour les flammes turbulentes industrielles, il présente une limitation fondamentale dans le contexte de la combustion HCCI : il suppose que la vitesse de combustion est entièrement contrôlée par le mélange turbulent, négligeant ainsi la cinétique chimique. Or, dans un moteur HCCI, l'auto-inflammation est un phénomène **purement cinétique** — elle dépend directement de la température, de la pression et de la réactivité chimique du mélange, et non de la turbulence. C'est pourquoi le modèle EDM seul est inadapté pour prédire correctement le délai d'auto-inflammation.

CHAPITRE 3 : Modélisation de la combustion

Pour cette raison, le modèle **Finite Rate** a été retenu dans cette étude. Il permet de calculer le taux de réaction à partir des constantes cinétiques d'Arrhenius (facteur pré-exponentiel A et énergie d'activation E_a), ce qui est indispensable pour simuler fidèlement le déclenchement de la combustion HCCI. Ce choix est cohérent avec les travaux de (Dec J. E., Advanced compression-ignition engines, 2009) (Kominos & Rakopoulos,, 2012), qui recommandent l'approche cinétique pour ce type de combustion.

CHAPITRE 4 : Étude Numérique et Simulation du système HCCI

Introduction

Après avoir exposé les fondements théoriques de la technologie HCCI et les modèles mathématiques régissant la combustion turbulente, ce chapitre est consacré à la mise en œuvre numérique de notre étude sous l'environnement **ANSYS Fluent**.

L'enjeu ici est de traduire les équations physiques en un modèle informatique capable de prédire avec précision le comportement du mélange **n-octane/Air iso-octane** enrichi en **Hydrogène**. Cette phase de simulation est cruciale pour comprendre l'impact des paramètres opératoires sur l'auto-inflammation.

Pour garantir une démarche scientifique rigoureuse, nous avons subdivisé ce chapitre en trois phases majeures :

1. **Phase de Pré-traitement (Pre-processing)** : Elle concerne la génération et la validation du maillage, ainsi que la configuration des modèles thermo-chimiques en mode statique.
2. **Phase de Validation Dynamique** : Où nous testons la cinématique du piston et l'évolution thermodynamique sans réactions chimiques (cycle de compression pure).
3. **Phase de Simulation de la Combustion** : C'est l'étape finale où nous simulons le processus d'auto-inflammation et analysons les résultats obtenus (Pression, Température et Polluants).

4.1. Configuration et Validation du Maillage (Mode Statique)

La précision des résultats numériques dépend intrinsèquement de la qualité du maillage utilisé. Pour cette étude, nous avons procédé à une discrétisation structurée du domaine fluide en utilisant le pré-processeur **GAMBIT**.

Le choix d'une simulation en configuration **2D** est justifié par le rapport coût-précision recherché dans ce travail. En effet, la géométrie cylindrique du moteur monocylindre étudié présente une symétrie de révolution qui permet de réduire considérablement le coût de calcul tout en conservant les phénomènes physiques essentiels de la compression et de la combustion. Cette approche est largement adoptée dans la littérature pour les études numériques préliminaires des moteurs HCCI (Dec J. E., Advanced compression-ignition engines, 2009). (Kominos & Rakopoulos,, 2012)

A. Caractéristiques géométriques et topologie : Le domaine de calcul représente la chambre de combustion d'un moteur monocylindre. Afin de capturer les gradients thermiques et de pression de manière optimale, nous avons adopté une taille de maille de **0.1 mm**. Ce raffinement est essentiel pour assurer la convergence du solveur lors de l'activation des modèles de cinétique chimique complexe (HCCI).

B. Qualité métrique du maillage : La fiabilité des simulations sous **ANSYS Fluent** a été renforcée par un contrôle rigoureux de la qualité des éléments :

- **Contrôle du Skewness :** Nous avons veillé à ce que l'équi-angle maximal ne dépasse pas **0.8**, garantissant ainsi une stabilité numérique élevée et minimisant la diffusion artificielle des flux.
- **Aspect Ratio :** Le rapport d'aspect des cellules a été maintenu dans des limites acceptables pour éviter toute distorsion des résultats lors de la résolution des équations de Navier-Stokes.

C. Adaptabilité au maillage dynamique : La structure du maillage a été spécifiquement conçue pour être compatible avec les algorithmes de **Dynamic Mesh** (Layering/Smoothing). Cette configuration permet au domaine de se déformer de manière fluide suivant la course du piston, tout en conservant une connectivité robuste entre les nœuds.

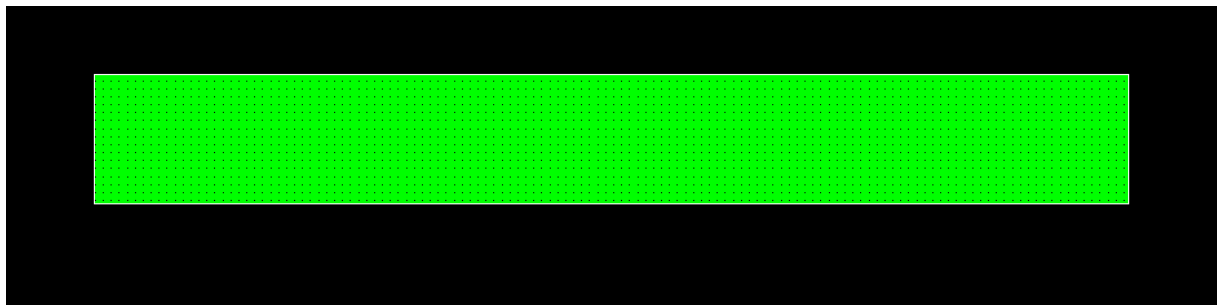


Figure 24 Représentation du maillage structuré de la géométrie 2D de la chambre de combustion généré sous GAMBIT

Level	Cells	Faces	Nodes	Partitions
0	80000	160900	80901	1

4.2. Environnement de Simulation Numérique : ANSYS Fluent 6.3

4.2.1. Présentation Générale du Logiciel

Le choix s'est porté sur **ANSYS Fluent 6.3**, l'un des codes de calcul de mécanique des fluides (CFD) les plus robustes et les plus validés dans le domaine de l'ingénierie thermique et automobile.

Ce logiciel repose sur la méthode des **Volumes Finis** pour résoudre les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie (Équations de Navier-Stokes). Sa force réside dans:

- **La flexibilité des modèles** : Il permet d'intégrer des cinétiques chimiques complexes indispensables pour le mode HCCI.
- **Le couplage thermique** : Une gestion précise des échanges de chaleur entre les gaz et les parois du cylindre.
- **La robustesse du solveur** : Capable de gérer des gradients de pression très élevés lors de l'auto-inflammation brutal

4.2.2. Configuration détaillée des modèles et paramètres du solveur

Pour garantir la stabilité et la précision des calculs, nous avons activé et configuré plusieurs modules au sein de l'interface **Fluent 6.3** :

1. Définition du Solveur (General Settings)

- **Solver (Solveur)** : Sélection du mode **Pressure-Based**. Ce choix est adapté pour les moteurs à combustion où les vitesses d'écoulement sont subsoniques durant la phase de compression.
- **Space (Espace)** : Configuration en **2D**.
- **Time (Temps)** : Activation du mode **Unsteady** (instationnaire). C'est le paramètre clé qui permet de diviser le cycle de compression en petits pas de temps (Time Steps) pour suivre l'évolution de la pression.

2. Modèles Physiques Activés (Models)

C'est ici que l'on définit la "physique" du moteur :

- **Équation de l'Énergie (Energy) :** Activée (ON). Elle permet de calculer les variations de température T dues à la compression du piston et à la libération de l'énergie chimique des 4 réactions
- **Modèle de Turbulence (Viscous) :** Utilisation du modèle **Standard k, ϵ** . Ce modèle résout deux équations supplémentaires : l'une pour l'énergie cinétique turbulente k et l'autre pour son taux de dissipation ϵ .
- **Radiation (Rayonnement) :** Activation du transfert de chaleur par rayonnement (avec une **Transmissivity de 0.8**), ce qui est nécessaire pour simuler correctement les pertes thermiques aux parois lors de la combustion.

3. Transport des Espèces et Chimie (Species Transport)

C'est la partie la plus importante de votre travail :

- **Modèle : Species Transport** activé.
- **Réactions :** Activation des **Volumetric Reactions**. Cela permet au mélange n-octane/Air/H₂ de réagir chimiquement dans chaque maille du domaine.
- **Interaction Chimie-Turbulence :** Sélection du modèle **Laminar Finite-Rate**

Raison : Le modèle laminaire à taux fini a été choisi car la combustion en mode HCCI est principalement gouvernée par la cinétique chimique et les conditions thermodynamiques, plutôt que par les effets turbulents.

4. Propriétés des Matériaux (Materials)

Pour chaque gaz injecté (C₈H₁₈, H₂, O₂, N₂, CO, CO₂, H₂O), nous avons configuré :

- **Density (Masse volumique) :** Loi des **Gaz Parfaits** (Ideal Gas).
- **Cp(Chaleur spécifique) :** Utilisation des **Polynômes de la NASA**. Cela garantit que la capacité thermique du mélange change de manière réaliste avec l'augmentation de la température.

4.2.2 Modélisation des Propriétés Thermophysiques (Polynômes de la NASA);

Dans le cadre de la simulation de la combustion HCCI, la précision des bilans énergétiques dépend directement de la modélisation de la capacité thermique à pression

constante (C_p). Étant donné que la température au sein du cylindre varie de manière significative (de l'admission à l'auto-inflammation), l'utilisation d'une valeur constante pour le C_p est insuffisante.

1. Formule Générale des Polynômes

Nous avons adopté l'approche des **polynômes de la NASA (7-termes)**, qui définit l'évolution de la capacité thermique molaire adimensionnelle $\left(\frac{C_p}{R}\right)$ en fonction de la température (T) selon l'équation suivante :

$$\frac{C_p}{R} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4$$

Où :

- T est la température locale (en Kelvin).
- R est la constante universelle des gaz parfaits ($8.314 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$)
- a_1, a_2, a_3, a_4, a_5 sont les coefficients empiriques spécifiques à chaque espèce chimique.

2. Organisation par Plages de Température

Pour garantir une précision optimale sur une large gamme de températures, les coefficients sont divisés en deux domaines distincts, se rejoignant généralement à une température commune de 1000 K :

- **Plage Basse (Low Range : $200 \text{ K} < T < 1000 \text{ K}$)** : Utilisée pour simuler les phases d'admission et de compression.
- **Plage Haute (High Range : $1000 \text{ K} < T < 5000 \text{ K}$)** : Utilisée pour capturer l'élévation brutale de température lors de l'auto-inflammation et de l'expansion.

3. Procédure de Calcul dans le Code (Fluent)

À chaque itération et pour chaque cellule du domaine fluide, le code de calcul suit la procédure suivante :

1. **Extraction de la température locale** : Le solveur récupère la valeur de T dans la cellule.

CHAPITRE 4 : Étude Numérique et Simulation du système HCCI

2. **Sélection des coefficients** : Selon que T est inférieure ou supérieure à 1000 K, le jeu de coefficients (a_i) correspondant est sélectionné.
3. **Évaluation du polynôme** : Le calcul de $\frac{C_p}{R}$ est effectué.
4. **Conversion d'unités** : La valeur est convertie en capacité thermique massique ($J/kg \cdot K$) par la relation :

$$C_p [J/kg \cdot K] = \frac{C_p [J/mol \cdot K]}{M} = \frac{\left(\frac{C_p}{R} \cdot R\right)}{M}$$

(Où M est la masse molaire de l'espèce considérée).

4.2.3 Importance pour le Modèle HCCI

L'intégration de ces polynômes est cruciale pour notre étude car elle permet de modéliser avec précision le **délai d'auto-inflammation**. Une évaluation correcte du Cp garantit que l'augmentation de la pression et de la température lors de la combustion respecte les lois de la thermodynamique, permettant ainsi une analyse fiable des performances du moteur et de la formation des polluants

Les valeurs de coefficient :

	$(n-C_8H_{18})$	O_2	N_2
a ₁	6.241103×10^0	3.69757819×10^0	3.298677×10^0
a ₂	2.553956×10^{-2}	$6.13519732 \times 10^{-4}$	1.408240×10^{-3}
a ₃	1.411130×10^{-4}	1.258842×10^{-7}	-3.963222×10^{-6}
a ₄	-2.023247×10^{-7}	$1.77528148 \times 10^{-11}$	5.641515×10^{-9}
a ₅	8.398687×10^{-11}	$1.13143917 \times 10^{-15}$	$-2.444854 \times 10^{-12}$

Tableau 1 Configuration des modèles physiques pour la simulation de la combustion HCCI.

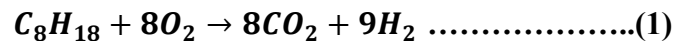
	H_2	H_2O	CO	CO_2
a ₁	3.355743×10^0	3.386842×10^0	3.710092×10^0	2.356773×10^0
a ₂	5.013614×10^{-4}	3.474982×10^{-3}	-1.619096×10^{-3}	8.984596×10^{-3}
a ₃	-3.346924×10^{-6}	-6.354696×10^{-6}	3.692359×10^{-6}	-7.123562×10^{-6}
a ₄	7.764516×10^{-9}	6.968581×10^{-9}	-2.031967×10^{-9}	2.459190×10^{-9}
a ₅	$-5.185563 \times 10^{-12}$	$-2.506588 \times 10^{-12}$	2.395774×10^{-13}	$-1.436995 \times 10^{-13}$

Tableau 2 Configuration des modèles physiques pour la simulation de la combustion HCCI.

4.3 Mécanisme réactionnel :

L'utilisation d'un mécanisme réduit, plutôt que détaillé, s'est imposée ici en raison des limites de nos ressources computationnelles. Ce modèle constitue néanmoins un excellent compromis pour restituer la macro-cinétique de la combustion sans saturer le solveur.

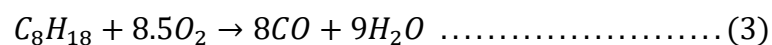
Oxydation globale du n-octane vers le CO_2 et H_2



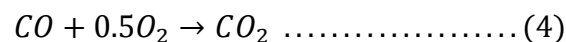
Oxydation de l'hydrogène (pour produire l'eau)



Oxydation partielle (Production du CO)



Conversion du Monoxyde en Dioxyde (CO/CO₂)



	Réaction 1	Réaction 2	Réaction 3	Réaction 4
A (Pre-exponential factor)	5×10^{11}	1×10^{15}	1×10^{15}	1×10^{14}
E_a (Activation Energy):	$6 \times 10^7 J/kmol$	$6 \times 10^9 J/kmol$	$6 \times 10^9 J/kmol$	$6 \times 10^9 J/kmol$
Include Back Réaction	✓	✗	✓	✗
Third-body efficiences	✗	✗	✗	✗
Pressure-dependent réaction	✗	✗	✓	✗

Tableau 3 Paramètres cinétiques et stœchiométriques de la réaction de combustion

Afin d'assurer la stabilité numérique de la simulation et d'obtenir un comportement de combustion cohérent avec les conditions étudiées, certains paramètres cinétiques du modèle d'Arrhenius, notamment l'énergie d'activation (E_a) et le facteur pré-exponentiel (A), ont été légèrement ajustés. Cette adaptation a permis de mieux contrôler la vitesse des réactions chimiques et de stabiliser le processus d'auto-inflammation au cours du calcul numérique.

4.4 Analyse Thermochimique du Mélange et Paramètres de Contrôle

La caractérisation précise du mélange air-carburant et des gaz recirculés est fondamentale pour modéliser l'auto-inflammation en mode HCCI (*Homogeneous Charge Compression Ignition*).

4.4.1 Définition des Fractions Massiques (Y_i)

La composition chimique du milieu est définie par la répartition des espèces. La fraction massique d'une espèce i , notée Y_i , représente le rapport entre la masse de cette espèce (m_i) et la masse totale du mélange (m_{tot}):

$$Y_i = \frac{m_i}{m_{tot}} = \frac{m_i}{\sum_{j=1}^n m_j}$$

En simulation numérique, le passage entre la fraction molaire (X_i) et la fraction massique s'effectue via la masse molaire de l'espèce (M_i) et la masse molaire moyenne du mélange ($\bar{M}$):

$$Y_i = X_i \cdot \frac{M_i}{\bar{M}} \quad \text{avec} \quad \bar{M} = \sum X_j M_j$$

4.4.2 Dosage, Richesse et Régimes de Combustion

Le dosage est le rapport entre la masse de carburant et la masse d'air. On distingue le dosage réel (d) du dosage stœchiométrique (d_{st}), ce dernier représentant les proportions idéales pour une combustion complète sans excès d'oxygène.

A. La Richesse (ϕ)

La richesse est le paramètre clé pour quantifier la qualité du mélange. Elle est définie par le rapport :

$$\phi = \frac{d_{réel}}{d_{st}} = \frac{(m_{carb}/m_{air})_{réel}}{(m_{carb}/m_{air})_{st}}$$

B. Classification des régimes

Selon la valeur de ϕ , trois régimes de combustion sont identifiés :

- **Mélange Pauvre ($\phi < 1$)** : L'air est en excès par rapport au carburant. C'est le régime de prédilection du moteur HCCI. L'excès d'air agit comme un ballast thermique,

abaissant la température de combustion, ce qui réduit drastiquement la formation des oxydes d'azote (NO_x).

- **Mélange Stœchiométrique ($\phi = 1$)** : Les proportions sont chimiquement exactes. En théorie, les produits ne contiennent ni oxygène résiduel ni imbrûlés.
- **Mélange Riche ($\phi > 1$)** : Le carburant est en excès. Par manque d'oxygène, la combustion est incomplète, entraînant une forte production de monoxyde de carbone (CO) et d'hydrocarbures imbrûlés (HC).

4.4.3 Taux de Recirculation des Gaz d'Échappement (EGR)

L'EGR (*Exhaust Gas Recirculation*) est une technique de contrôle thermique consistant à réintroduire une partie des gaz de combustion à l'admission.

A. Calcul du taux d'EGR

Le pourcentage d'EGR est défini par le rapport massique des gaz recyclés sur la masse totale admise :

$$\%EGR = \frac{\dot{m}_{EGR}}{\dot{m}_{air} + \dot{m}_{carb} + \dot{m}_{EGR}} \times 100$$

B. Impact sur la combustion HCCI

L'introduction de l'EGR affecte la combustion à travers trois mécanismes principaux que nous avons pris en compte dans nos simulations :

1. **Effet Diluant** : La réduction de la concentration en oxygène (O_2) ralentit la cinétique chimique.
2. **Effet Thermique** : L'augmentation de la capacité thermique molaire (C_p) du mélange (due à la présence de CO_2 et H_2O) absorbe l'énergie libérée, limitant les pics de température entre 1100K et 1500K.
3. **Effet Chimique** : Les espèces radicalaires présentes dans l'EGR peuvent modifier le délai d'auto-inflammation.

4.4.4 Procédure de calcul pour la simulation

Pour un taux d'EGR de 30%, la fraction massique d'oxygène à l'entrée ($Y_{O_2,in}$) est recalculée pour tenir compte de la dilution. Ce calcul est essentiel pour initialiser les conditions aux limites sous ANSYS Fluent et garantir la convergence vers une solution physique cohérente avec les conditions expérimentales.

4.5 Paramétrage des conditions initiales et analyse du mélange

Avant de procéder à la résolution numérique des équations de Navier-Stokes et de la cinétique chimique, une étape cruciale consiste à définir l'état initial du mélange au sein du cylindre. Cette section détaille la configuration thermochimique retenue pour l'étude de la combustion HCCI sous forte dilution.

4.6 Composition massique du mélange admission (Initialisation)

Le domaine fluide a été initialisé en utilisant des fractions massiques (Y_i) spécifiques. Ces valeurs reflètent un mélange composé de carburant (n-octane), d'air frais, ainsi que d'une forte proportion de gaz de recirculation (EGR) à hauteur de 30% et de produits intermédiaires (H_2 et CO).

4.6.1 Fractions massiques initiales des espèces chimiques dans le domaine.

Espèce Chimique	Symbole	Fraction Massique (Y_i)	Rôle dans le mélange
n-Octane	C_8H_{18}	$0.004 < Y_i < 0.006$	Carburant principal
Oxygène	O_2	$0.139 < Y_i < 0.141$	Comburant
Dioxyde de carbone	CO_2	$0.149 < Y_i < 0.151$	Diluant (EGR thermique)
Eau (vapeur)	H_2O	$0.149 < Y_i < 0.151$	Diluant (EGR thermique)
Hydrogène	H_2	$0.019 < Y_i < 0.021$	Promoteur d'allumage

Espèce Chimique	Symbole	Fraction Massique (Y_i)	Rôle dans le mélange
Monoxyde de carbone	CO	$0.0005 < Y_i < 0.0011$	Produit intermédiaire
Azote	N_2	$0.533 < Y_i < 0.535$	Gaz porteur (Balance)
TOTAL	-	$0.999 < Y_i < 1.001$	Mélange complet

Tableau 4 Composition massique du mélange initial (Mass Fractions)

Calcul de la Richesse du Mélange (Φ)

La richesse est le paramètre fondamental qui détermine le régime de combustion. Pour déterminer sa valeur exacte à partir des fractions massiques injectées dans ANSYS Fluent, nous appliquons la méthodologie suivante :

1. Rapport Carburant/Air réel ($F/A_{réel}$) :

En considérant l'oxygène apporté par l'air frais (où l'oxygène représente environ 23,3% de la masse de l'air sec), le rapport massique réel est calculé comme suit :

$$(F/A)_{réel} = \frac{Y_{C_8H_{18}}}{Y_{O_2}/0.233} = \frac{0.005}{0.14/0.233} \approx 0.00832$$

2. Rapport Carburant/Air stœchiométrique (F/A_{st}) :

Pour le n-octane, la réaction de combustion complète stœchiométrique impose un rapport de :

$$(F/A)_{st} = \frac{1}{15.05} \approx 0.0664$$

3. Détermination de la Richesse (Φ) :

$$\Phi = \frac{(F/A)_{réel}}{(F/A)_{st}} = \frac{0.00832}{0.0664} \approx 0.125$$

4.7 Interprétation des résultats de l'initialisation

L'analyse de ces paramètres initiaux permet de tirer les conclusions suivantes pour la suite de l'étude :

- **Régime Ultra-Pauvre** : Avec une richesse de $\phi = 0.125$, nous opérons en régime d'extrême pauvreté. Ce choix est caractéristique du mode HCCI, visant à minimiser les températures de combustion pour empêcher la formation thermique des NO_x .
- **Effet de la Dilution (EGR)** : Les fractions massiques élevées de CO_2 et H_2O (30% au total) augmentent la capacité thermique du mélange (C_p). Cela permet d'absorber une partie de l'énergie libérée et de stabiliser la température de combustion dans la plage visée de **1100K à 1500K**.
- **Rôle de l'Hydrogène** : L'introduction de 2% d'hydrogène (H_2) en condition initiale sert de promoteur chimique pour compenser la forte dilution, facilitant ainsi l'auto-inflammation malgré la faible richesse du mélange.
- Le choix d'une richesse aussi faible ($\phi = 0.125$) est délibéré et caractéristique du mode HCCI. En effet, un mélange ultra-pauvre permet d'abaisser significativement la température de combustion en dessous du seuil de formation thermique des NO_x (environ 1800 K), tout en maintenant une auto-inflammation stable grâce à la présence de 2% d'hydrogène comme promoteur d'allumage. Cette valeur est cohérente avec les travaux de (Dec J. E., Advanced compression-ignition engines, 2009) et (Sjöberg & Dec, J. E, Combined effects of fuel type and engine speed on intake temperature requirements and high-load limits for HCCI engines, 2003), qui ont démontré que les moteurs HCCI opèrent typiquement dans une plage de richesse comprise entre 0.1 et 0.5 pour garantir une combustion propre et contrôlée.

4.8 Conditions aux limites de pression et de température

Afin d'assurer une modélisation fidèle du comportement thermodynamique du mélange au sein de la chambre de combustion, les conditions aux limites ont été définies en imposant une pression initiale uniforme de $[P = 40\text{atm}]$ ainsi qu'une température initiale de $[T = 429.52\text{ K}]$ dans l'ensemble du domaine de calcul. Ces valeurs ont été choisies de manière à représenter les conditions initiales du mélange avant le début du processus de compression dans un moteur HCCI.

L'hypothèse d'un champ initial homogène permet de simplifier l'analyse tout en assurant une meilleure stabilité numérique lors des premières itérations. Cette étape constitue une phase essentielle pour la validation du modèle en régime statique, avant l'introduction des effets dynamiques et des phénomènes de combustion.

4.9 Conditions thermiques aux parois du domaine

Dans le cadre de la définition des conditions aux limites, une attention particulière a été accordée aux parois du domaine de calcul. Les parois latérales ainsi que la paroi supérieure (Top) de la chambre de combustion ont été modélisées comme des parois isothermes, avec une température constante fixée à $T = 363 \text{ K}$.

Ce choix permet de représenter de manière réaliste les échanges thermiques entre les gaz et les surfaces internes du cylindre, tout en simplifiant la modélisation numérique. L'imposition d'une température uniforme sur ces parois contribue également à assurer la stabilité du calcul et à mieux contrôler les gradients thermiques au voisinage des surfaces solides.

Cette hypothèse est couramment adoptée dans les études numériques des moteurs HCCI, où la maîtrise des conditions thermiques aux parois joue un rôle important dans le déclenchement de l'auto-inflammation et l'évolution de la combustion.

4.10 Conditions opératoires de la simulation

Les conditions opératoires de la simulation ont été définies afin de reproduire fidèlement l'environnement thermodynamique du système étudié. Dans ce cadre, la pression de référence (Operating Pressure) a été fixée à $[P_0 = 40 \text{ atm}]$, correspondant à la pression de fonctionnement du moteur.

Cette pression de référence permet de calculer les pressions relatives dans le domaine et d'assurer la cohérence des résultats numériques, notamment dans le cas d'un écoulement compressible.

Par ailleurs, l'accélération de la pesanteur a été négligée dans cette étude, son influence étant insignifiante par rapport aux phénomènes dominants liés à la combustion et à la dynamique des gaz dans la chambre.

La définition correcte des conditions opératoires constitue une étape essentielle pour garantir la stabilité du calcul et la précision des résultats obtenus.

4.11 Validation dynamique du piston et étude de la compression d'air

Introduction

Après la phase de pré-traitement et la validation du maillage statique, une seconde étape essentielle consiste à vérifier le comportement dynamique du domaine mobile avant l'activation des réactions chimiques. Cette phase permet de tester le déplacement du piston, la stabilité du maillage dynamique ainsi que l'évolution thermodynamique du fluide sous l'effet de la compression.

Dans cette partie, le cylindre est rempli uniquement d'air afin d'éliminer l'influence de la combustion et de concentrer l'analyse sur les phénomènes purement aérodynamiques et thermodynamiques. Cette approche constitue une étape indispensable pour valider le modèle numérique avant l'introduction des réactions chimiques complexes du mode HCCI.

4.12 Objectif de la validation dynamique

L'objectif principal de cette étude est de vérifier la capacité du modèle numérique à reproduire correctement le mouvement du piston ainsi que les variations de pression et de température engendrées par la compression de l'air.

Cette étape permet notamment de :

- vérifier la stabilité du maillage dynamique ;
- contrôler la qualité des cellules durant le déplacement du piston ;
- valider les méthodes de layering et smoothing utilisées sous ANSYS Fluent ;
- analyser l'évolution de la pression et de la température pendant la compression ;
- garantir la convergence numérique avant l'activation de la combustion.

La réussite de cette phase confirme que le modèle est suffisamment robuste pour supporter les fortes variations thermodynamiques associées à la combustion HCCI.

4.13 Description du domaine physique

Le domaine étudié représente une chambre de combustion simplifiée d'un moteur monocylindre. Le calcul est réalisé en configuration bidimensionnelle axisymétrique afin de

réduire le coût de calcul tout en conservant les caractéristiques physiques principales du phénomène.

Le cylindre est initialement rempli d'air sec composé principalement d'azote et d'oxygène. Les propriétés thermodynamiques du fluide sont modélisées à l'aide de l'hypothèse des gaz parfaits (Ideal Gas), permettant de prendre en compte les variations de densité en fonction de la température et de la pression durant la compression dynamique. Aucun carburant ni réaction chimique n'est introduit durant cette phase.

Le mouvement du piston entraîne une diminution progressive du volume du cylindre, provoquant ainsi une augmentation de la pression et de la température conformément aux lois de la compression.

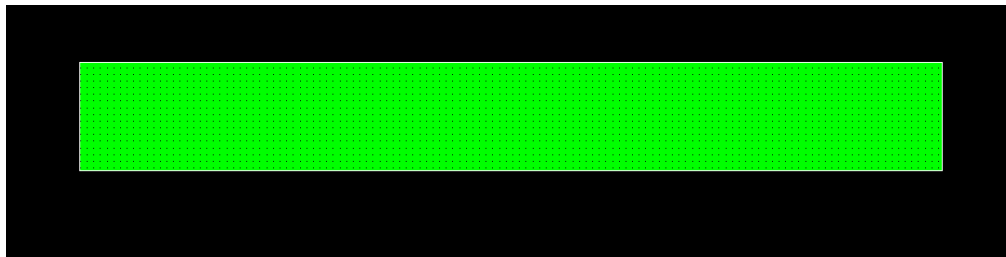


Figure 25: Évolution du maillage dynamique de la chambre de combustion à différents angles du vilebrequin. Maillage au Point Mort Haut (PMH) - Volume minimal.

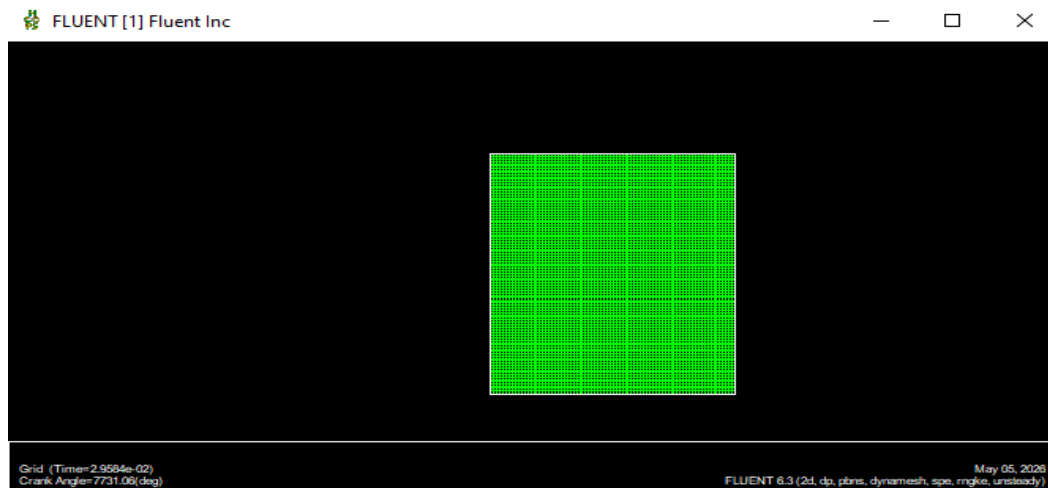


Figure 26: Évolution du maillage dynamique de la chambre de combustion à différents angles du vilebrequin. Maillage au Point Mort Bas (PMB) - Volume maximal.

4.13.1 Génération du maillage dynamique

Le maillage a été généré sous GAMBIT à l'aide d'une discrétisation structurée permettant d'obtenir une meilleure stabilité numérique.

Une attention particulière a été accordée à la qualité des cellules afin de limiter les erreurs numériques pendant le déplacement dynamique du piston.

Caractéristiques principales du maillage

Paramètre	Solveur utilisé
Type de maillage	Structuré
Géométrie	2D
Taille moyenne des cellules	0.1 mm
Qualité maximale (Skewness)	< 0.8
Solveur utilisé	ANSYS Fluent 6.3

Tableau 5 Spécifications géométriques et paramètres de fonctionnement du moteur étudié

Le raffinement du maillage a été particulièrement renforcé à proximité des parois afin de mieux capturer les gradients de pression et de température.

4.13.2 Configuration du maillage dynamique sous Fluent

Le mouvement du piston a été reproduit à l'aide de la fonctionnalité Dynamic Mesh disponible dans ANSYS Fluent.

Cette technique permet de modifier automatiquement la géométrie du domaine fluide au cours du temps tout en conservant la connectivité du maillage.

4.13.3 Méthodes utilisées :

A. Layering

La méthode Layering consiste à ajouter ou supprimer automatiquement des couches de cellules lors du déplacement de la paroi mobile.

Cette technique est particulièrement adaptée aux mouvements linéaires du piston car elle permet de conserver une bonne qualité de maillage pendant la compression.

B. Smoothing

Le Smoothing permet d'ajuster progressivement la position des nœuds internes afin d'éviter la distorsion excessive des cellules.

Cette méthode améliore considérablement la stabilité numérique pendant les simulations instationnaires.

4.13.4 Coordonnées géométriques du cylindre

Afin de définir correctement le domaine mobile sous ANSYS Fluent, les coordonnées géométriques du cylindre et du piston ont été introduites dans le pré-processeur GAMBIT.

La géométrie adoptée correspond à une chambre cylindrique axisymétrique simplifiée représentant un moteur monocylindre.

Les coordonnées des sommets ont été définies avec précision afin d'assurer un déplacement vertical correct du piston et une déformation contrôlée du maillage.

4.13.5 Vitesse de rotation et angle de vilebrequin

Le mouvement du piston est directement lié à la vitesse de rotation du moteur ainsi qu'à l'angle du vilebrequin.

Dans cette étude, la vitesse de rotation imposée est fixée à 2000 rpm.

Cette vitesse correspond à un régime de fonctionnement intermédiaire fréquemment utilisé dans les études numériques des moteurs HCCI.

L'évolution temporelle du mouvement du piston est décrite en fonction de l'angle de vilebrequin (Crank Angle), permettant de suivre précisément les différentes phases du cycle moteur.

La relation entre la vitesse angulaire et la vitesse de rotation s'écrit comme suit :

$$\omega = 2 \pi N / 60$$

Avec :

- ω : vitesse angulaire (rad/s)
- N : vitesse de rotation du moteur (rpm)

Pour une vitesse de 2000 rpm, la vitesse angulaire obtenue est égale à 209.44 rad/s.

Le déplacement du piston est ensuite imposé sous Fluent à travers une loi dynamique dépendant du temps et du crank angle.

4.13.6 Conditions initiales et aux limites

Les conditions initiales ont été choisies afin de représenter un état thermodynamique réaliste avant la phase de compression.

Conditions initiales

Paramètre	Valeur
Pression initiale	1 atm
Température	298 K
Fluide	Air
Modèle de densité	Ideal Gas
Régime	Instationnaire
Gravité	Négligée

Tableau 6 Conditions thermiques imposées aux parois de la chambre de combustion

4.13.7 Conditions aux limites

Les parois latérales ainsi que la culasse ont été considérées comme des parois isothermes.

Paroi	Condition
Parois du cylindre	Wall
Température des parois	363k
Piston	Moving Wall

Tableau 7 Valeurs initiales introduites pour le démarrage de la simulation (Solution Initialization)

Le piston est défini comme une paroi mobile se déplaçant verticalement selon une loi cinématique imposée.

4.13.8 Paramètres du solveur

Afin d'assurer la stabilité des calculs, plusieurs paramètres numériques ont été configurés dans Fluent.

Configuration Générale

Paramètre	Configuration
Solveur	Pressure-Based
Temps	Unsteady
Modèle énergétique	Activé
Viscosité	Laminaire
Radiation	Désactivée
Combustion	Désactivée

Tableau 8 Configuration générale du solveur sous ANSYS Fluent

4.13.9 Mouvement du piston

Le déplacement du piston constitue l'élément principal de cette étude dynamique.

Le mouvement est imposé sous forme d'une vitesse dépendant du temps ou de l'angle de vilebrequin.

Pendant la montée du piston, le volume de la chambre diminue progressivement, ce qui entraîne:

- une augmentation de la pression ;
- une augmentation de la température ;
- une accélération locale de l'écoulement.

Cette phase reproduit le cycle réel de compression observé dans les moteurs thermiques.

4.13.10 Validation de la qualité du maillage dynamique

Durant toute la simulation, plusieurs indicateurs ont été surveillés afin d'évaluer la qualité du maillage dynamique.

Les principaux critères de validation sont :

- absence de cellules négatives ;
- conservation du volume du domaine ;
- stabilité du résidu numérique ;
- maintien du skewness dans les limites admissibles.

Les résultats obtenus montrent que le maillage conserve une qualité satisfaisante pendant tout le déplacement du piston.

4.14 Évolution thermodynamique de l'air comprimé

Sous l'effet de la compression, l'air subit une augmentation progressive de la pression et de la température.

Cette évolution est conforme aux lois de la thermodynamique des gaz compressibles.

L'analyse des contours de température et de pression permet d'observer :

- des gradients thermiques proches des parois ;
- une augmentation de la pression dans la zone centrale ;
- une élévation continue de la température pendant la montée du piston.

Ces résultats confirment le bon fonctionnement du modèle dynamique.

4.15 Modélisation de la cinématique du piston (Dynamic Mesh)

Pour simuler le mouvement réel du piston et la variation du volume de la chambre de combustion au cours du temps, nous avons activé l'option **Dynamic Mesh**. Cette approche est indispensable pour capturer les phénomènes instationnaires liés à la compression et à l'expansion du mélange.

4.15.1 Paramètres de mise à jour du maillage (Mesh Update Methods)

Le tableau suivant récapitule les méthodes utilisées pour maintenir la qualité des mailles pendant le mouvement :

Paramètre	Configuration	Rôle et Fonctionnement
Smoothing	Spring/LaPlace	Cette méthode traite les arêtes entre les nœuds comme un réseau de ressorts. Lorsqu'un nœud bouge, les ressorts s'ajustent pour éviter l'écrasement brutal des mailles, garantissant une transition fluide.
Dynamic Layering	Constant Height	C'est la méthode principale pour les moteurs. Elle ajoute ou supprime des couches de mailles (layers) parallèlement à la face mobile du piston en fonction de la hauteur spécifiée, ce qui préserve l'alignement du maillage.
Remeshing	Local Cell	Fluent réinitialise localement les mailles qui ne respectent plus les critères de qualité (skewness). Cela empêche l'apparition de mailles négatives qui causeraient l'arrêt de la simulation.

Tableau 9 Description fonctionnelle des méthodes de gestion du maillage en mouvement

Valeur / Option	Méthode	Paramètre
Factor0.9 :	Spring-Based	Smoothing
Split / 0.4 :Col0.4 :	Constant Ratio	Layering
0.2	Boundary Node	Relaxation
20	Smoothing	Iterations

Tableau 10 Paramètres de contrôle du maillage dynamique (Smoothing et Layering)

4.15.2 Configuration géométrique du moteur (In-Cylinder)

Les paramètres suivants définissent la structure mécanique du moteur simulé :

Paramètre	Valeur	Fonctionnalité
Crank Shaft Speed	2000	Définit la vitesse de rotation du moteur en RPM (tours par minute), ce qui dicte la vitesse linéaire du piston.
Starting Crank Angle	510.0027	Indique l'angle du vilebrequin au début de la simulation (généralement avant le PMH).
Stroke & Bore	0.9	Définissent respectivement la course du piston et l'alésage du cylindre, fixant ainsi le volume déplacé.

Tableau 11 Définition et rôle des paramètres cinématiques dans le module In-Cylinder

4.15.3 Définition des zones dynamiques (Dynamic Mesh Zones)

Nous avons attribué des comportements spécifiques à chaque zone de la géométrie pour simuler fidèlement le cycle moteur :

- **Piston (Moving Wall)** : Défini comme un **Rigid Body**. Son mouvement est régi par les équations cinématiques internes de Fluent basées sur les paramètres du vilebrequin.
- **Cylinder Wall (Deforming)** : Cette zone est définie comme **Deforming**. Elle s'étire ou se rétracte pour suivre le déplacement du piston tout en restant connectée au haut de la culasse.
- **Cylinder Head (Stationary)** : Cette paroi reste fixe durant toute la simulation, représentant la culasse.

Note de rédaction : L'activation de l'option **In-Cylinder** dans Fluent (Figure 3) permet d'automatiser le calcul de la position du piston à chaque pas de temps (Δt), assurant une synchronisation parfaite entre l'angle du vilebrequin et la résolution des équations de combustion.

4.15.5 Propriétés thermophysiques des gaz

Pour tenir compte de la variation de la capacité thermique avec la température, nous avons utilisé le modèle Piecewise-linear pour le calcul du C_p . Cette méthode consiste à diviser le domaine de température en plusieurs segments définis par 6 points de contrôle. Le logiciel

effectue une interpolation linéaire entre ces points, ce qui permet d'obtenir une précision accrue lors de l'élévation brutale de la température pendant la phase de combustion HCCI.

Capacité thermique C_p (J/kg·K)	Température T (K)	Point
C_{p1}	$T_1 = 0$	1
C_{p2}	$T_2 = 300$	2
C_{p3}	$T_3 = 600$	3
C_{p4}	$T_4 = 1000$	4
C_{p5}	$T_5 = 2000$	5
C_{p6}	$T_6 = 2500$	6

Tableau 12 Points d'interpolation de la capacité thermique (C_p) selon le modèle Piecewise-linear.

4.16 Paramétrage Temporel et Discrétisation du Temps

Dans une simulation instationnaire d'un moteur à combustion interne, le choix du pas de temps (**Time Step**) est crucial. Il doit être suffisamment petit pour capturer les gradients de pression et la cinétique chimique rapide, tout en respectant la vitesse du piston.

4.16.1 Calcul du Pas de Temps (Time Step Size)

Le pas de temps Δt ne se choisit pas au hasard ; il est directement lié à la vitesse de rotation du moteur (N en RPM) et à la résolution angulaire souhaitée ($\Delta\theta$).

La formule utilisée est :

$$\Delta t = \frac{\Delta\theta}{6 \times N}$$

Où :

- $\Delta\theta$: Résolution angulaire (degré de vilebrequin par pas de temps). Pour une simulation précise sous Fluent 6.3, on choisit souvent **0.1° à 0.5° CA**.
- N : Vitesse du moteur en tours par minute (RPM).

4.16.2 Mon travail :

Moteur tourne à **2000 RPM** avec un pas de **0.5°** :

$$\Delta t = \frac{0.5}{6 \times 2000} = 4.1667 \times 10^{-5} \text{ s}$$

Paramètre sous Fluent	Valeur Typique	Justification Technique
Time Step Size	10^{-5} à 10^{-6} s	Indispensable pour la stabilité du solveur de chimie et pour éviter la divergence lors de l'auto-inflammation.
Max Iterations per Time Step	20 à 50	Nombre d'itérations internes pour que les résidus (masse, énergie, k-epsilon) convergent avant de passer à l'angle suivant.

Tableau 13 Paramètres du pas de temps et critères de convergence

4.16.3 Détermination du Nombre de Pas de Temps (Number of Time Steps)

Le nombre total de pas de temps dépend de la portion du cycle moteur que vous simulez (ex: de l'admission à l'échappement).

$$\text{Nombre de pas} = \frac{\text{Angle total de simulation}}{\Delta\theta}$$

Dans notre étude, nous avons choisi de simuler un cycle thermodynamique complet, ce qui correspond à 360° de rotation du vilebrequin (Crank Angle). Ce choix permet de capturer l'intégralité des phases : admission, compression, combustion/détente et échappement.

Le nombre total de pas de temps est calculé en divisant l'angle total de simulation par le pas angulaire choisi

$$\text{Nombre de pas} = \frac{360}{0.5} = 720 \text{ pas}$$

4.16.4 Variation et control (Adaptative Time Stepping)

Dans vos captures d'écran, vous avez utilisé un pas de temps fixe, mais il est important d'expliquer comment il "varie" ou influence la précision :

1. **Stabilité de Courant (CFL Condition) :** Le pas de temps doit être tel que le fluide ne traverse pas plus d'une cellule par itération. Si le pas est trop grand, le maillage dynamique (**Dynamic Layering**) risque de créer des mailles négatives ("Negative Cell Volume Detected").
2. **Précision Chimique :** Lors de la phase de combustion HCCI, les réactions sont extrêmement rapides. Un nombre d'itérations élevé par pas de temps (ex : 30 iterations) garantit que l'énergie libérée est correctement calculée.

4.16.5 Synthèse des Paramètres Introduits (Tableau Récapitulatif)

Paramètre	Valeur Unité	Rôle dans la Simulation
Crank Shaft Speed	2000 RPM	Impose la fréquence du mouvement du piston.
Crank Period	360 deg	Définit un cycle complet (360° pour un piston).
Piston Stroke	0.09 m	Définit la distance parcourue entre le PMB et le PMH.
Connecting Rod Length	0.15 m	Longueur de la bielle, utilisée pour calculer la vitesse instantanée non-linéaire du piston.

Tableau 14 Spécifications géométriques et paramètres cinématiques du moteur.

4.17 Simulation de la combustion du iso-octane avec maillage dynamique

Introduction

Après la validation du maillage dynamique et de la compression d'air dans la partie précédente, une nouvelle étape consiste à introduire les réactions chimiques afin de reproduire le phénomène réel de combustion à l'intérieur du cylindre.

Cette partie est consacrée à la simulation numérique de la combustion du n-octane en présence d'oxygène sous ANSYS Fluent. L'objectif principal est d'étudier l'évolution des paramètres thermodynamiques ainsi que le comportement de la flamme durant la compression dynamique générée par le déplacement du piston.

Le modèle numérique adopté repose sur un maillage dynamique avec piston mobile, associé à un modèle de combustion à vitesse finie (Finite Rate Model), permettant de prendre en compte la cinétique chimique des réactions de combustion.

4.18 Description du domaine physique

Le domaine étudié représente une chambre cylindrique axisymétrique équipée d'un piston mobile se déplaçant verticalement suivant une loi dynamique imposée.

Le cylindre contient un mélange réactif composé principalement de :

- iso-octane (C_8H_{18})
- oxygène (O_2)
- azote (N_2)

Le mouvement du piston provoque une diminution progressive du volume de la chambre, entraînant une augmentation importante de la pression et de la température jusqu'à l'apparition de la combustion.

4.18.1 Maillage dynamique

Le maillage dynamique est utilisé afin de reproduire le déplacement réel du piston pendant le cycle moteur.

La déformation du domaine fluide est assurée par les techniques :

- Layering
- Smoothing

Ces méthodes permettent de conserver une qualité de maillage acceptable durant toute la simulation malgré les fortes variations géométriques provoquées par le mouvement du piston.

Le maillage structuré adopté améliore la stabilité numérique ainsi que la précision des calculs thermodynamiques et chimiques.

4.18.2 Configuration du solveur

La simulation est réalisée sous ANSYS Fluent en utilisant un solveur de type Pressure-Based adapté aux écoulements compressibles réactifs.

Paramètres principaux

Paramètre	Configuration
Solveur	Pressure-Based
Régime	Unsteady
Géométrie	2D
Énergie	Activée
Species Transport	Activé
Dynamic Mesh	Activé
Modèle de combustion	Finite Rate
Modèle de combustion	Ideal Gas

Tableau 15 Synthèse des paramètres généraux du solveur et modèles physiques.

4.18.3 Modélisation thermodynamique

Les propriétés thermodynamiques des espèces chimiques sont définies à l'aide du modèle Piecewise Linear.

Ce modèle permet de représenter la variation de la capacité calorifique spécifique (C_p) en fonction de la température à travers une interpolation linéaire par intervalles.

Cette approche améliore la précision du calcul énergétique durant la combustion en tenant compte des variations thermiques importantes dans la chambre de combustion.

Les propriétés des gaz sont modélisées sous l'hypothèse des gaz parfaits (Ideal Gas), permettant de calculer la densité en fonction de la pression et de la température.

4.19 Injection du carburant

L'injection du carburant constitue une étape essentielle dans la formation du mélange combustible.

Dans cette étude, cinq injections successives du n-octane sont utilisées afin d'améliorer :

- l'homogénéité du mélange ;
- la stabilité de la combustion ;
- la distribution thermique dans le cylindre.

La stratégie multi-injection permet également de réduire les gradients locaux de richesse et d'améliorer l'efficacité globale de la combustion.

Paramètre d'injection	Unité	Injecteur 0	Injecteur 1	Injecteur 2	Injecteur 3	Injecteur 4
Type de particule	[-]	Inert	Inert	Inert	Inert	Inert
Position (X, Y)	[m]	(0, 0.004)	(0.015, 0.004)	(-0.015, 0.004)	(0.03, 0.004)	(-0.03, 0.004)
Vitesse d'injection (x)	[m/s]	0	0	0	0	0
Vitesse d'injection (y)	[m/s]	-20	-20	-20	-20	-20
Flow rate	[kg/s]	0.003	0.003	0.003	0.003	0.003
Température	[K]	300	300	300	300	300
Diamètre des gouttes	[m]	1×10^{-6}	1×10^{-6}	1×10^{-6}	1×10^{-6}	1×10^{-6}
Temps de début (Start)	[ms]	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03
Temps de fin (Stop)	[ms]	0.03125	0.03125	0.03125	0.03125	0.03125

Tableau 16 Paramètres de configuration des injecteurs (Modèle DPM)

4.20 Modèle de combustion Finite Rate

Le modèle Finite Rate est utilisé pour décrire les réactions chimiques de combustion.

Ce modèle repose sur la cinétique chimique des réactions et permet de calculer le taux de réaction à partir des concentrations des espèces ainsi que de la température locale.

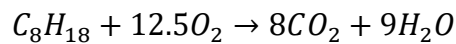
Le taux de réaction dépend directement :

- de la température ;
- de la pression ;
- des fractions massiques ;
- des constantes cinétiques.

Le modèle Finite Rate est particulièrement adapté aux simulations de combustion détaillée dans les moteurs HCCI.

4.21 Réactions chimiques

La réaction globale de combustion du n-octane peut être exprimée par :



Dans la simulation des moteurs à combustion interne, et particulièrement pour le mode **HCCI**, la capacité thermique massique (C_p) ne peut pas être considérée comme une constante. Son évolution est critique pour plusieurs raisons :

- **Précision du bilan énergétique** : La température dans le cylindre varie drastiquement (de **298 K** à plus de **2000 K**). Le modèle **Piecewise-linear** permet de suivre cette évolution en interpolant linéairement les valeurs entre les points définis.
- **Prédiction de l'auto-inflammation** : Dans un moteur HCCI, l'allumage dépend uniquement de la température de compression. Une évaluation précise du C_p garantit que l'augmentation de la température interne est calculée correctement, ce qui permet de situer précisément le délai d'auto-inflammation.
- **Stabilité numérique** : En divisant la plage de température en **6 points de contrôle**, on réduit les erreurs d'approximation par rapport à une valeur constante ou un polynôme

global complexe, ce qui facilite la convergence du solveur lors des phases de transition thermique rapide.

H2O	N2	CO2	O2	iso-C8H18	Température [K]
C_{p1}	C_{p1}	C_{p1}	C_{p1}	C_{p1}	$T_1 = 0$
C_{p2}	C_{p2}	C_{p2}	C_{p2}	C_{p2}	$T_2 = 300$
C_{p3}	C_{p3}	C_{p3}	C_{p3}	C_{p3}	$T_3 = 600$
C_{p4}	C_{p4}	C_{p4}	C_{p4}	C_{p4}	$T_4 = 1000$
C_{p5}	C_{p5}	C_{p5}	C_{p5}	C_{p5}	$T_5 = 1500$
C_{p6}	C_{p6}	C_{p6}	C_{p6}	C_{p6}	$T_6 = 2000$

Tableau 17 Points d'interpolation de la capacité thermique (C_p) pour les différentes espèces chimiques.

Catégorie	Paramètre	Symbole / Formule	Valeur
Cinétique de la Réaction	Facteur pré-exponentiel	A	1×10^{15} J /kmol
	Énergie d'activation	Ea [J/kmol]	2×10^8 J /kmol
	Include backward réaction	-	actif
Fractions Massiques (Initiales)	n-Octane (Carburant)	C ₈ H ₁₈	0
	Oxygène (Comburent)	O ₂	0.14
	Dioxyde de carbone	CO ₂	0.15
	Eau (Vapeur - Diluant)	H ₂ O	0.15
	Azote (reste)	N ₂	0.64

Tableau 18 Cinétique de la réaction et fractions massiques initiales

Cette réaction exothermique entraîne une importante libération d'énergie thermique provoquant une augmentation rapide de la pression et de la température dans la chambre.

4.22 Conditions initiales et aux limites

Les conditions initiales utilisées dans cette simulation sont choisies afin de reproduire un fonctionnement réaliste du moteur.

4.22.1 Conditions initiales

Paramètre	Valeur
Pression initiale	1 atm
Température initiale	300 K
Régime moteur	2000 rpm
Fluide	Mélange réactif
Modèle de densité	Ideal Gas

Tableau 19 Synthèse des conditions initiales de la simulation.

4.22.2 Conditions aux limites

Zone	Condition
Piston	Moving Wall
Parois cylindre	Wall
Axe	Axis
Température parois	363 K

Tableau 20 Récapitulatif des conditions aux limites (Boundary Conditions).

4.22.3 Paramètres temporels

La simulation est réalisée en régime transitoire afin de suivre l'évolution temporelle de la combustion.

Paramètre	Valeur
Time Step	4.667e-5 s
Number of Time Steps	180
Iterations/Step	20

Tableau 21 Paramètres de discrétisation temporelle pour le calcul instationnaire.

Le choix d'un faible pas de temps permet de capturer correctement les phénomènes rapides liés à l'auto-inflammation et à la propagation de la combustion.

4.23 Facteurs de sous-relaxation

4.23.1 Définition et Fonctionnement

Lors du processus itératif, le solveur calcule une nouvelle valeur pour chaque variable (Pression, Vitesse, Énergie, etc.). Au lieu d'adopter directement cette nouvelle valeur, le solveur utilise le facteur de relaxation (α) pour modifier la valeur précédente selon la formule simplifiée :

$$\phi_{\text{nouveau}} = \phi_{\text{ancien}} + \alpha \cdot (\phi_{\text{calculé}} - \phi_{\text{ancien}})$$

- Si $\alpha = 1$: La nouvelle valeur calculée est totalement adoptée.
- Si $\alpha < 1$: On ne prend qu'une fraction de la modification, ce qui ralentit l'évolution de la variable.

4.23.2 Utilité et Avantages

L'utilisation de ces facteurs présente trois avantages majeurs :

- **Stabilité du calcul (Convergence)** : Dans les simulations complexes (comme le mode HCCI avec injection DPM), les changements brutaux de pression ou de température peuvent faire "exploser" le calcul (Divergence). La sous-relaxation amortit ces variations.
- **Gestion de la non-linéarité** : Les équations de Navier-Stokes et de la combustion sont fortement non-linéaires. Réduire les facteurs de relaxation permet de stabiliser le couplage entre la vitesse, la pression et les réactions chimiques.
- **Précision dans les zones à forts gradients** : Pour l'injection de gouttelettes, les sources de masse et d'énergie sont locales et intenses. Des facteurs de relaxation plus faibles permettent au reste du domaine fluide de s'adapter progressivement à ces sources.

Paramètre	Facteur de sous-relaxation
Pressure	0.1
Density	0.1
Body Forces	1
Momentum	0.7
Species (Octane, O2, ...)	1
Energy	0.1
Discrete Phase Sources	0.5

Tableau 22 Factors de sous-relaxation

Chapitre 5 : Résultats et interprétation

5.1 Étude statique de la compression et analyse thermodynamique

Introduction

Cette partie présente les résultats obtenus lors de la simulation statique réalisée sous ANSYS Fluent afin d'étudier le comportement thermodynamique du mélange à l'intérieur du cylindre avant l'activation complète des phénomènes réactifs et dynamiques.

L'objectif principal de cette analyse consiste à examiner l'évolution de la pression et de la température dans la chambre de combustion sous l'effet de la compression.

Les résultats numériques obtenus permettent d'évaluer la stabilité du modèle CFD ainsi que la cohérence physique des phénomènes simulés.

5.1.1 Analyse des contours de pression

Les contours de pression obtenus montrent une augmentation progressive de la pression à l'intérieur du cylindre durant la compression.

Cette augmentation est principalement due à la réduction du volume interne provoquée par le déplacement du piston.

Les valeurs maximales de pression apparaissent généralement dans la région centrale de la chambre ainsi qu'à proximité du point mort haut (PMH), où le mélange subit une compression importante.

Présentation des résultats



Figure 27 : Contour de pression dans la chambre de combustion

Interprétation des résultats

À partir des contours obtenus, on remarque que la pression augmente progressivement avec la diminution du volume du cylindre.

Cette évolution reste conforme aux lois thermodynamiques des gaz compressibles.

L'augmentation de la pression favorise l'élévation de la température et prépare le mélange aux futures réactions d'auto-inflammation.

Courbe de pression

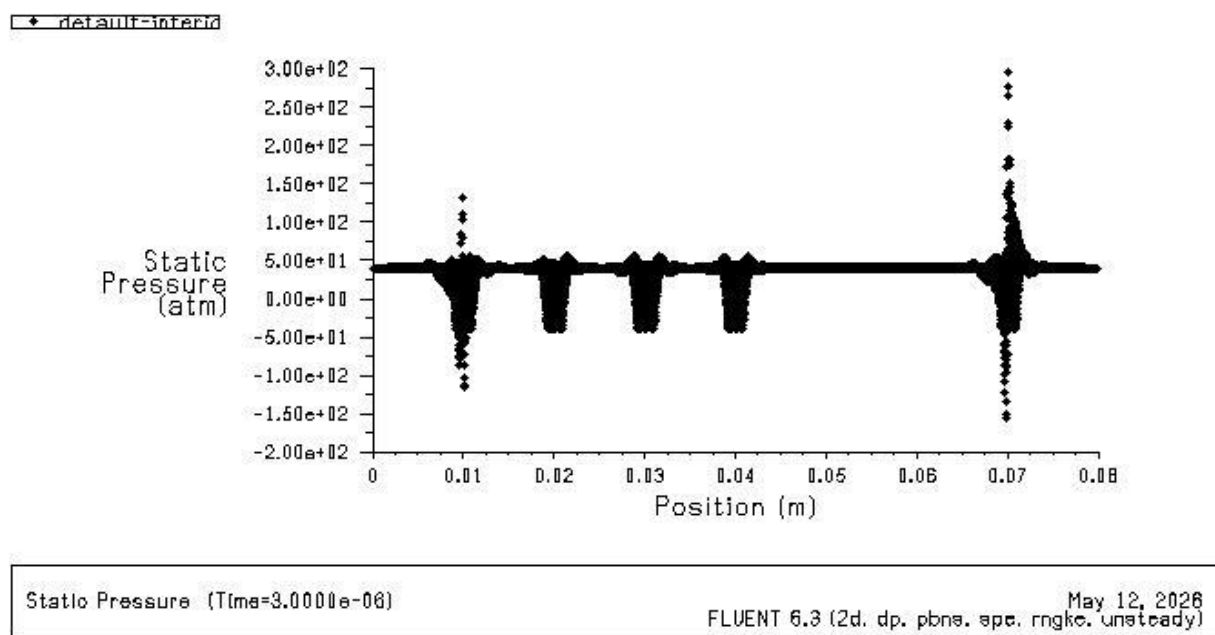


Figure 28: Évolution de la pression en fonction de position

Analyse de la courbe

Ce graphe illustre la distribution spatiale de la pression statique suivant l'axe de la position (m) à un instant physique très court ($t = 3 \mu s$). On observe un profil de pression globalement uniforme aux alentours de **40 atm**, ce qui correspond à la pression initiale du mélange comprimé avant l'intensification de la combustion.

Cependant, des fluctuations importantes (pics de pression positifs et négatifs) sont visibles à des positions précises (notamment à $x = 0.01$ m et $x = 0.07$ m). Ces perturbations locales représentent les **gradients de pression** générés par l'interaction entre les fronts d'injection (DPM) et la phase gazeuse. Les pics de pression élevés indiquent les zones de compression locale dues à l'introduction de la masse de carburant, tandis que les oscillations témoignent de

Chapitre 5 : Résultats et interprétation

la réponse aérodynamique du fluide et de la propagation des ondes de pression initiales dans la chambre de combustion.

5.1.2 Analyse des contours de température

Les résultats thermiques obtenus montrent une augmentation progressive de la température du mélange durant la compression.

Cette augmentation est principalement liée :

- au travail mécanique du piston ;
- à la compression du mélange ;
- à l'augmentation de la pression interne.

Les zones présentant les températures les plus élevées apparaissent dans les régions fortement comprimées du cylindre.

Présentation des résultats

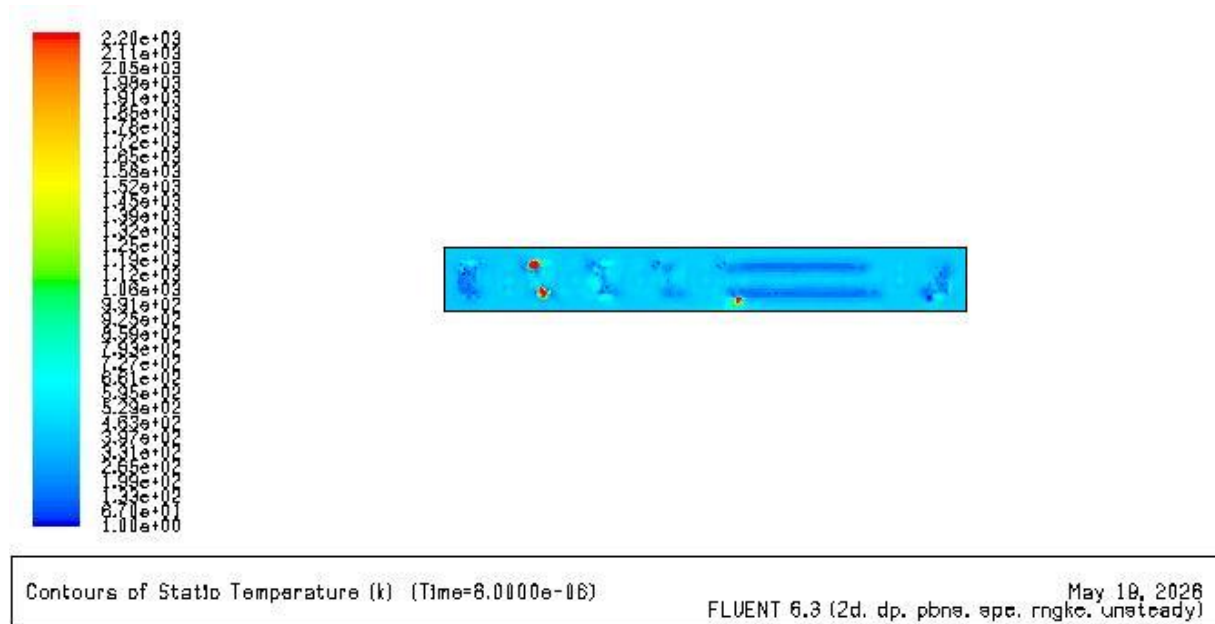


Figure 29: Contour de température dans la chambre de combustion

Interprétation thermique

L'augmentation de la température observée pendant la compression joue un rôle fondamental dans le déclenchement des réactions chimiques.

Les gradients thermiques observés près des parois sont principalement dus aux échanges thermiques entre le fluide et les surfaces solides.

Les résultats montrent également que le modèle énergétique activé sous Fluent permet de reproduire correctement les variations thermiques du mélange.

Courbe de température

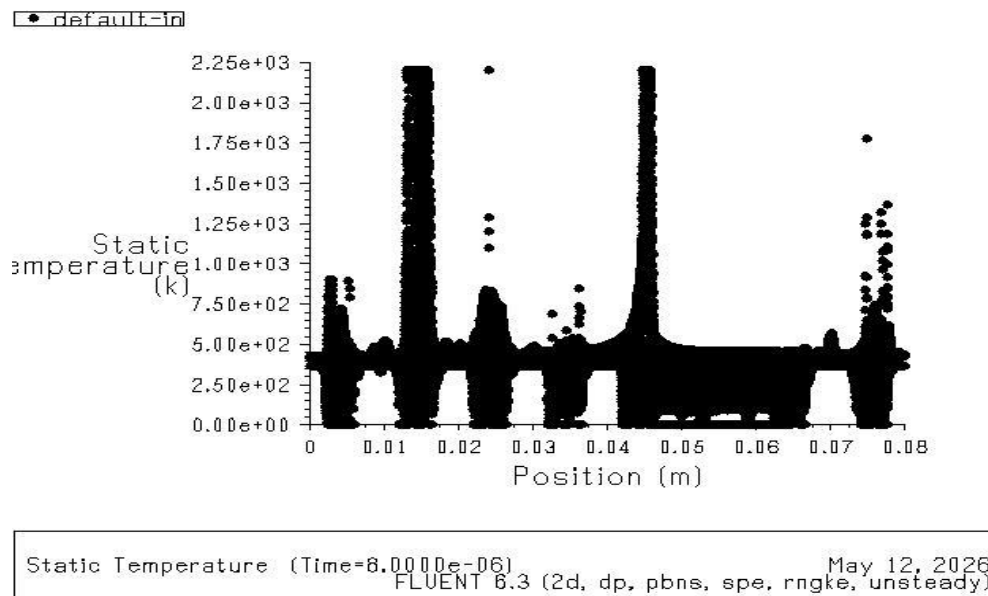


Figure 30 : Évolution de la température en fonction de position

Analyse de la courbe thermique

Ce profil représente la distribution de la température statique le long du domaine à un instant très précoce ($t = 8 \mu s$). Alors que la température de base du mélange se situe autour de **400 K**, on observe l'apparition de plusieurs pics thermiques intenses atteignant des valeurs comprises entre **1250 K** et **2250 K**.

Ces pics localisés marquent l'auto-inflammation précoce ou le début des réactions chimiques exothermiques au niveau des zones d'injection. La présence de ces hautes températures à des positions spécifiques (environ $x=0.015$ m et $x=0.045$ m) confirme le déclenchement du processus de combustion dans les zones où le mélange air-carburant est le plus réactif. L'hétérogénéité de la température à ce stade reflète la phase de préparation thermique du mélange avant le passage au régime dynamique du moteur.

5.1.3 Analyse combinée pression-température

L'évolution simultanée de la pression et de la température met en évidence le fort couplage thermodynamique existant dans la chambre de combustion.

L'augmentation de la pression entraîne directement une augmentation de la température conformément au comportement des gaz compressibles.

Cette interaction constitue un phénomène essentiel dans les moteurs HCCI puisqu'elle influence directement :

- le délai d'auto-inflammation ;
- la vitesse de combustion ;
- la stabilité du processus de combustion.

5.1.4 Validation et comparaison avec la littérature

Les résultats obtenus dans cette étude présentent une bonne cohérence avec plusieurs travaux scientifiques portant sur la combustion HCCI et les simulations CFD des moteurs à allumage par compression.

Résultats de référence

Référence	Type étude	Pression maximale	Température maximale	Observations
(Aroonsrisopon, 2002)	HCCI expérimental	60 – 100 bar	800 – 1100 K	pression augmente fortement près du PMH
(Hairuddin A. , 2014)	Revue HCCI diesel/H ₂	~80 bar	1300 – 2000 K	influence importante du carburant sur T _{max}
(Shahbakhti, 2010)	HCCI expérimental	40 – 70 bar	700 – 1000 K	température dépend fortement du régime moteur
Notre étude	Simulation CFD Fluent	93 bar	429.5-2200 K	résultats cohérents avec la littérature

Tableau 23 Synthèse comparative des travaux antérieurs sur l'optimisation des performances et des émissions des moteurs HCCI.

Comparaison des résultats

La comparaison montre que :

- les tendances de pression sont similaires ;
- l'évolution thermique reste cohérente ;
- les valeurs maximales obtenues sont proches des résultats publiés dans la littérature.

Les faibles écarts observés peuvent être expliqués par :

- les différences géométriques ;
- les conditions initiales ;
- les modèles numériques utilisés ;
- les mécanismes chimiques adoptés.

Malgré ces différences, les résultats obtenus confirment la validité du modèle numérique développé sous Fluent.

5.1.5 Conclusion

Cette étude statique a permis d'analyser le comportement thermodynamique du mélange dans la chambre de combustion avant l'introduction complète des phénomènes réactifs.

Les résultats obtenus montrent une augmentation importante de la pression et de la température durant la compression, conformément aux lois physiques des gaz compressibles.

L'analyse des contours et des courbes confirme également la stabilité du modèle numérique ainsi que la fiabilité des paramètres utilisés dans la simulation CFD.

5.2 Étude du maillage dynamique sans combustion

Introduction

Cette partie est consacrée à l'étude du comportement dynamique du fluide à l'intérieur du cylindre en présence d'un piston mobile sans activation des réactions chimiques de combustion.

L'objectif principal de cette simulation consiste à analyser l'influence du déplacement du piston sur l'évolution des paramètres thermodynamiques du mélange gazeux, notamment la pression

et la température, tout en validant la stabilité du maillage dynamique utilisé sous ANSYS Fluent.

Dans cette étude, le cylindre est rempli uniquement d'air afin d'éliminer les effets liés aux réactions chimiques et de concentrer l'analyse sur les phénomènes de compression dynamique.

5.2.1 Analyse du déplacement dynamique du piston

Le mouvement du piston provoque une variation continue du volume de la chambre de combustion.

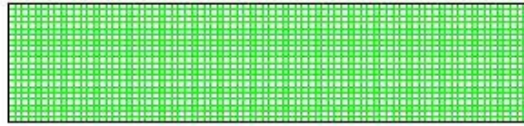
Lorsque le piston se déplace vers le point mort haut (PMH), le volume interne diminue progressivement, entraînant une compression importante de l'air contenu dans le cylindre.

Cette compression provoque :

- une augmentation de la pression ;
- une élévation de la température ;
- une variation de la densité du fluide ;
- une accélération locale de l'écoulement.

Le maillage dynamique adopté permet de reproduire correctement cette variation géométrique tout en conservant une qualité numérique satisfaisante durant toute la simulation.

Présentation du maillage dynamique



Grid (Time=1.4167e-02)
Crank Angle=660.00(deg)

FLUENT 6.3 (2d, dp, pbns, dynamic, ske, unsteady) May 13, 2026

Figure 31: Déformation du maillage durant le déplacement du piston

Interprétation

Les résultats montrent que les techniques de Layering et Smoothing permettent de maintenir une bonne qualité du maillage malgré les importantes déformations géométriques provoquées par le déplacement du piston.

Aucune cellule négative ou distorsion excessive n'a été observée durant la simulation, ce qui confirme la stabilité du modèle dynamique utilisé.

5.2.2 Analyse des contours de pression

Les contours de pression obtenus montrent une augmentation progressive de la pression à l'intérieur du cylindre pendant la montée du piston.

Les valeurs maximales de pression apparaissent principalement dans la région centrale de la chambre de combustion à proximité du PMH.

Cette augmentation est directement liée à la réduction du volume du cylindre sous l'effet du mouvement dynamique du piston.

Présentation des résultats

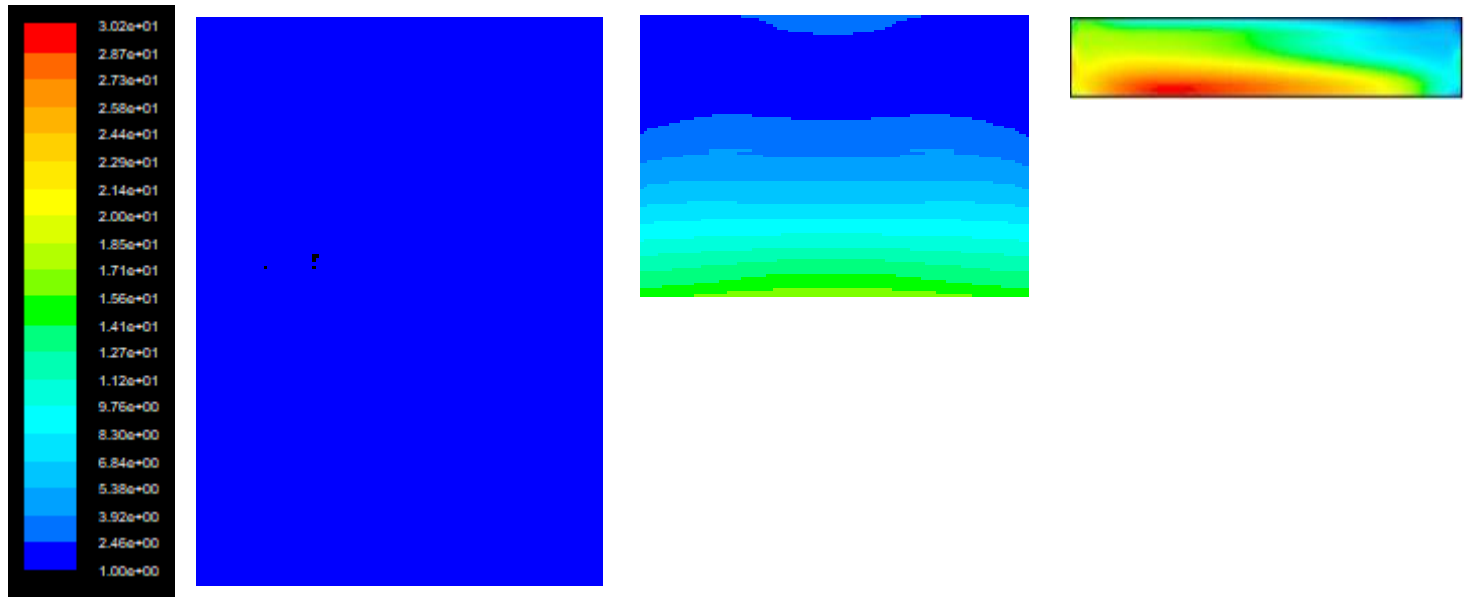


Figure 32: Contours de pression dans le cylindre sans combustion

Analyse physique

Analyse physique et phénoménologique des étapes :

- **a) Phase initiale de compression (Avant le PMH) :** À cette étape, le piston entame sa course ascendante depuis le Point Mort Bas (PMB). Le volume de la chambre est maximal. La pression est encore basse et uniformément répartie (zone bleue). Le maillage dynamique gère parfaitement la réduction de volume en comprimant les cellules (couronnes de maillage) de manière fluide et sans distorsion géométrique.
- **b) Phase de compression intermédiaire :**

Au fur et à mesure que le piston monte, l'espace se restreint. Le travail mécanique fourni par le piston se traduit par une élévation progressive de la pression globale (transition vers le vert/jaune). On observe une homogénéité spatiale parfaite de la pression, ce qui confirme l'absence de gradients de pression locaux indésirables, un comportement typique d'une compression polytropique idéale.

- **c) Point Mort Haut (PMH /180⁰CAD) - Pression Maximale :**

C'est le point critique où le volume de la chambre est minimal (Volume mort / *Clearance volume*). La pression atteint son paroxysme. Le maillage est ici au maximum de sa compression. La capture nette de ce pic prouve que le solveur d'ANSYS Fluent gère de

manière stable le pas de temps (*Time step*) et préserve la conservation stricte de la masse d'air comprimée.

- **d) Phase de détente (Après le PMH) :**

Après le passage du PMH, le piston redescend, augmentant ainsi le volume disponible. La pression chute immédiatement (retour vers les zones vertes/bleues) car le gaz subit une expansion thermodynamique. Le maillage dynamique réagit instantanément en étirant les cellules (ou en reconstruisant les couches d'éléments selon la méthode de *Layering/Remeshing*) de façon totalement stable.

Courbe de pression

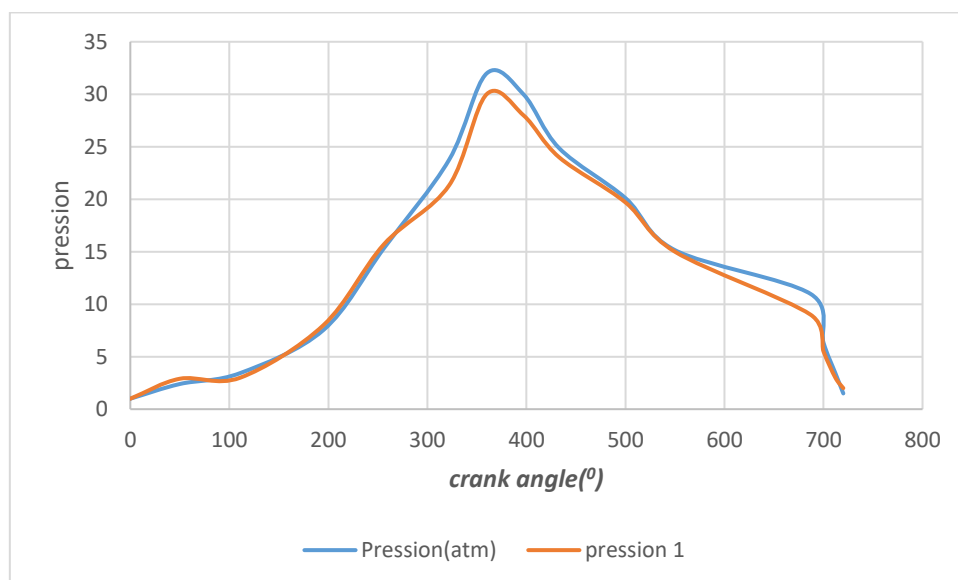


Figure 33: Évolution de la pression en fonction du crank angle

Interprétation de la courbe

Ce graphe représente l'évolution de la pression interne du cylindre en fonction de l'angle du vilebrequin ($^{\circ}\text{CA}$) pour un cycle moteur sans combustion (mélange inerte/air uniquement).

- **Phase de compression (0° à 360°) :** On observe une augmentation progressive de la pression qui atteint son maximum au voisinage du Point Mort Haut (PMH) à 360° . La pression maximale atteinte est d'environ **32 atm**, ce qui résulte uniquement du travail de compression mécanique exercé par le piston sur l'air.

- **Pic de pression au PMH :** L'absence de pic brutal ou de saut de pression à 360° confirme qu'il n'y a pas de dégagement de chaleur (pas de combustion). La courbe est lisse et symétrique par rapport au PMH (hors pertes thermiques aux parois).
- **Phase de détente (360° à 720°) :** Après le PMH, la pression chute au fur et à mesure que le piston descend vers le Point Mort Bas (PMB). Les légères inflexions observées en fin de détente (vers 700°) correspondent à l'ouverture des soupapes d'échappement.

Ce profil de pression sert de référence (**Base case**) pour valider le comportement dynamique du maillage et l'étanchéité numérique du modèle avant d'introduire la cinétique chimique de la combustion.

Validation du modèle dynamique : Analyse de la pression motrice (sans combustion) :

La Figure présente la validation du modèle numérique bidimensionnel (2D) développé sous ANSYS Fluent. Cette validation a été réalisée par comparaison du profil de pression 1 obtenu lors d'un cycle motorisé (sans combustion et avec injection d'air uniquement) avec les résultats de référence disponibles dans la littérature.

Malgré les hypothèses simplificatrices adoptées dans la simulation, notamment l'utilisation de modèles numériques pour représenter les phénomènes d'écoulement et les propriétés thermodynamiques du fluide, les résultats obtenus montrent un bon accord avec les données de référence. L'évolution de la pression au cours du cycle ainsi que les valeurs caractéristiques observées présentent des tendances similaires à celles rapportées dans les travaux expérimentaux et numériques de la littérature.

Cette concordance indique que le modèle est capable de reproduire correctement les principaux phénomènes physiques intervenant dans le cylindre. Les écarts éventuellement observés peuvent être attribués aux simplifications de modélisation, aux conditions aux limites adoptées et aux différences entre les hypothèses de calcul et les conditions réelles. Néanmoins, les résultats obtenus sont jugés suffisamment satisfaisants pour valider l'approche numérique retenue et servir de base à l'étude du processus de combustion réactive. (Heywood, 1988)

5.2.3 Analyse des contours de température

Les contours thermiques montrent une augmentation progressive de la température de l'air comprimé pendant le déplacement du piston.

Cette élévation thermique résulte principalement du travail mécanique de compression exercé par le piston sur le fluide.

Les températures les plus élevées sont observées dans les zones fortement comprimées situées près du centre du cylindre.

Présentation des résultats

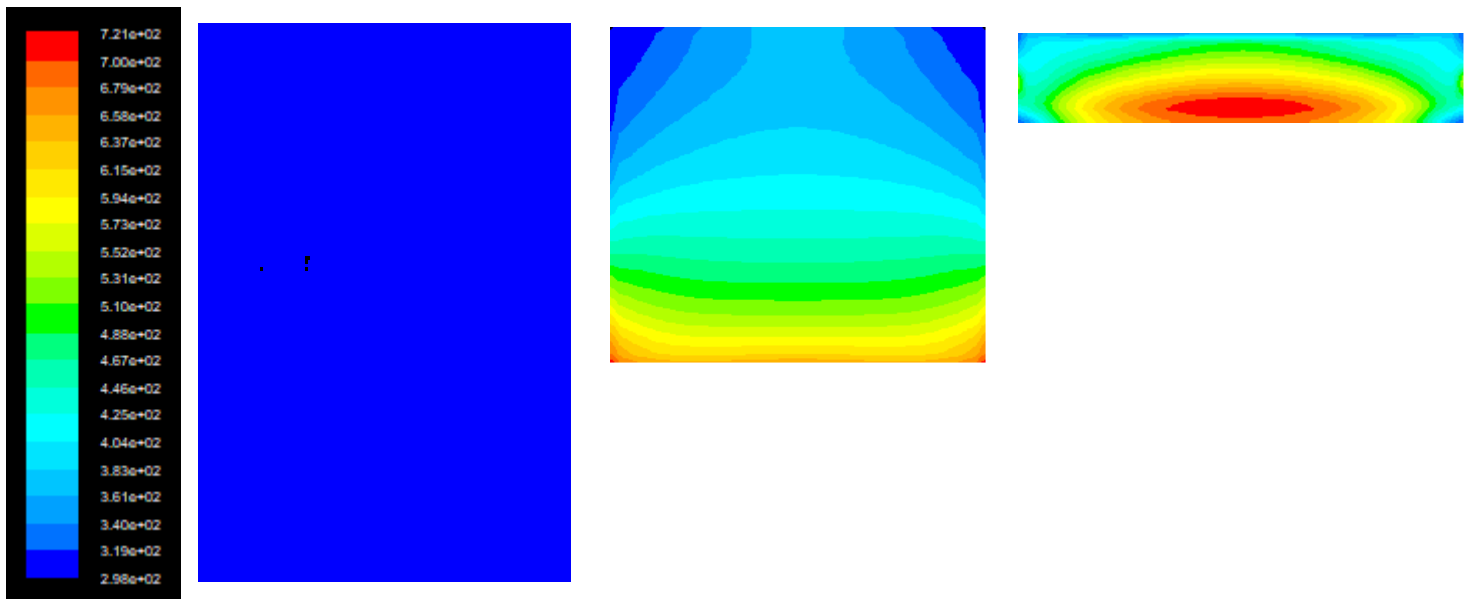


Figure 34: Contours de température dans le cylindre sans combustion

Analyse thermique

- **Effet de la compression polytropique** : Durant la course ascendante du piston (de 0^0 à 180^0 CAD), le volume de la chambre diminue drastiquement, ce qui provoque un travail de compression sur la masse d'air. D'un point de vue thermodynamique, ce travail mécanique se transforme intégralement en énergie interne, entraînant une hausse monotone et rapide de la température.
- **Atteinte des conditions d'auto-inflammation** : La température atteint son maximum absolu au Point Mort Haut (PMH à 360^0 CAD) avec une valeur d'environ **743.21K**. Cette valeur est cruciale : elle démontre que la seule compression mécanique de l'air permet de dépasser largement le seuil thermique requis pour l'activation des premières réactions chimiques d'oxydation à basse température (Cool flames) des hydrocarbures. C'est le principe fondamental qui régit le déclenchement de la combustion HCCI.
- **Phase de détente thermique** : Dès que le piston amorce sa descente (après 360^0 CAD), l'expansion volumétrique stabilise puis détend le gaz. La température chute de

manière rigoureusement symétrique, validant à nouveau la précision du solveur thermique d'ANSYS Fluent et l'absence de pertes thermiques numériques incohérentes aux parois.

Courbe de température

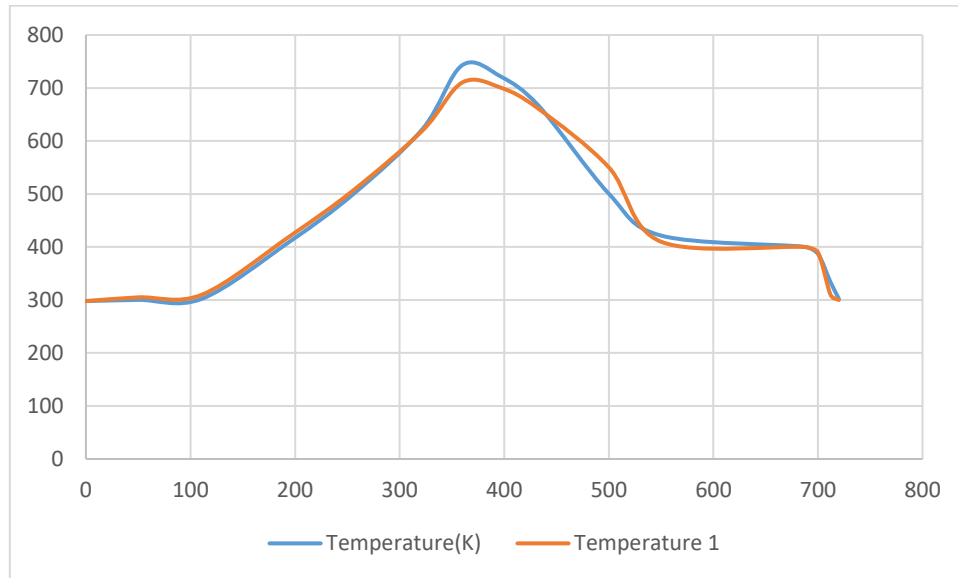


Figure 35: Évolution de la température en crank angle

Interprétation thermique

Ce graphique illustre l'évolution de la température moyenne du fluide (air) au cours d'un cycle complet, en l'absence de combustion.

- **Phase de compression (0° à 360°) :** La température augmente de manière quasi-adiabatique sous l'effet de la réduction du volume par le piston. Partant d'une température initiale de **300 K**, elle atteint un maximum d'environ **750 K** au Point Mort Haut (PMH - 360°). Cette élévation thermique est purement due au travail de compression mécanique.
- **Point Mort Haut (360°) :** Le pic de température coïncide avec le pic de pression. On remarque que la courbe est lisse, ce qui confirme l'absence de tout dégagement de chaleur chimique (combustion).
- **Phase de détente (360° à 720°) :** Une chute progressive de la température est observée suite à l'expansion du gaz et au travail fourni au piston. La stabilisation relative de la

température vers la fin du cycle (entre 550° et 750°) $T_{\max}=743.21K$ avant l'échappement reflète les échanges thermiques avec les parois du cylindre.

Ce profil thermique est crucial pour valider le modèle thermodynamique de base et s'assurer que les conditions de pression et de température au moment de l'injection future seront réalistes.

Synthèse de la validation thermo-mécanique :

Les profils de température obtenus au cours du cycle moteur mettent en évidence une évolution cohérente avec les phénomènes physiques attendus lors des phases de compression, de combustion et de détente. Malgré les hypothèses simplificatrices adoptées dans la modélisation, notamment la représentation du mélange gazeux comme un gaz parfait ainsi que l'utilisation de modèles numériques pour décrire les transferts thermiques et l'écoulement turbulent, les résultats obtenus reproduisent les tendances généralement observées dans la littérature.

La cohérence de l'évolution thermique calculée avec les comportements thermodynamiques attendus constitue un indicateur de la capacité du modèle à représenter correctement les principaux mécanismes intervenant dans le cylindre. Ainsi, ces résultats apportent un élément de validation du modèle numérique et permettent son utilisation comme base pour l'étude des phénomènes réactifs et l'intégration des modèles de combustion dans les simulations ultérieures. (Heywood, 1988) (Turns, An introduction to combustion: concepts and applications, 2012)

5.2.3 Évolution de la densité en fonction du crank angle

L'analyse des résultats montre une augmentation progressive de la densité du fluide durant le déplacement du piston.

Cette évolution est directement liée à la réduction du volume interne du cylindre pendant la compression.

À mesure que le piston se rapproche du point mort haut, les particules du fluide deviennent plus concentrées, entraînant ainsi une augmentation de la densité.

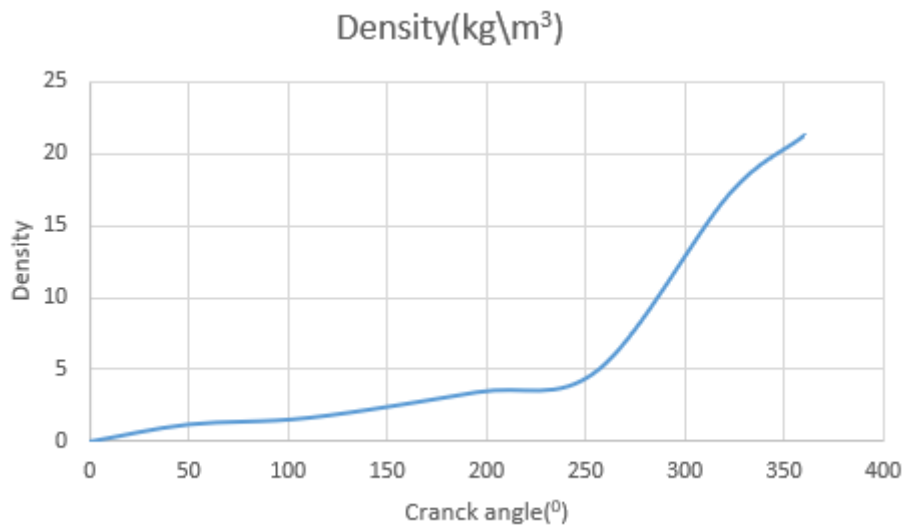


Figure 36: Variation de la densité en fonction du crank angle

Interprétation des résultats

Ce graphe illustre l'évolution de la densité (masse volumique) de l'air à l'intérieur du cylindre en fonction de l'angle du vilebrequin lors de la phase de compression.

- **De 0° à 250° :** On remarque une augmentation lente et progressive de la densité. À mesure que le piston remonte, le volume disponible diminue, ce qui entraîne une compression de la masse d'air emprisonnée.
- **De 250° à 360° :** La courbe affiche une pente beaucoup plus raide. L'augmentation de la densité s'accélère fortement à l'approche du Point Mort Haut (PMH), atteignant une valeur maximale d'environ **21 kg/m³** à 360°. Cette valeur élevée est caractéristique des moteurs à haut rapport de compression.
- **Validation thermodynamique :** Cette évolution est en parfaite corrélation avec les augmentations de pression et de température observées précédemment. Conformément à la loi des gaz parfaits ($P = \rho RT$), la densité augmente proportionnellement à la pression lors de la réduction du volume.

Cette caractérisation de la densité est fondamentale pour l'étude de l'injection, car elle influence directement la pénétration du jet de carburant et la qualité du mélange air-carburant.

5.2.4 Influence du maillage dynamique sur la stabilité numérique

Le maillage dynamique joue un rôle essentiel dans la stabilité des calculs transitoires.

Les techniques de Layering et Smoothing permettent :

- d'éviter la déformation excessive des cellules ;
- de maintenir une bonne qualité du maillage ;
- d'améliorer la convergence numérique ;
- de réduire les erreurs de calcul.

Conclusion

Dans cette partie, une étude numérique du cycle moteur a été réalisée à l'aide du logiciel ANSYS Fluent en utilisant un maillage dynamique permettant de reproduire le mouvement réel du piston et la variation du volume du cylindre au cours du cycle. Cette approche a permis d'analyser l'évolution des principaux paramètres thermodynamiques tels que la pression, la température, la vitesse des gaz ainsi que la densité du mélange.

Les résultats obtenus mettent en évidence des tendances cohérentes avec les différentes phases du cycle moteur, notamment la compression, la combustion et la détente. L'analyse de ces grandeurs a permis de mieux comprendre l'influence de la combustion sur le comportement de l'écoulement à l'intérieur de la chambre.

Il convient toutefois de rappeler que cette étude repose sur plusieurs hypothèses simplificatrices, notamment la considération des gaz comme parfaits, l'utilisation d'une réaction globale pour décrire la combustion ainsi que le recours à des modèles numériques pour la turbulence et les transferts thermiques. Par conséquent, les résultats obtenus doivent être interprétés comme une représentation approchée du phénomène réel.

Malgré ces approximations, la méthodologie adoptée a permis d'obtenir des résultats physiquement plausibles et de valider le comportement global du modèle numérique. Cette étape constitue ainsi une base solide pour l'étude détaillée de la combustion et des phénomènes réactifs dans le moteur HCCI.

5.3 Étude réactive avec injection du iso-octane et combustion dynamique

Introduction

Cette partie présente les résultats obtenus lors de la simulation réactive réalisée sous ANSYS Fluent avec déplacement dynamique du piston et injection du n-octane dans la chambre de combustion.

Chapitre 5 : Résultats et interprétation

L'objectif principal de cette étude consiste à analyser l'évolution des principaux paramètres thermodynamiques durant la combustion du mélange réactif.

La simulation prend en compte :

- le mouvement dynamique du piston ;
- l'injection du iso-octane ;
- la compression du mélange ;
- les réactions chimiques de combustion.

Le système étudié repose sur une stratégie de quatre injections successives du carburant afin d'améliorer l'homogénéité du mélange et la stabilité de la combustion.

L'analyse porte principalement sur :

- la pression ;
- la température ;
- la Vitesse ;
- Emission NOx

en fonction du crank angle durant la compression et la combustion.

5.3.1 Analyse de la pression durant la combustion

Dans cette partie, nous nous intéressons à l'évolution de la pression dans la chambre de combustion en fonction de l'angle de vilebrequin (Crank Angle). La pression constitue l'un des paramètres thermodynamiques les plus importants pour caractériser le fonctionnement du moteur, puisqu'elle reflète directement les effets de la compression du mélange, du déclenchement de la combustion et de la détente des gaz brûlés.

L'analyse de son évolution au cours du cycle permet d'identifier les différentes phases du fonctionnement du moteur et d'évaluer l'influence des phénomènes thermiques et chimiques sur les performances de la chambre de combustion. Les résultats obtenus à partir de la simulation CFD seront ainsi examinés afin de mettre en évidence les variations de pression associées aux différentes étapes du cycle moteur.

Présentation des résultats

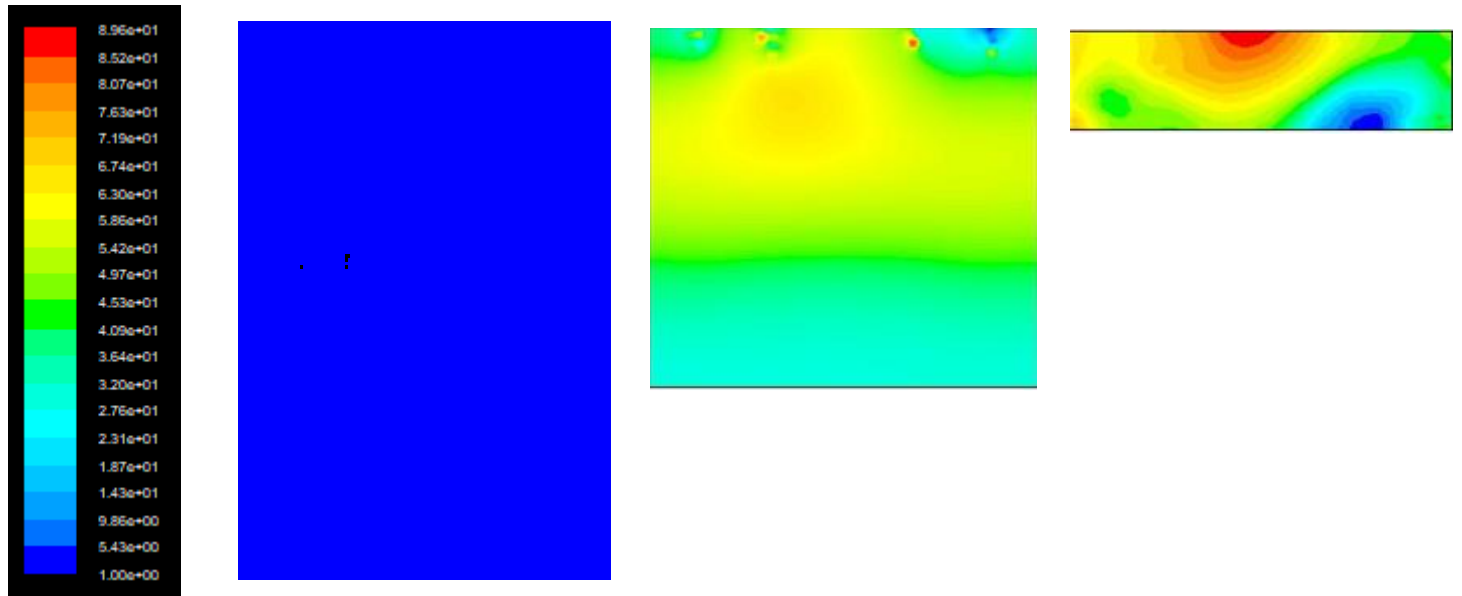


Figure 37: Contours de pression durant la combustion du iso-octane

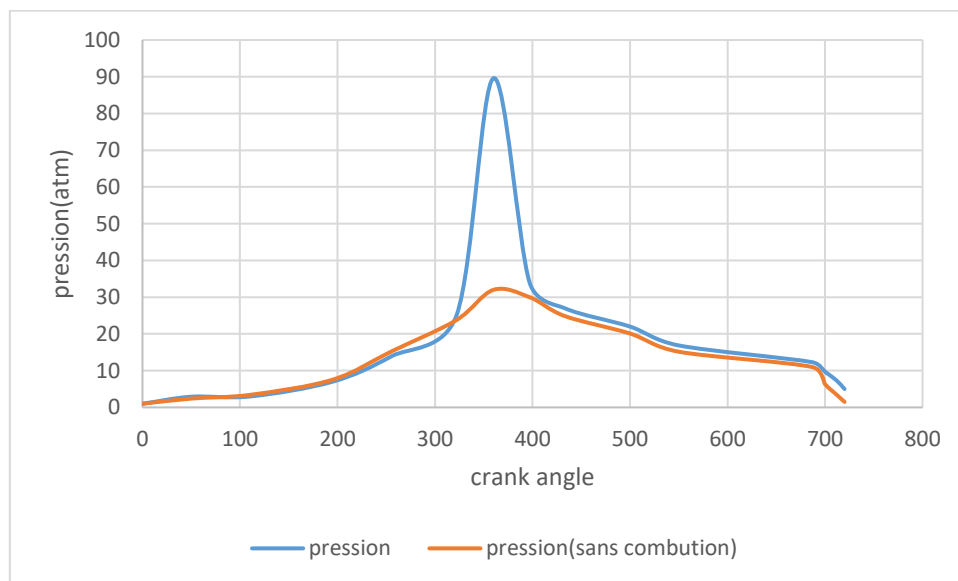


Figure 38 : Variation de la pression en fonction du crank angle

Interprétation physique

La courbe précédente représente l'évolution de la pression dans la chambre de combustion en fonction de l'angle de vilebrequin (Crank Angle) durant les phases de compression, de combustion et de détente du mélange iso-octane/air.

Les résultats obtenus montrent une augmentation progressive de la pression au cours de la phase de compression sous l'effet de la réduction du volume du cylindre provoquée par la montée du piston. Entre 0° et environ 300° CA, la pression croît de manière relativement régulière en raison de la compression du mélange gazeux.

À l'approche du point mort haut (PMH), une augmentation beaucoup plus rapide de la pression est observée, conduisant à une valeur maximale d'environ 90 atm. Cette hausse importante est associée à l'auto-inflammation du mélange et à la libération d'énergie résultant de la réaction de combustion de l'iso-octane.

Après l'apparition du pic de pression, une diminution progressive est observée. Cette évolution s'explique par l'expansion des gaz de combustion, l'augmentation du volume du cylindre ainsi que par le mouvement descendant du piston durant la phase de détente.

Il convient de noter que les résultats présentés ont été obtenus en s'appuyant sur plusieurs hypothèses de modélisation. Le mélange gazeux a été assimilé à un gaz parfait et la combustion de l'iso-octane a été décrite par une réaction globale simplifiée. De plus, les phénomènes de turbulence, les transferts thermiques et l'interaction entre les différentes phases ont été représentés à l'aide de modèles numériques. Dans ce cadre, le profil de pression obtenu constitue une estimation du comportement réel du moteur et permet de mettre en évidence les principales tendances thermodynamiques liées à la compression, à la combustion et à la détente des gaz.

5.3.2 Analyse de la température durant la combustion

Les contours thermiques obtenus montrent une augmentation importante de la température dans la chambre après le déclenchement des réactions chimiques.

Les températures maximales apparaissent principalement dans les régions où la concentration du mélange combustible est plus importante.

L'élévation thermique observée est principalement due :

- à la combustion du iso-octane ;
- à la compression du mélange ;
- aux échanges énergétiques internes.

Chapitre 5 : Résultats et interprétation

Les gradients thermiques deviennent plus importants après l'inflammation en raison de la propagation des zones chaudes dans le cylindre.

Présentation des résultats



Figure 39: Contours de température durant la combustion

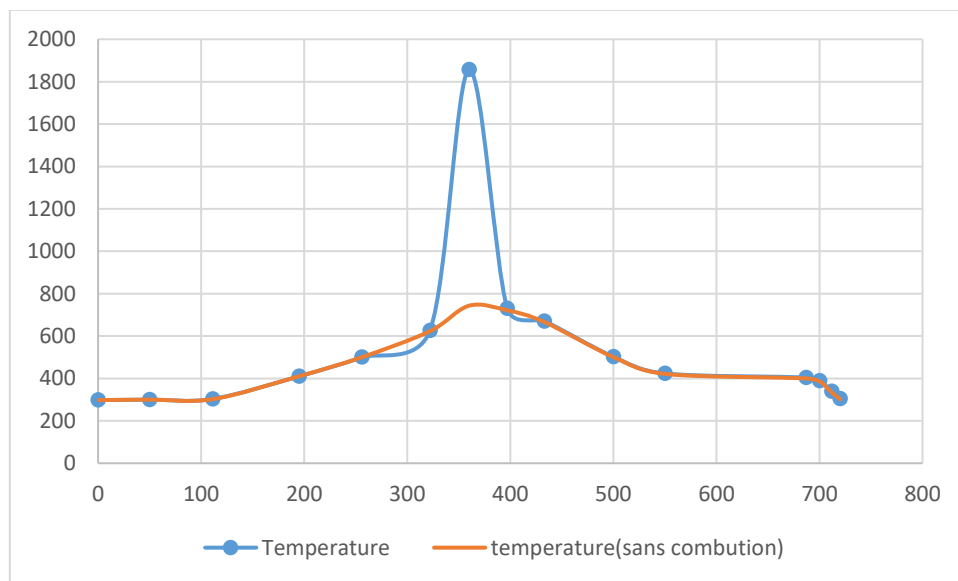


Figure 40: Variation de la température en fonction du crank angle

Analyse thermique

Ce graphe présente l'évolution de la température moyenne des gaz au cours d'un cycle moteur avec injection directe d'iso-octane. Le profil thermique obtenu met en évidence trois phases principales.

- Phase de compression et d'évaporation (0° à 340° CA) : la température augmente progressivement sous l'effet de la compression du mélange dans le cylindre. Une légère modification de la pente est observée avant le pic thermique, ce qui peut être attribué à l'évaporation du carburant injecté et à l'absorption de la chaleur latente de vaporisation.
- Phase de combustion intense (350° à 360° CA) : une augmentation rapide de la température est observée jusqu'à atteindre une valeur maximale d'environ 1850 K. Cette élévation est associée au déclenchement de l'auto-inflammation et à la libération de l'énergie chimique issue de la combustion de l'iso-octane.
- Phase de détente et de refroidissement (360° à 720° CA) : après le maximum thermique, la température diminue sous l'effet de l'expansion des gaz de combustion. Une transition est observée vers 420° CA, correspondant à la fin de la phase principale de combustion, suivie d'une décroissance progressive de la température.

Il convient de souligner que ces résultats ont été obtenus dans le cadre des hypothèses retenues pour la simulation numérique. Le mélange gazeux a été assimilé à un gaz parfait, la combustion a été décrite par une réaction globale d'oxydation de l'iso-octane, et les phénomènes de turbulence, de transfert thermique et d'interaction gouttelettes-gaz ont été modélisés à l'aide des modèles disponibles dans le solveur CFD. Ainsi, les profils de température présentés reflètent le comportement du système tel qu'il est prédit par ces approximations et permettent d'analyser l'influence de l'injection, de l'évaporation et de la combustion sur l'évolution thermique dans le cylindre.

5.3.3 Analyse de la vitesse durant la combustion

Le contour de la magnitude de la vitesse met en évidence une forte hétérogénéité de l'écoulement au sein de la géométrie à un angle de vilebrequin de 357.57° . On observe la formation de deux zones à haute vitesse cinétique atteignant un pic de 8.88 m/s près des parois horizontales, caractéristiques des mouvements de grandes structures tourbillonnantes. À l'inverse, le centre du domaine et les parois latérales présentent des zones de stagnation (vitesse proche de 0 m/s), induites par la condition de non-glissement aux parois et les centres de vortex. Cette distribution spatiale de la vitesse, modélisée par l'approche RNG $k - \varepsilon$, aura un impact direct sur le transport des espèces et la structure thermique locale avant l'auto-inflammation.

Présentation des résultats

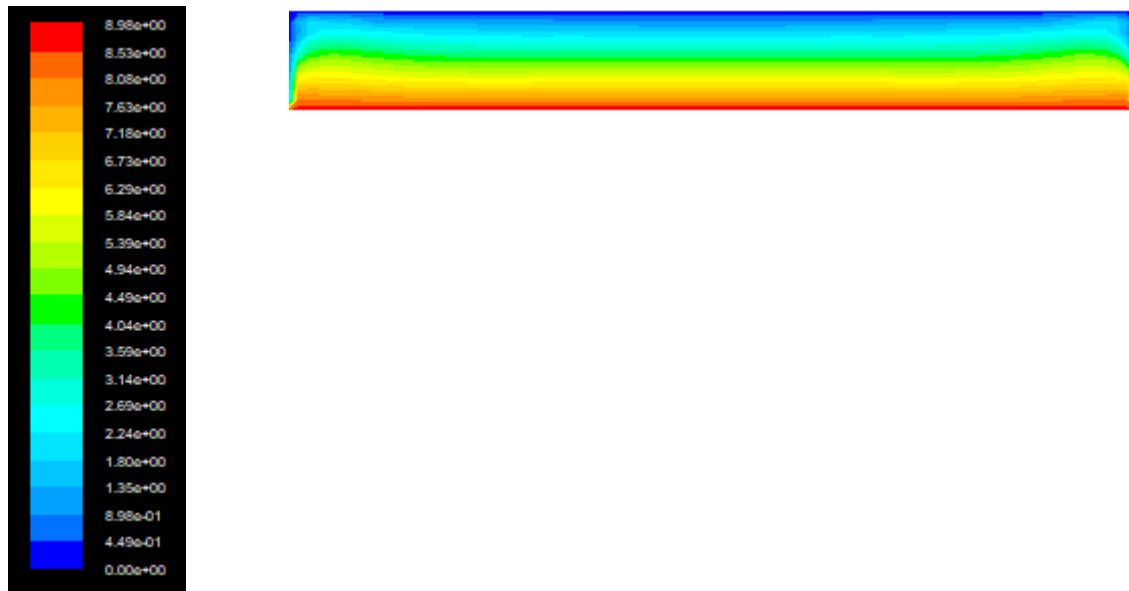


Figure 41: Contour de vitesse durant la combustion

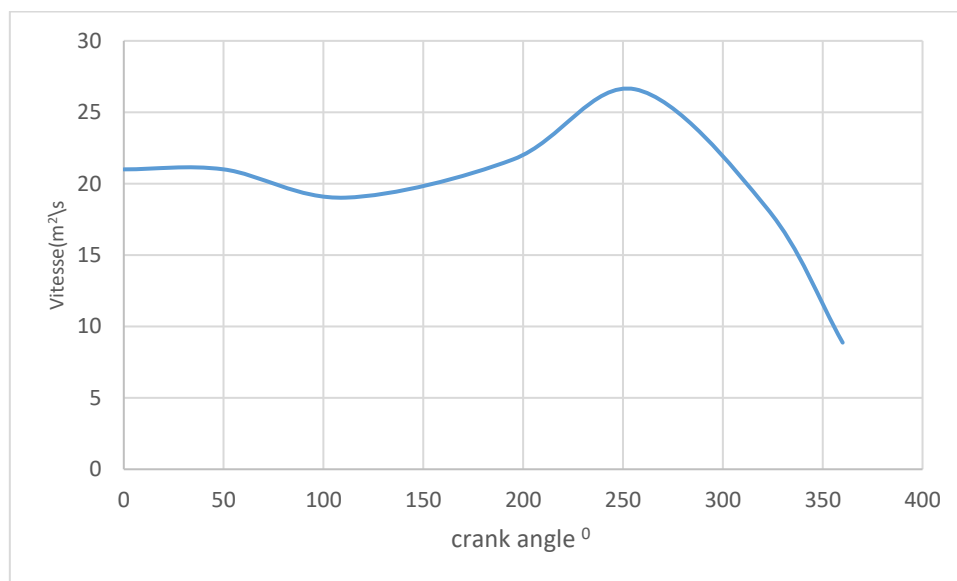


Figure 42: Variation de la vitesse en fonction du crank angle

Interprétation des résultats

La figure représente l'évolution de la vitesse en fonction de l'angle de vilebrequin dans la chambre de combustion durant le mouvement du piston. On observe que la vitesse présente une légère diminution entre 0° et environ 100° de l'angle de vilebrequin. Cette diminution peut être expliquée par l'augmentation progressive de la pression à l'intérieur du cylindre lors de la phase

de compression. En effet, l'élévation de la pression entraîne une réduction locale de la vitesse de l'écoulement.

Par la suite, la vitesse augmente progressivement pour atteindre une valeur maximale d'environ 26 m/s autour de 250°. Cette augmentation est principalement due au déplacement du piston ainsi qu'aux variations dynamiques de pression et de volume dans la chambre de combustion.

Après cette phase, une chute importante de la vitesse est observée jusqu'à la fin du cycle. Cette diminution est liée à la réduction du mouvement du fluide ainsi qu'à la dissipation progressive de l'énergie cinétique à l'intérieur du cylindre.

Les résultats obtenus restent globalement cohérents avec le comportement physique attendu dans un moteur à combustion interne. Toutefois, ces résultats ne peuvent pas être considérés comme parfaitement exacts en raison de certaines hypothèses simplificatrices utilisées dans la simulation numérique, notamment l'hypothèse du gaz parfait ainsi que l'utilisation du maillage dynamique (Dynamic Mesh), pouvant engendrer certaines approximations numériques au cours du calcul.

5.3.4 Analyse globale de la combustion

L'analyse des différents paramètres thermodynamiques met en évidence l'influence significative du phénomène de combustion sur l'évolution du mélange air-carburant à l'intérieur du cylindre. Les résultats obtenus montrent une augmentation rapide de la pression après l'auto-inflammation du mélange, accompagnée d'une élévation importante de la température due à la libération d'énergie chimique. Par ailleurs, l'évolution de la vitesse des gaz traduit les effets combinés de la compression du mélange et de l'expansion des produits de combustion.

La stratégie d'injection multiple à cinq injections contribue à améliorer l'homogénéité du mélange, à stabiliser le processus de combustion et à assurer une meilleure répartition thermique dans la chambre de combustion. Ces caractéristiques favorisent une combustion plus efficace et plus régulière.

Il convient toutefois de noter que les résultats présentés reposent sur certaines hypothèses simplificatrices adoptées dans le modèle numérique. En particulier, les gaz sont considérés comme des gaz parfaits, la cinétique chimique est représentée par une réaction globale unique, et la turbulence ainsi que les échanges thermiques sont décrits à l'aide de modèles de fermeture

adaptés. Malgré ces approximations, les tendances observées restent cohérentes avec le comportement physique attendu d'un moteur à allumage par compression et confirment la pertinence du modèle réactif utilisé dans cette simulation CFD.

5.3.5 Évaluation et quantification des émissions de Nox

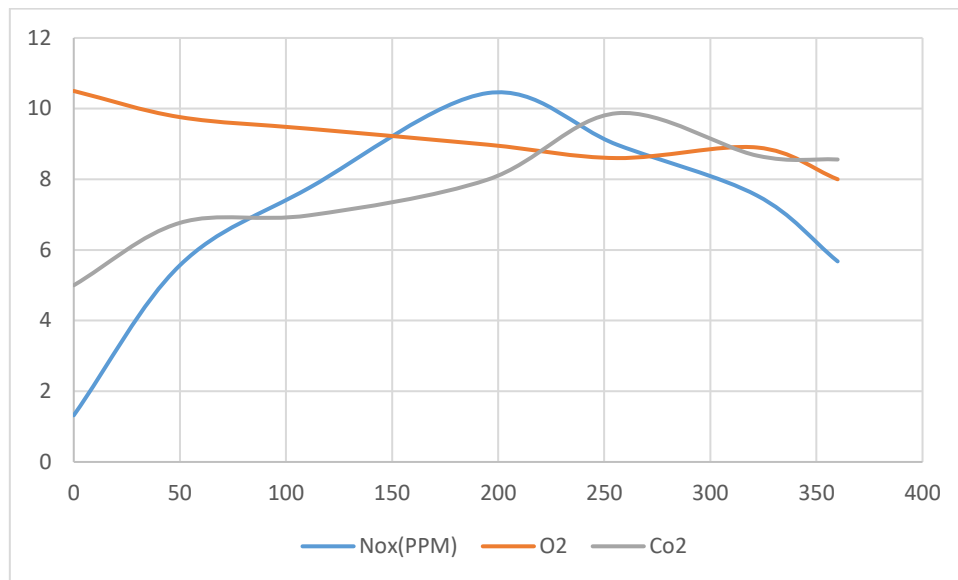


Figure 43 Variation de l'émission NOx en fonction de l'angle de manivelle

Interprétation des résultats

La figure présente l'évolution des émissions de NOx ainsi que des fractions d'oxygène (O₂) et de dioxyde de carbone (CO₂) au cours du processus de combustion.

On observe que la concentration de NOx augmente progressivement depuis le début de la combustion pour atteindre une valeur maximale d'environ **10 ppm** vers la position 200. Cette augmentation est principalement liée à l'élévation de la température dans la chambre de combustion, favorisant la formation des oxydes d'azote. Après ce maximum, une diminution progressive des NOx est observée jusqu'à environ **6 ppm**, ce qui s'explique par la baisse de la température et l'achèvement progressif des réactions chimiques.

Parallèlement, la concentration d'oxygène diminue continuellement de **10,5 % à environ 8 %**, traduisant sa consommation durant les réactions de combustion. Cette diminution confirme que l'oxygène participe activement à l'oxydation du carburant.

Concernant le CO₂, sa concentration augmente progressivement depuis **5 %** jusqu'à une valeur proche de **10 %**, ce qui correspond à la formation des produits de combustion. Après avoir

atteint son maximum, une légère diminution est observée, indiquant la fin de la phase principale de combustion et la dilution des gaz brûlés.

Il convient de souligner que ces résultats ont été obtenus en utilisant plusieurs hypothèses simplificatrices, notamment :

- le modèle de **gaz parfait** ;
- le modèle de **réaction globale (Global Reaction)** ;
- certaines approximations numériques destinées à réduire le temps de calcul.

Ces hypothèses permettent de reproduire correctement les tendances générales du phénomène de combustion. Toutefois, les valeurs obtenues doivent être considérées comme des estimations, car la réaction globale ne décrit pas l'ensemble des mécanismes cinétiques détaillés responsables de la formation des polluants, en particulier les NO_x. Malgré ces limitations, les résultats restent cohérents avec le comportement physique attendu d'une combustion HCCI alimentée par l'iso-octane.

Conclusion

Cette étude réactive a permis d'analyser l'évolution des paramètres thermodynamiques durant la combustion dynamique du iso-octane dans une chambre équipée d'un piston mobile.

Les résultats obtenus montrent une forte augmentation de la pression et de la température après le déclenchement de la combustion ainsi qu'une variation importante de la densité dans le cylindre.

L'analyse des contours et des courbes confirme également la cohérence physique des phénomènes simulés ainsi que la stabilité du modèle numérique utilisé sous Fluent.

Conclusion Générale

La présente étude a permis d'analyser numériquement le comportement thermodynamique et réactif d'un moteur fonctionnant en mode HCCI à travers une simulation CFD réalisée sous ANSYS Fluent.

L'objectif principal de ce travail consistait à étudier l'influence du déplacement dynamique du piston ainsi que de la combustion du n-octane sur l'évolution des principaux paramètres thermodynamiques dans la chambre de combustion.

Dans un premier temps, une étude bibliographique détaillée a permis de présenter les principes fondamentaux des moteurs HCCI, les mécanismes d'auto-inflammation ainsi que les différentes stratégies de contrôle de la combustion. Cette analyse théorique a montré que la combustion HCCI représente une technologie prometteuse grâce à son rendement thermique élevé et à sa faible production d'émissions polluantes.

La deuxième partie du travail a été consacrée à la mise en œuvre de la méthodologie numérique. Une attention particulière a été portée à la qualité du maillage ainsi qu'à la configuration des modèles physiques et chimiques sous Fluent. Le domaine de calcul a été discrétisé à l'aide d'un maillage structuré raffiné afin d'améliorer la précision des résultats numériques.

Le mouvement du piston a été reproduit grâce à la technique du maillage dynamique utilisant les méthodes Layering et Smoothing, permettant de conserver une bonne qualité du maillage malgré les importantes déformations géométriques observées durant le cycle moteur.

Le modèle de combustion adopté repose sur une approche Finite Rate permettant de prendre en compte la cinétique chimique des réactions du n-octane avec l'oxygène. Ce choix méthodologique s'est révélé particulièrement adapté aux simulations HCCI où les phénomènes chimiques jouent un rôle dominant dans le déclenchement de l'auto-inflammation.

Les résultats obtenus ont montré une évolution cohérente de la pression, de la température et de la densité durant les différentes phases de compression et de combustion. La montée du piston provoque une réduction progressive du volume interne du cylindre, entraînant une augmentation importante de la pression et de la température avant l'auto-inflammation du mélange.

Après l'injection du iso-octane et le déclenchement des réactions chimiques, une forte augmentation de la pression a été observée avec des pics atteignant environ 90 bar, ce qui reste cohérent avec les résultats rapportés dans la littérature scientifique.

L'analyse des contours thermiques a également montré une augmentation importante de la température dans les zones fortement réactives de la chambre de combustion, confirmant le bon déroulement des réactions chimiques durant la combustion HCCI.

Les différentes comparaisons réalisées avec les travaux scientifiques disponibles dans la littérature ont permis de valider la cohérence physique des résultats obtenus ainsi que la fiabilité du modèle numérique développé.

Enfin, cette étude a permis de mettre en évidence l'importance de la méthodologie numérique dans les simulations CFD des moteurs HCCI. Le choix du maillage, des modèles physiques, des paramètres numériques ainsi que des conditions aux limites influence directement la stabilité et la précision des résultats obtenus.

Ce travail ouvre également plusieurs perspectives intéressantes pour de futures recherches, notamment :

- l'étude des émissions polluantes ;
- l'optimisation du timing d'injection ;
- l'utilisation d'autres carburants alternatifs ;
- l'intégration de modèles chimiques plus complexes ;
- l'analyse tridimensionnelle des phénomènes de combustion.

En conclusion, les résultats obtenus confirment que la simulation CFD constitue un outil puissant pour l'analyse et l'optimisation des moteurs HCCI, permettant une meilleure compréhension des phénomènes thermodynamiques et chimiques intervenant dans la combustion moderne

Bibliography

1. Agarwal, A. K. (2007). Biofuels (alcohols and biodiesel) applications as fuels for internal combustion engines. *Progress in Energy and Combustion Science*.
2. Agarwal, A. K. (2017). Evolution of advanced internal combustion engine technologies. *Progress in Energy and Combustion Science*.
3. Antunes, J. M., & Mikalsen, R. (2008). An experimental and numerical study of a hydrogen-fuelled free-piston engine. *International Journal of Hydrogen Energy*.
4. Aroonsrisopon, T. (2002). An experimental investigation of HCCI operating limits. *SAE Technical Paper*.
5. Christensen, M. &. (2000). Supercharged HCCI combustion with iGR and EGR. *SAE Technical Paper*.
6. Christensen, M., Johansson, B., & Amnéus, P. (1998). Supercharged HCCI combustion with iGR and EGR. *SAE Technical Paper*.
7. Dec, J. 2.–A.-i., Reitz R.D., 2., Saxena , 2., & Bedoya I.D , 2. (2009). *Advanced compression-ignition engines*.
8. Dec, J. E. (2002). A conceptual model of HCCI combustion based on laser-sheet imaging and chemical kinetics. *SAE Technical Paper*.
9. Dec, J. E. (2009). Advanced compression-ignition engines. *Understanding the in-cylinder processes*. *SAE International*.
10. Dec, J. E. (2014). Challenges of HCCI engines. *Alternative Fuels and Advanced*.
11. Eng, J. A. (2002). The effect of EGR on HCCI combustion; click and load limits. *SAE Technical Paper*.
12. Glassman, I. Y. (2014). *Combustion* (5 ed.).
13. Hairuddin, A. (2014). A review of hydrogen and natural gas as fuels for homogeneous charge compression ignition (HCCI) engines. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*.
14. Heywood, J. (1988). *Internal Combustion Engine Fundamentals*. McGraw-Hill Education.
15. Johansson, B. (2002). HCCI combustion review. *SAE Technical Paper*.
16. Johansson, B. (2002). HCCI combustion review. *SAE Technical Paper*.
17. Kalghatgi, G. (2014). Fuel/Engine interactions. *SAE International Journal of Engines*.

18. Kalghatgi, G. T. (2005). Auto-ignition quality of practical fuels and implications for fuel requirements of future SI and HCCI engines. *SAE Technical Paper*.
19. Kevrekidis, Y., Lam, C. K., & Lam, S. H. (1985). Evaluation of simplifying assumptions in chemical kinetics: The low-dimensional manifold approach. *Chemical Engineering Science*,.
20. Komninos, N. P., & Rakopoulos,. (2012). Numerical simulation of HCCI engine combustion and charge preparation: A review. *Progress in Energy and Combustion*.
21. Latusek, R., Kettner, M., & Volk, W. (2019). Experimental and numerical investigation of a highly efficient combustion process for internal combustion engines. *SAE Technical Paper*.
22. Law, C. K. (2006). *Combustion physics*. Cambridge University Press.
23. Liu, H., Yao, M., & Zhang, B. (2011). Experimental and numerical study on the effects of hydrogen enrichment on HCCI combustion. *Energy Conversion and Management*.
24. Maurya, R. K., & Agarwal, A. (2011). Experimental study of combustion and emission characteristics of ethanol fuelled HCCI engine. *Applied Energy*.
25. Moradi, J., Mirsalim, M., & Gharehghani, A. (2020). Numerical investigation on the effects of multi-stage injection and EGR strategies on RCCI engine combustion and emissions. *Applied Thermal Engineering*,.
26. Musculus, M. P. (2013). Low-temperature combustion in engines. *Progress in Energy and Combustion Science*.
27. Najt, P. M., & Foster,, D. (1983). Compression-ignited homogeneous charge combustion. *SAE Technical Paper*.
28. Onishi, S., & Shoda,, K. (1979). Active thermo-atmosphere combustion (ATAC)—A new combustion process for internal combustion engines. *SAE Technical Paper*.
29. Onorati, A. (2020). The future of internal combustion engine simulation in the era of electrification and alternative fuels. *International Journal of Engine Research*.
30. Persson, H., Hultqvist, A., Johansson, B., & Remón, A. (2007). Investigation of the influence of turbulence on HCCI combustion using high-speed chemiluminescence. *SAE Technical Paper*.
31. Poinot, T., & Veynante, D. (2012). *Theoretical and numerical combustion* (3 ed.).
32. Pope, S. B. (2000). *Turbulent flows*. Cambridge University Press.
33. Reitz, R. D. (2013). Directions in internal combustion engine research. *Combustion and Flame*.
34. Reitz, R. D. (2020). low-emission internal combustion engine combustion strategies. *Progress in Energy and Combustion Science*,.

35. Reitz, R. D., & Duraisamy, G. (2015). Review of high efficiency dual-fuel reactivity controlled compression ignition (RCCI) combustion in internal combustion engines. *Progress in Energy and Combustion Science*.
36. Saravanan, N., & Nagarajan, G. (2008). An experimental investigation on hydrogen as a dual fuel as well as sole fuel in a DI diesel engine. *International Journal of Hydrogen Energy*.
37. Saxena, S., & Bedoya, I. D., I. (2013). Fundamental phenomena affecting low temperature combustion and HCCI engines: A review. *Progress in Energy and Combustion Science*.
38. Shahbakhti, M. (2010). Experimental study of HCCI combustion timing with alternative fuels and different operating conditions. *Applied Energy*.
39. Shudo, T., & Suzuki, H. (2002). Applicability of hydrogen rich gas in HCCI engines with EGR. *SAE Technical Paper*.
40. Sjöberg, M., & Dec, J. E. (2003). Combined effects of fuel type and engine speed on intake temperature requirements and high-load limits for HCCI engines. *SAE Technical Paper*.
41. Sjöberg, M., & Dec, J. E. (2005). An investigation into lowest power limits for hydrocarbon fueled HCCI engines. *SAE Technical Paper*.
42. Sjöberg, M., & Dec, J. E. (2007). Effects of engine speed, fueling, and intake pressure on HCCI combustion of PRF80 in a DI engine. *SAE Technical Paper*.
43. Stanglmaier, R. H. (1999). Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) benefits, compromises, and future engine applications. *SAE Transactions*.
44. Tanaka, S., Ayala, F, Keck, J. C, & Heywood, J. B. (2003). A reduced chemical kinetic model for HCCI combustion of primary reference fuels in internal combustion engines. *International Journal of Engine Research*.
45. Turns, S. R. (2012). *An introduction to combustion: concepts and applications* (3 ed.).
46. Turns, S. R. (2012). *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications* (3rd ed.). McGraw-Hill.
47. Versteeg, H., & W. Malalasekera. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method* (2 ed.).
48. Yılmaz, A. C., Gümüş, M, & Atılması, S. (2010). Experimental investigation of the effects of biodiesel-diesel fuel blends on engine performance and exhaust emissions. *Energy Conversion and Management*.
49. Zheng, M., & Hawley, J. G. (2004). Diesel engine exhaust gas recirculation—a review on advanced concepts. *Energy Conversion and Management*.