

Modélisation de la formation et de la réduction des NO_x dans un moteur à charge stratifiée avec le modèle multi zone

A. Chelghoum¹, M. Kadja², T. Ouksel¹ et P. Higelin³

¹ Institut de Mécanique, Centre Universitaire Larbi Ben M'Hidi, Oum El Bouaghi, Algérie

² Laboratoire des Applications Energétiques et Pollution,
Département de Mécanique, Université des Frères Mentouri, Constantine, Algérie

³ Laboratoire de Mécanique et d'Energétique
de l'Ecole Polytechnique, Université d'Orléans, France

Résumé - Le modèle multi zone est utilisé pour l'étude du processus de combustion et la formation de l'oxyde d'azote dans un moteur à allumage commandé. Afin de réduire la quantité d'oxyde d'azote formée, la solution proposée est le moteur à charge stratifiée. Il commence par l'utilisation de l'approche de Wiebe pour décrire le dégagement de chaleur durant la phase de combustion. Pour calculer la concentration des espèces dans les gaz d'échappement, un schéma d'équilibre chimique est utilisé pour le système C - H - O - N des espèces considérés. Ainsi les résultats théoriques des deux types de moteurs, à savoir: moteur à charge homogène et moteur à charge stratifiée issus de ce modèle sont comparés avec ceux mesurés.

Abstract - Modelling of the combustion process and the nitric oxide formation in spark ignition engines (SIE) is based on the multi-zone approach. In order to reduce the quantity of nitric oxide, the proposed approach considers the stratified charge engine. Firstly, the Wiebe method is used for the description of the heat loss during the combustion phase. Then, chemistry equilibrium is used for the C - H - O - N system leading to the computation of the species concentration in the exhaust gas. Theoretical results of two types of engines, based on stratified charge and on homogeneous charge, are compared to the experimental results.

Mots clés: Moteur - Allumage commandé à charge stratifiée - Oxyde d'azote - Modèle multi zones.

1. INTRODUCTION

La préoccupation des chercheurs dans le domaine des moteurs depuis quelques années est d'arriver à réduire la toxicité des gaz d'échappement des moteurs à un niveau suffisamment bas. La plupart des solutions proposées mènent à admettre un rendement thermique moyen relativement réduit.

Il est donc logique de penser si on pouvait trouver une solution qui serait plus acceptable que celles qui sont actuellement connues, aussi bien du point de vue de la dépense d'énergie que de l'élimination des composés toxiques dans les gaz d'échappement dans les moteurs à combustion interne.

La solution proposée est le moteur à charge stratifiée dont la phase de combustion se produit en deux étapes différentes. L'une de petit volume (préchambre) comporte un mélange très riche de coefficient d'excès d'air local $\alpha_1 \ll 1$, tandis que l'autre occupant le reste de la chambre de combustion (chambre principale), comporte un mélange très pauvre formé d'air et des gaz brûlés de la première combustion de coefficient d'excès d'air local $\alpha_2 \gg 1$, [1].

2. STRATIFICATION

Ce moteur (Fig. 1) est caractérisé par le taux de stratification de la charge (a), qui est défini par le rapport du volume V_{mr} du mélange riche, de coefficient d'excès d'air local $\alpha_1 \ll 1$ au volume total V_{mm} du mélange moteur de coefficient d'excès d'air $\alpha_2 \gg 1$, [1].

$$a = \frac{V_{mr}}{V_{mm}} \quad (1)$$

Ce coefficient atteint sa valeur maximale quand:

$$V_{mr} = (V_{mr})_{\max}$$

$$\text{Où } (V_{mr})_{\max} = N_{mr} \frac{RT}{P} \text{ et } (V_{mm}) = N_{mm} \frac{RT}{P}$$

Les nombres de moles du mélange riche et du mélange moteur sont appréciés par:

$$N_{mr} = \left(\alpha_1 L_0 + \frac{1}{M_c} \right) (1 + \gamma_r) \quad [\text{kmole/kgcomb}]$$

$$N_{mm} = \left(\alpha L_0 + \frac{1}{M_c} \right) (1 + \gamma_r) \quad [\text{kmole/kgcomb}]$$

α : Coefficient d'excès d'air total et L_0 : Quantité d'air théoriquement nécessaire

$$\text{Il vient que: } a_{\max} = \frac{\alpha_1 L_0 + 1/M_c}{\alpha L_0 + 1/M_c}$$

Le principe de conservation de la masse nous permet d'évaluer α_2 en fonction de α_1 :

$$\alpha_2 = \frac{a_{\max} \cdot \alpha - a \cdot \alpha_1}{a_{\max} - a} \quad (2)$$

La pression instantanée au cours du processus de combustion est déterminée à partir de l'équation:

$$\frac{dP}{d\tau} + \gamma \times \frac{f'(\tau)}{f(\tau)} \times P = \frac{(\gamma - 1)}{f(\tau)} \times \left(\frac{\delta q_{dég}}{d\tau} - \frac{\delta q_{per}}{d\tau} \right) \quad (3)$$

La fraction massique brûlée du carburant est exprimée par la loi de Wiebe [2, 3].

$$x = 1 - \exp \left[-6.908 \times (\varphi / \varphi_z)^{m+1} \right] \quad (4)$$

φ_z est la durée de la combustion, et caractérise l'aspect quantitatif de la dynamique de combustion et m le facteur de forme de combustion, caractérisant l'aspect qualitatif.

L'application du principe de conservation d'énergie appliquée à la zone ω entre le début et la fin de sa combustion sous la forme développée donne:

$$\Delta Q_{\omega} = (U_{2pc})_{\omega} - (U_{1mm})_{\omega} + \sum_{j=1}^{\omega-1} (\Delta U_{pc})_j + \sum_{j=\omega+1}^{N_z} (\Delta U_{mm})_j - \Delta W_{\omega} \quad (5)$$

$$\Delta Q_{\omega} = \sum_{i=1}^{12} n_i \cdot C_{v,i} \Big|_0^{(t_{2pc})_{\omega}} \cdot (t_{2pc})_{\omega} \cdot \Delta x_{\omega} - (U_{1mm})_{\omega}$$

$$+ \sum_{j=1}^{\omega-1} (\Delta U_{pc})_j + \sum_{j=\omega+1}^{N_z} (\Delta U_{mm})_j - \Delta W_{\omega}$$

Fig. 1: Décomposition de la chambre de combustion en multi zones

En remplaçant les capacités calorifiques molaires moyennes des 12 espèces des produits de combustion par leurs expressions, l'équation d'énergie devient:

$$\Delta x_{\omega} \cdot (t_{2pc})_{\omega} \cdot \sum_{i=1}^{12} [n_i \cdot (a_i + b_i \cdot (t_{2pc})_{\omega})] = (U_{1mm})_{\omega}$$

$$- \sum_{j=1}^{\omega-1} (\Delta U_{pc})_j - \sum_{j=\omega+1}^{N_z} (\Delta U_{mm})_j + \Delta W_{\omega} + \Delta Q_{\omega}$$

$$(t_{2pc})_{\omega} \cdot \sum_{i=1}^{12} n_i \cdot a_i + (t_{2pc})_{\omega}^2 \cdot \sum_{i=1}^{12} n_i \cdot b_i =$$

$$\frac{1}{\Delta x_{\omega}} \left\{ (U_{1mm})_{\omega} - \sum_{j=1}^{\omega-1} (\Delta U_{pc})_j - \sum_{j=\omega+1}^{N_z} (\Delta U_{mm})_j + \Delta W_{\omega} + \Delta Q_{\omega} \right\}$$

On pose:

$$A = \sum_{i=1}^{12} n_i \cdot a_i = n_{CO_2} \cdot a_{CO_2} + n_{CO} \cdot a_{CO} + n_{H_2O} \cdot a_{H_2O}$$

$$+ n_{H_2} \cdot a_{H_2} + n_{OH} \cdot a_{OH} + n_{O_2} \cdot a_{O_2} + n_{O} \cdot a_{O} + n_{NO} \cdot a_{NO}$$

$$+ n_{N_2} \cdot a_{N_2} + n_{H} \cdot a_{H} + n_{N} \cdot a_{N} + n_{N_2O} \cdot a_{N_2O}$$

$$B = \sum_{i=1}^{12} n_i \cdot b_i = + n_{\text{CO}} \cdot b_{\text{CO}} + n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot b_{\text{H}_2\text{O}} + n_{\text{H}_2} \cdot b_{\text{H}_2} \\ + n_{\text{OH}} \cdot b_{\text{OH}} + n_{\text{O}_2} \cdot b_{\text{O}_2} + n_{\text{O}} \cdot b_{\text{O}} + n_{\text{NO}} \cdot b_{\text{NO}} \\ + n_{\text{N}_2} \cdot b_{\text{N}_2} + n_{\text{H}} \cdot b_{\text{H}} + n_{\text{N}} \cdot b_{\text{N}} + n_{\text{N}_2\text{O}} \cdot b_{\text{N}_2\text{O}}$$

$$C = \frac{1}{\Delta x_\omega} \cdot \left\{ (U_{1\text{mm}})_\omega - \sum_{j=1}^{\omega-1} (\Delta U_{\text{pc}})_j - \sum_{j=\omega+1}^{N_z} (\Delta U_{\text{mm}})_j + \Delta W_\omega + \Delta Q_\omega \right\}$$

Alors on obtient la forme condensée de l'équation d'énergie:

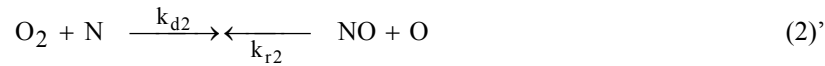
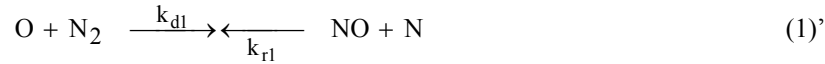
$$B \cdot (t_{2\text{pc}})_\omega^2 + A \cdot (t_{2\text{pc}})_\omega - C = 0 \quad (6)$$

La température locale des produits de combustion dans la zone ω juste au moment de sa combustion, $(t_{2\text{pc}})_\omega$ est la solution positive.

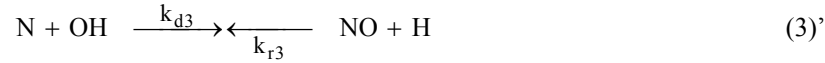
$$\begin{cases} (t_{2\text{pc}})_\omega = \frac{-A + \sqrt{A^2 + 4B \cdot C}}{2B} & [^\circ\text{C}] \\ (T_{2\text{pc}})_\omega = (t_{2\text{pc}})_\omega + 273 & [\text{K}] \end{cases} \quad (7)$$

3. MECANISME DE FORMATION DES NO_x

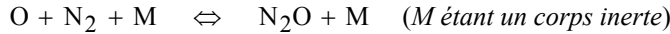
Le mécanisme de formation de NO le plus dominant, est celui, de Zeldovich. Le schéma proposé se compose des deux réactions suivantes [4, 11] qui décrivent la formation du NO à partir de l'azote de l'air.



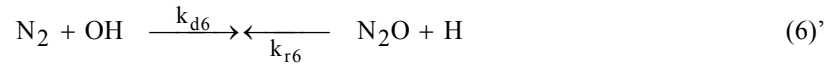
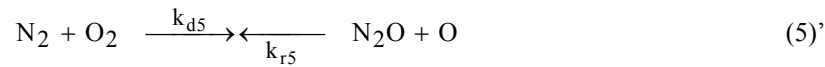
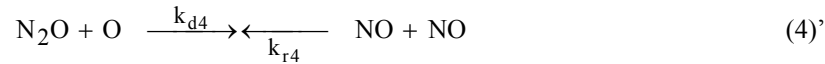
Dans les mélanges autres que pauvres, une troisième réaction introduite [3, 5, 9, 10], suite à des mesures d'évolutions de concentration de NO dans une chambre de combustion de moteur à allumage commandé.



Une autre voie de formation de NO a été mise en compte par Lavoie *et al.* [3] en 1970. Il s'agit d'un processus où l'origine de NO est le N₂O qui peut provenir d'une réaction de combustion de la forme:



Puis le N₂O est consommé par l'une des réactions suivantes:





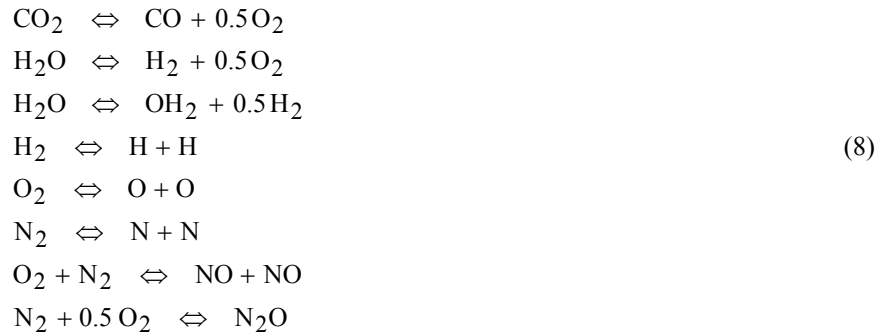
Des mesures par spectroscopie d'absorption ont montré que, dans le cas où NO n'est produit que par le mécanisme thermique, sa formation peut être très bien prédite à partir des réactions (1) et (2) [6]. Cependant, Heywood *et al.* [7] montrent que la réaction (3) reste aussi importante pour mieux prédire les concentrations de NO.

Eyzat et Guibert [8] affirment que la réaction ci-dessous contribue aussi à la formation de NO.



4. MODE DE CALCUL

On suppose que dans le système considéré le processus de combustion est terminé, l'équilibre chimique est établi. Donc, la loi de conservation de masse, la loi d'action de masse et la loi de Dalton déterminent complètement le système. Après l'achèvement du processus de combustion, l'équilibre chimique entre les composants donne:



Les constantes d'équilibre de ces réactions sont données par:

$$\begin{aligned} K_1 &= \left(\frac{n_4 \cdot \sqrt{n_7}}{n_3} \right)^{-1} \cdot \left(\frac{P}{n_t} \right)^{-0.5} & K_2 &= \frac{n_4 \cdot \sqrt{n_7}}{n_3} \cdot \left(\frac{P}{n_t} \right)^{-0.5} \\ K_3 &= \frac{n_6 \cdot \sqrt{n_4}}{n_3} \cdot \left(\frac{P}{n_t} \right)^{-0.5} & K_4 &= \frac{n_5}{\sqrt{n_4}} \cdot \left(\frac{P}{n_t} \right)^{-0.5} \\ K_5 &= \frac{n_8}{\sqrt{n_7}} \cdot \left(\frac{P}{n_t} \right)^{0.5} & K_6 &= \frac{n_8}{\sqrt{n_4 \cdot n_{10}}} \\ K_7 &= \frac{n_{11}}{\sqrt{n_{10}}} \cdot \left(\frac{P}{n_t} \right)^{0.5} \end{aligned} \quad (9)$$

K_i - Constante d'équilibre de la réaction i.

$$n_1 = n_{\text{CO}_2}; n_2 = n_{\text{CO}}; n_3 = n_{\text{H}_2\text{O}}; n_4 = n_{\text{H}_2}; n_5 = n_{\text{H}}; n_6 = n_{\text{OH}};$$

$$n_7 = n_{\text{O}_2}; n_8 = n_{\text{O}}; n_9 = n_{\text{NO}}; n_{10} = n_{\text{N}_2}; n_{11} = n_{\text{N}}; n_{12} = n_{\text{N}_2\text{O}}$$

$$n_t = \sum_{i=1}^{12} n_i$$

$$K_1(T) = 3.4447 \times 10^{-7} \times T^{0.6885} \times \exp(289322 / RT)$$

$$K_2(T) = 24.142 \times 10^{-3} \times T^{0.2421} \times \exp(247410 / RT)$$

$$K_3(T) = 15.088 \times 10^{-4} \times T^{0.1118} \times \exp(288568 / RT)$$

$$K_4(T) = 13.1792 \times T^{0.4056} \times \exp(-218561 / RT)$$

$$K_5(T) = 156.6265 \times T^{0.2126} \times \exp(-249964 / RT)$$

$$K_6(T) = 6.0469 \times T^{0.0322} \times \exp(-91235 / RT) \quad (10)$$

$$K_7(T) = 79.8151 \times T^{0.2920} \times \exp(-475224 / RT)$$

$$K_8(T) = 3.7681 \times 10^{-6} \times T^{0.6125} \times \exp(-78339 / RT)$$

La quantité des NO_x formée est donnée par la résolution numérique de l'équation

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = 2(1 - \beta^2) \cdot \left[\frac{R_{1e}}{\beta \cdot \frac{R_{1e}}{(R_{2e} + R_{3e}) + 1}} + \frac{R_{4e}}{\frac{R_{4e}}{R_{5e} + R_{6e} + R_{7e}} + 1} + R_{8e} \right] \frac{N_s RT}{P} \quad (11)$$

où: P et T sont respectivement la pression et la température absolues, N_s le nombre total de moles des produits de la combustion, $[\text{NO}]$ le nombre de moles d'oxyde d'azote, β le rapport entre la concentration réelle et équilibrée de l'oxyde d'azote et R_{ie} la vitesse de la réaction i à l'équilibre.

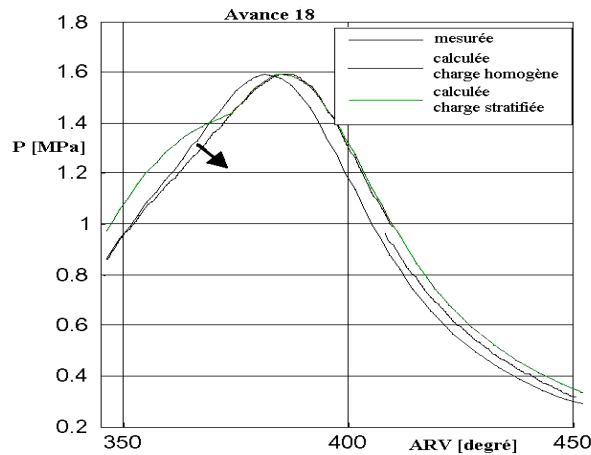


Fig. 2: Pression calculée pour les deux types de moteur et celle mesurée avec un taux de stratification de 15 % et $n = 1500$ tr/mn, un coefficient d'excès d'air de 1.17

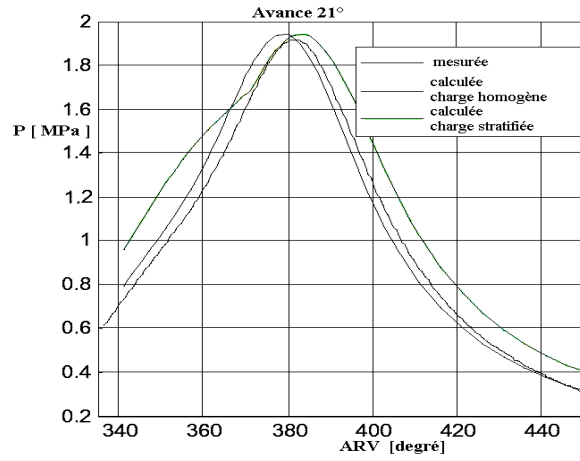


Fig. 3: Pression calculée pour les deux types de moteur et celle mesurée avec un taux de stratification de 15 % et $n = 1500$ tr/mn, un coefficient d'excès d'air de 1.17

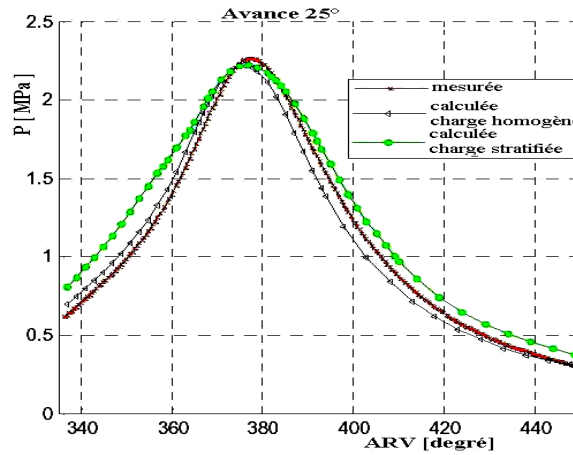


Fig. 4: Pression calculée pour les deux types de moteur et celle mesurée avec un taux de stratification de 15 % et $n = 1500$ tr/mn, un coefficient d'excès d'air de 1.17

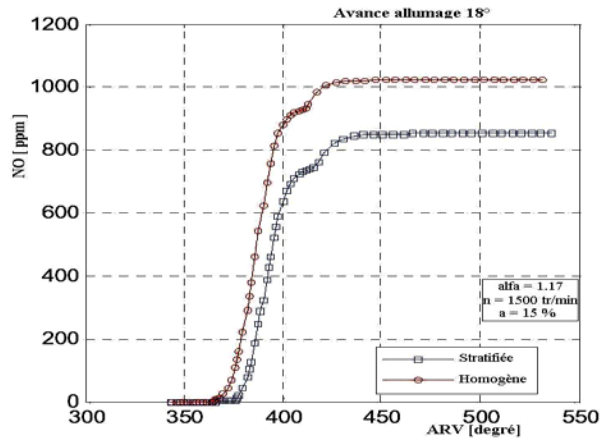


Fig. 5: Concentration des oxydes d'azote pour les deux types de moteur

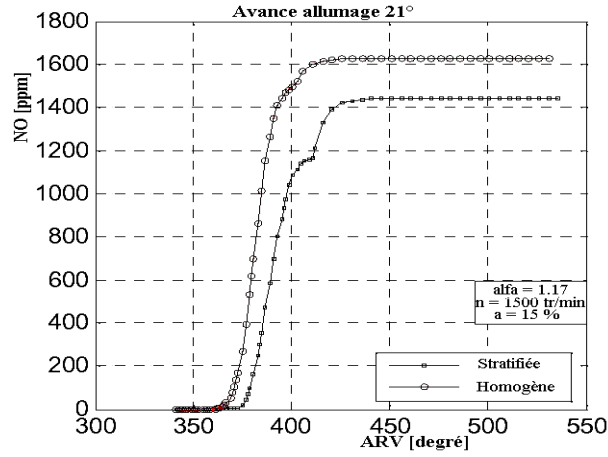


Fig. 6: Concentration des oxydes d'azote pour les deux types de moteur

Tableau 1: Résultats d'essais réalisés à Polytech d'Orléans

N (tr/mn)	1500	1500	1500
Avance (°)	18	21	25
P_{\max} (MPa)	1.598	1.949	2.304
NO_x (ppm)	1276	1873	3703
Excès d'air	1.17	1.17	1.17

5. INTERPRETATION DES RESULTATS

En faisant varier le taux de stratification de la charge depuis 5 % à 30 %, avec un pas de 5 %, on remarque que seule la pression correspondant au taux de 15 % qui est très proche de celle d'un moteur à charge homogène et à celle du moteur d'essais.

A remarquer d'après les trois premières figures des pressions correspondant aux avances à l'allumage (18°, 21° et 25°), que pour chaque cas, toutes les pressions sont approximativement égales. Ce qui confirme l'importance et la fiabilité du modèle appliqué.

En ce qui concerne les courbes des concentrations d'oxyde d'azote, il est bien clair qu'il y a une réduction assez importante des NO_x formés pour les trois cas du moteur à charge stratifiée relativement au moteur à charge homogène (**Tableau 2**).

Tableau 2: Concentrations en NO_x pour les trois cas du moteur

Avance (°)	18	21	25
Type de moteur			
NO_x (ppm)	1020	1620	3000
Charge homogène			
NO_x (ppm)	840	1430	2230
Charge stratifiée			
NO_x (ppm)	1076	1873	2770
Essai			

4. CONCLUSION

Après avoir effectué le calcul cinétique des gaz, malgré sa forte influence sur la formation des oxydes d'azote, le mécanisme de Zeldovich est insuffisant, la raison qui exige de le compléter par d'autres réactions à l'exception de la huitième qui n'a aucune influence dans le calcul. La concentration des NO_x est assez forte dans les zones qui brûlent en premier lieu à cause de leurs températures élevées.

Nous pouvons affirmer que si l'on pouvait réaliser, dans deux parties distinctes d'un même moteur, deux phases de combustion successives dont la première alimentée en mélange très riche de coefficient d'excès d'air local α_1 , et la seconde en mélange suffisamment pauvre formé d'air et des gaz brûlés provenant de la première combustion de coefficient d'excès d'air local α_2 ; on devrait obtenir à la fois une économie de combustible (surtout s'il s'agit d'un carburant de haute qualité) et une réduction considérable des oxydes d'azote au sein des gaz rejetés dans l'atmosphère.

Caractéristiques géométriques du moteur d'essai

Taux de compression	10,1
Alésage	88 mm
Course	82 mm
Cylindrée unitaire	0,498481 litres
Longueur de bielle	138 mm
Diamètre siège soupape d'admission	29.5 mm
Diamètre siège soupape d'échappement	26.6°
Angle soupape d'admission	16.25°
Angle soupape échappement	15.67°

REFERENCES

- [1] R. Mehdiév, '*Etude de la Combustion dans un Moteur à Charge Stratifiée*', 1982.
- [2] J.J. Wiebe, '*Brennverlauf und Kreisprozess von Verbrennungsmotoren*', Veb Verlag Technik Berlin, 1970.
- [3] R.R. Raine, C.R. Stone and J. Could, '*Modelling of Nitrite Oxide Formation in Spark Ignition Engines with a Multizone Burned Gas*', Combustion and Flame, Vol. 102, N°3, pp. 241 – 255, 1995.
- [4] A.G. Gaydon and H.G. Wolfhard, '*Flames, Their Structure, Radiation and Temperature*', Chapman and Hall, Londres, 1960.
- [5] B. Lewis and Von Elbe, '*Combustion, Flames and Explosion of Gases*', Document, Bibliothèque Royale, Belgique, 1961.
- [6] F.S. Dainton, '*Chain Reactions*', Revue S.A.E, N°15230, 1956.
- [7] N.N. Semenov, '*Some Problems of Chemical Kinetics and Reactivity*', Editions de Moscou and Princeton University Press, 1958.
- [8] N.N. Semenov, '*Some Problems of Chemical Kinetics Theory of Gases*', Document IFP, N°415236, 1958.

- [9] A.R. Sadiq Al Baghdadi Maher and A.K. Shahad Al Janabi Haroun, '*A Prediction Study of a Spark Ignition Supercharged Hydrogen Engine*', Energy Conversion and Management, Vol. 44, N°20, pp. 3143 – 3150, 2003.
- [11] F.N. Alasfour, '*NO_x Emission from a Spark ignition Engine using 30 % Iso-butanol-gasoline Blend: Part 1- Preheating Inlet Air*', Applied Thermal Engineering, Vol. 18, N°5, pp. 245 - 256, 1998.
- [12] G. Damköhler, '*The Effect of Turbulence on the Flame Velocity in Gas Mixtures*', Zeitung für Elektrochemie, Vol. 46, N°11, pp. 601 – 652, 1940.