

Titre: Modélisation de l'efficacité de capture de filtres particulaires pour
Title: moteur diesel

Auteur: Guillaume Matte-Deschênes
Author:

Date: 2014

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Matte-Deschênes, G. (2014). Modélisation de l'efficacité de capture de filtres
Citation: particulaires pour moteur diesel [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de
Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/1626/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/1626/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:** François Bertrand
Advisors:

Programme: Génie chimique
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION DE L'EFFICACITÉ DE CAPTURE DE FILTRES PARTICULAIRES
POUR MOTEUR DIESEL

GUILLAUME MATTE-DESCHÊNES
DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLOME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE CHIMIQUE)
DÉCEMBRE 2014

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

MODÉLISATION DE L'EFFICACITÉ DE CAPTURE DE FILTRES PARTICULAIRES
POUR MOTEUR DIESEL

présenté par : MATTE-DESCHÊNES Guillaume

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. FRADETTE Louis, Ph. D., président

M. BERTRAND François, Ph. D., membre et directeur de recherche

M. SRINIVASAN Bala, Ph. D., membre

DÉDICACE

À ma famille,

REMERCIEMENTS

Je voudrais d'abord remercier mon directeur de recherche, François Bertrand, pour son aide, ainsi que pour toute l'énergie qu'il a investie dans ce projet et l'opportunité qu'il m'a offerte.

Je tiens également à souligner la contribution de David Vidal et à lui témoigner ma gratitude pour sa patience et son aide apportée tout au long du projet.

J'aimerais remercier mes collègues de l'URPEI pour la belle ambiance de groupe : c'était un plaisir d'aller travailler chaque jour. Merci pour ces discussions aussi intéressantes qu'agréables.

Enfin, je souhaite exprimer mes remerciements à ma famille et à mes amis pour leurs encouragements et leur support tout au long de ce projet.

RÉSUMÉ

Pour réduire les émissions de suie d'un moteur diesel, des filtres particulaires diesel (FPDs) sont ajoutés au système de traitement des gaz d'échappement. Étant donné que les normes régissant ces émissions sont de plus en plus strictes, il est nécessaire de comprendre de mieux en mieux les phénomènes ayant lieu dans un FPD pour en concevoir des plus performants. Un de ces phénomènes n'ayant reçu que peu d'attention est la thermophorèse. L'objectif de ce travail est d'améliorer la compréhension de l'effet de la thermophorèse sur la capture des particules de suie dans un FPD. Pour évaluer l'importance de ce phénomène et ses effets sur la capture de la suie, un modèle numérique a été développé. Il se compose de trois étapes : (1) la reconstruction numérique d'un fragment de mur poreux de cordiérite à l'aide du recuit simulé, (2) le calcul du champ de vitesse au travers du mur poreux par la méthode de Boltzmann sur réseau, et (3) la résolution des trajectoires des particules de suies calculées par une équation modifiée de Langevin prenant en compte la thermophorèse. Les effets de l'intensité et de l'orientation de la force thermophorétique sur des particules aérosols de diverses tailles et pour trois vitesses d'écoulement du gaz. Il a été démontré que la thermophorèse peut affecter jusqu'à 27% du volume total des particules de suies entrant dans le FPD. De plus, la force thermophorétique a eu pour impact d'affecter l'efficacité de capture de $\pm 2\%$ et la profondeur moyenne de capture de $\pm 10\mu m$ en fonction de son orientation par rapport à celle de l'écoulement. Un critère sur l'importance de la force thermophorétique dans le modèle basé sur le nombre de Stokes et de Reynolds a été trouvé. Il s'agit du premier travail portant sur l'effet de la thermophorèse dans un FPD.

ABSTRACT

To reduce soot particle emissions from diesel engines, harmful for the environment and the human health, Diesel Particulate Filters (DPFs) are used in the exhaust gas system. Since the regulations are increasingly stringent, a better understanding of capture in DPFs is necessary to improve them. The purpose of the present study was to investigate the impact of thermophoresis on soot capture in the cordierite porous wall of a diesel particulate filter (DPF). A three-step numerical model was developed, that consists of: (1) the numerical reconstruction of a representative volume of the cordierite porous wall, (2) the computation of gas flow through the porous wall using the lattice Boltzmann method, and (3) the prediction of DPF capture efficiency based on the resolution of a modified Langevin equation that takes thermophoresis into account. The impact of the magnitude and orientation of the thermophoretic force on the capture of soot particles of various sizes under different flow conditions was investigated. The thermophoretic force applied in or against the flow direction affected the particle capture significantly, depending on particle size and flow velocity. It is shown that thermophoresis has a statistically significant impact on up to 27% of the soot volume entering a DPF. The effects are observed on both the capture efficiency ($\pm 2\%$) and average capture depth ($\pm 10\mu m$). A criteria for the thermophoresis significance based on the Stokes and Reynolds numbers has been found. It is the first work on the effects of thermophoresis in a DPF.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	v
ABSTRACT	vi
TABLE DES MATIÈRES	vii
LISTE DES TABLEAUX	ix
LISTE DES FIGURES	x
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xii
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 Mise en contexte	1
1.2 Objectifs de recherche	3
1.3 Organisation du mémoire	3
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	5
2.1 Caractéristiques générales d'un FPD	5
2.2 Filtration	5
2.3 Perte de charge et régénération	6
2.4 Particules de suie et agglomération	10
2.5 Écoulement multiphasique et forces impliquées	11
2.6 Modélisation de FPDs	12
2.7 Objectifs spécifiques	14
CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE	16
3.1 3 étapes du modèle proposé	16
3.2 Hypothèses, simplifications et application au FPD	17
3.3 Reconstruction du milieu poreux	22
3.4 Utilisation de l'équation de Boltzmann pour simuler un écoulement	26
3.4.1 Théorie cinétique des gaz	26

3.4.2	Méthode de Boltzmann sur réseau	28
3.5	Trajectoire de particules	33
3.5.1	Ajout de la force thermophorétique	35
3.6	Plan expérimental	36
CHAPITRE 4 ARTICLE 1 : Numerical investigation of the impact of thermophoresis		
	on the capture efficiency of diesel particulate filters	39
4.1	Introduction	41
4.2	Methodology	45
4.2.1	Reconstruction of the cordierite porous wall	46
4.2.2	Simulation of air flow through the porous wall	50
4.2.3	Determination of aerosol trajectories and capture	53
4.2.4	Numerical experiments	55
4.3	Results and discussion	58
4.3.1	Cordierite medium and gas flow verification	58
4.3.2	Aerosol capture and impact of thermophoresis	62
4.4	Conclusion	71
CHAPITRE 5 DISCUSSION GÉNÉRALE		
		75
CHAPITRE 6 CONCLUSION		
		76
6.1	Principales contributions	77
6.2	Travaux futurs	77
6.2.1	Concept de la densité de rotation	78
RÉFÉRENCES		
		81

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1	Diamètre moyen des particules de suies à différents endroits dans le système d'échappement (Andrews <i>et al.</i> , 2000)	19
Tableau 3.2	Propriétés du fluide porteur.	38
Tableau 3.3	Propriétés des particules.	38
Tableau 3.4	Propriétés de l'écoulement.	38
Tableau 4.1	Numerical parameters used for all LBM simulations.	51
Tableau 4.2	Properties of the fluid.	57
Tableau 4.3	Properties of the particles.	57
Tableau 4.4	Properties of the flow.	58
Tableau 4.5	Structural and hydraulic properties calculated from our reconstructed media and reported in the literature for cordierite porous walls.	61

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Coupe de face d'un FPD.	2
Figure 1.2	Moteur diesel et système de traitement des gaz d'échappement (Renault).	4
Figure 2.1	Photo et représentation schématique d'un monolithe et de ses canaux.	6
Figure 2.2	Coupe de côté d'un FPD illustrant l'écoulement et la capture.	7
Figure 2.3	Cycle de filtration (Nissan).	9
Figure 2.4	Particules de suie (Van Gulijk <i>et al.</i> , 2004).	11
Figure 2.5	Source de la force thermophorétique.	12
Figure 2.6	Modèle de Bisset (Koltsakis <i>et al.</i> , 2013).	13
Figure 3.1	Distribution des particules de suie en fonction de leur diamètre de mobilité.	17
Figure 3.2	Température en trois points dans un FPD (Schmidt <i>et al.</i> , 2007).	20
Figure 3.3	Coupe de face d'un FPD illustrant la zone où les gradients de température sont conséquents (zone colorée) calculée d'après (Schmidt <i>et al.</i> , 2007).	21
Figure 3.4	Comparaison d'un profil de vitesse isotherme (à gauche) et d'un profil de vitesse présentant une variation de 2.1 K (à droite).	21
Figure 3.5	Mur poreux de cordiérite reconstruit.	24
Figure 3.6	Évolution de la reconstruction du mur poreux de cordiérite avec le code développé.	25
Figure 3.7	Directions considérées dans un réseau D3Q15 (Vidal, 2008).	29
Figure 3.8	Condition frontière de rebond à mi-chemin.	31
Figure 3.9	Condition frontière périodique (adapté de Vidal, 2008).	32
Figure 3.10	Présentation des cas de thermophorèse considérés dans ce travail.	37
Figure 4.1	Side view of a DPF with soot capture.	43
Figure 4.2	Illustration of the simulated annealing reconstruction procedure.	49
Figure 4.3	Experimental distribution of soot particle diameters used and discretization.	56
Figure 4.4	Four cases of thermophoretic force orientation with respect to the direction of the flow.	56
Figure 4.5	Example of a reconstructed cordierite porous wall medium before (a) and after (b) filtering out the unconnected voxels.	59
Figure 4.6	Example of the simulated flow field through the reconstructed medium for an average velocity of 0.22 m/s.	60

Figure 4.7	Aerosol trajectories computed by our numerical algorithm from a given location at the entrance of the reconstructed medium for the following velocity : 0.005 m/s (a), 0.11 m/s (b), and 0.22 m/s (c).	63
Figure 4.8	Impact of flow velocity and thermophoretic force orientation (for $\ \nabla T\ = 7000 \text{ K/m}$) on capture efficiency curves as a function of aerosol size. .	64
Figure 4.9	Effect of thermophoresis on particle capture as a function of the penetration depth of $0.7 \mu\text{m}$ particles in the filter at a flow velocity of 0.22 m/s and a temperature gradient of 7000 K/m, for the “with” (blue bars) and the “against” (orange bars) cases as compared to the “without” case (reference).	68
Figure 4.10	Average capture depth as a function of aerosol size for various flow velocities and a temperature gradient of 7000 K/m.	69
Figure 4.11	Impact of thermophoresis for the “against” case as a function of the magnitude of inertia for three temperature gradients.	70
Figure 4.12	Proposed mechanism of action of thermophoretic force on particle capture.	72
Figure 6.1	Influence du diamètre des pores (D_m) sur l’efficacité globale de filtration (E).	79
Figure 6.2	Influence de la perméabilité (k) sur l’efficacité globale de filtration (E).	80
Figure 6.3	Influence de la densité de rotation (Φ) et de la perméabilité (k) sur l’efficacité globale de filtration (E).	80

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

FPD	Filtre particulaire diesel
MBR	Méthode de Boltzmann sur réseau
D3Q15	Réseau en 3 dimensions comportant 15 directions

Liste des variables

b		Nombre de directions non perpendiculaires à l'écoulement
c_c		Facteur de correction de Cunningham
\vec{c}_i	m.s^{-1}	Vitesses discrétisées
c_s	m.s^{-1}	Vitesse du son du réseau de Boltzmann
D		Nombre de dimensions
D_m	m	Diamètre de pore moyen
D_p	m	Diamètre d'une particule
\vec{e}	m.s^{-1}	Vitesse des populations
E		Pseudo énergie
f		Fonction de distribution
f^0		Fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann
f^{eq}		Fonction de distribution à l'équilibre
\vec{g}	kg.m.s^{-2}	Force externe
i		Numéro d'itération
K_B	$\text{kg.m}^2.\text{s}^{-2}.\text{K}^{-1}$	Constante de Boltzmann
k_g	$\text{kg.m.K}^{-1}.\text{s}^{-3}$	Conductivité thermique du gaz
k_p	$\text{kg.m.K}^{-1}.\text{s}^{-3}$	Conductivité thermique des particules
L		Trajet linéaire
L_{exp}		Trajet linéaire expérimental
m	kg	Masse
n_x		Nombre de mailles dans le sens de l'écoulement
P	$\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-2}$	Pression
P^0		Probabilité d'accepter un déplacement
\vec{p}	kg.m.s^{-1}	Quantité de mouvement linéaire

Liste des variables

R	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$	Constante des gaz parfaits
S		Corrélation à 2 points
S_{exp}		Corrélation à 2 points expérimentale
S_v	m^{-1}	Surface spécifique
t	s	Temps
T	K	Température
T^0		(Pseudo) température
\vec{u}	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Vitesse macroscopique du fluide
V	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Vitesse superficielle
\vec{v}	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Vitesse d'une particule
\vec{V}	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Vitesse du fluide
V_{max}	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Vitesse maximale du fluide
v_{th}	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Vitesse thermophorétique
V_ϵ	m^3	Volume contribuant à l'écoulement
w_i		Poids de la quadrature
x	m	Distance séparant deux points
\vec{x}		Vecteur de coordonnées
ϵ		Porosité
γ	s^{-1}	Inverse multiplicatif du temps de relaxation d'une particule
$\vec{\Gamma}$	$\text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-2}$	Force de Langevin (mouvement Brownien)
λ	m	Libre parcours moyen
λ_r		Ratio des conductivités thermiques du fluide et de la particule
μ	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	Viscosité
Ω		Opérateur de collision
Φ	m^{-3}	Densité de rotation
ρ	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	Masse volumique
τ^0		Temps de relaxation adimensionnel de l'équation de Boltzmann
τ^*		Temps de relaxation adimensionnel de la MBR
τ	s	Temps de relaxation d'une particule

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

1.1 Mise en contexte

La demande mondiale pour le diesel connaît depuis plusieurs décennies, une forte croissance et cela s'explique par plusieurs facteurs, notamment par celui de son efficacité supérieure à celle de l'essence, se traduisant par une économie de carburant pour les véhicules personnels. Ainsi, environ la moitié des véhicules personnels en Europe étaient au diesel en 2008 (Li *et al.*, 2009). De plus, l'industrie du transport, dominée par le moteur diesel, est en expansion, notamment dans les pays en développement. Un transfert de la demande de l'essence vers le diesel est aussi observé. Ainsi, la demande en diesel devrait augmenter de 75 % de 2010 à 2040 (ExxonMobil, 2013). Les considérations environnementales sont de plus en plus importantes, entraînant l'étude d'un grand nombre de technologies et de techniques. Parmi celles-ci, il existe des systèmes de recirculation des gaz de combustion afin de diminuer la demande en carburant et l'émission de NO_x , et des systèmes traitant les NO_x et le CO afin d'en réduire les émissions. Incidemment, ces derniers peuvent également servir à la réduction de la demande en carburant (Johnson, 2009). Le diesel a également les avantages d'émettre une plus faible quantité de soufre et de CO_2 , de présenter des moteurs ayant une plus grande durabilité et de nécessiter, lors de la production, moins d'énergie que l'essence. Par contre, l'utilisation du diesel comporte un désavantage environnemental important, soit l'émission de nombreuses particules solides contenues dans les gaz de combustion (Armas *et al.*, 2013).

Ces particules sont dangereuses pour l'environnement et la santé humaine (Pihl *et al.*, 2013), donc des filtres post-combustion sont utilisés pour prévenir leurs émissions. Ces filtres ont fait leurs preuves par le passé (Hansen et Pedersen, 2001), mais puisque les normes régissant la quantité de suie qu'il est permis d'émettre évoluent sans cesse (Mokhri *et al.*, 2012), ils doivent constamment être améliorés. Ainsi, de nombreuses discussions ont eu lieu depuis plusieurs années afin de modifier certaines normes et les exprimer en nombre de particule émises plutôt que de les exprimer en masse de particules émises (Johnson, 2009). Les manufacturiers de moteurs à essence commencent à regarder la possibilité d'ajouter des filtres particuliers dans leur système de traitement des gaz de combustion afin de se conformer aux normes à venir (Richter *et al.*, 2012). En effet, les moteurs à essence émettent le même type de particules qu'un moteur diesel, mais en plus faible nombre (Maricq, 2000). Afin de tester les caractéristiques des filtres et de les améliorer, de nombreuses expériences, portant entre

autre sur la filtration, la régénération et la résistance mécanique de ceux-ci, sont effectuées. Lorsque les paramètres étudiés sont difficiles à obtenir ou à isoler expérimentalement, l'étude fait appel à des simulations numériques afin d'aider à la compréhension des phénomènes en jeu. Pour ces raisons, le présent travail portera sur la simulation en trois dimensions (nécessaire en raison de la complexité du milieu poreux) de l'écoulement et de la capture au travers d'un filtre particulaire de moteur diesel. Le choix du filtre à modéliser a été fait en fonction du filtre le plus communément utilisé puis pour lequel le plus d'informations étaient disponibles : le filtre monolithique de cordiérite (dont la coupe de face apparaît à la Figure 1.1). Le filtre monolithique de cordiérite et le filtre segmenté de SiC sont tous deux très populaires (Masoudi, 2005), toutefois beaucoup plus de travaux antérieurs se sont penchés sur le filtre de cordiérite, rendant les informations nécessaires à sa modélisation plus accessibles.

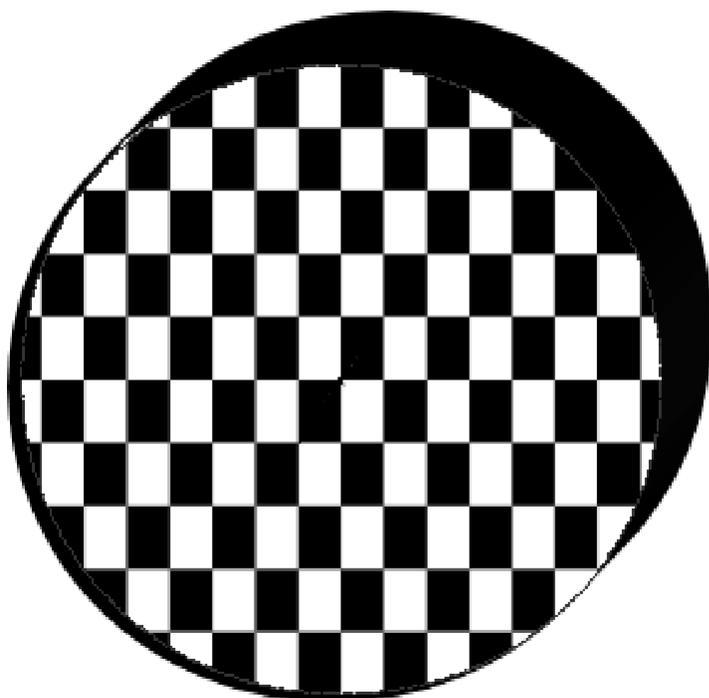


Figure 1.1 Coupe de face d'un FPD. Les cases noires représentent des entrées bloquées.

1.2 Objectifs de recherche

Un filtre particulaire diesel (tel que visible sur la Figure 1.2) doit respecter les normes environnementales ainsi qu'un certain nombre de critères. Un filtre doit présenter une bonne efficacité de capture des particules, mais doit aussi respecter d'autres contraintes techniques. Pour éviter une augmentation significative de la consommation de carburant, le filtre doit engendrer une perte de charge aussi faible que possible, puisqu'elle est proportionnelle à la consommation de carburant et être léger. Il doit aussi être durable et donc comporter une résistance mécanique et thermique suffisante, ainsi qu'un vieillissement acceptable en terme d'encrassement. Au cours de son utilisation, le filtre s'encrasse de suie augmentant ainsi la perte de charge occasionnée. Pour éviter que la perte de charge dans le filtre dépasse un certain seuil, la suie est périodiquement brûlée lors de ce qui est appelée la régénération. Un autre critère de conception du filtre est qu'il doit être possible de le régénérer de façon efficace, et ce, sans avoir recours à des additifs dans le carburant (à base de cérium par exemple) (Koltsakis *et al.*, 2013). Enfin, puisque le dessous d'un véhicule est très chargé, le filtre se doit d'être compact (Li *et al.*, 2009). Le respect simultané de toutes ces contraintes étant complexe, la modélisation numérique est utilisée pour étudier la conséquence de certaines actions sur un paramètre spécifique difficilement observable expérimentalement. La modélisation permet donc d'explorer les zones d'ombres laissées par les travaux expérimentaux. Par conséquent, l'objectif général de ce travail est de mieux comprendre les FPDs en modélisant l'effet de la thermophorèse sur la capture.

1.3 Organisation du mémoire

Tout d'abord, en raison de la rapide avancée dans le domaine de la modélisation des filtres particulaires diesel et des travaux expérimentaux concernant de mieux en mieux les phénomènes ayant lieu dans un FPD, une brève revue de l'état de l'art et de certains phénomènes d'importance présent dans le filtre sera effectuée. Ce sera l'objet du chapitre 2. Ensuite, au chapitre 3, la méthodologie et les algorithmes utilisés pour les différentes étapes du modèle seront présentés. Le chapitre 4 rapportera l'article soumis à la revue : "Canadian journal of chemical engineering", comportant, notamment, la présentation des résultats concernant l'influence de la thermophorèse sur les trajectoires des particules de suie dans un FPD. Une brève discussion générale sur le projet sera l'objet du chapitre 5. Finalement, le chapitre 6 conclura ce travail en présentant des perspectives pour sa suite.

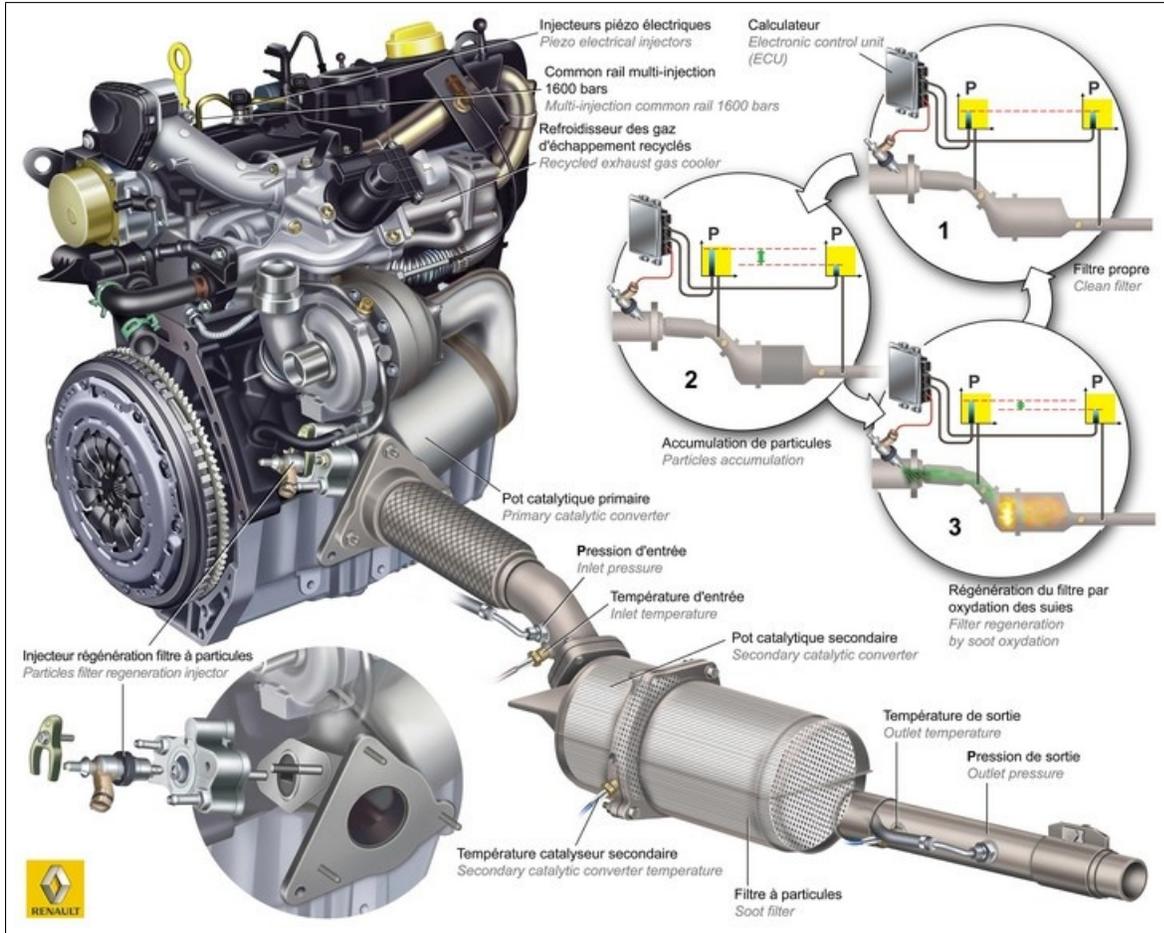


Figure 1.2 Moteur diesel et système de traitement des gaz d'échappement (Renault).

CHAPITRE 2

REVUE DE LITTÉRATURE

Dans cette section, les différents concepts étudiés et présents dans un FPD ainsi qu'une partie de la littérature les concernant seront abordés. Des travaux expérimentaux et numériques sur les FPDs précédant cette étude seront aussi présentés.

2.1 Caractéristiques générales d'un FPD

Les filtres particuliers pour moteur diesel sont souvent sous la forme d'un réseau de canaux structurés dans un bloc monolithique afin de maximiser l'aire de filtration par unité de volume (voir Figure 2.1) (Konstandopoulos *et al.*, 2012). Ils sont cylindriques et sont constitués d'une entrée divergente et une sortie convergente. Une description plus complète des caractéristiques d'un filtre de cordiérite est donnée par Torregrosa *et al.* (2011). La filtration dans ce genre de filtre s'effectue au travers des parois poreuses des canaux en premier lieu puis, par une accumulation de suie se formant sur la paroi poreuse (voir Figure 2.2). La filtration se produit alors majoritairement à l'intérieur de cette accumulation de suie (Konstandopoulos *et al.*, 2000). Il existe également des types de filtres dont la géométrie est différente, comme les « octosquares » par exemple, dont la section d'un canal varie entre son entrée et sa sortie. Toutefois, en dépit des améliorations rapportées, ils n'ont pas réussi, à ce jour, à ravir une part significative du marché (Ogyu *et al.*, 2008). Dans un milieu poreux, la perte de charge est régie par la loi de Darcy (Bird *et al.*, 2007) (Vidal, 2008) (Schwartz *et al.*, 1993) (Ziarani et Aguilera, 2011). Pour cette raison, le critère considéré le plus important pour comparer des milieux poreux est leur perméabilité. Le type d'écoulement à travers un milieu poreux est dépendant du nombre de Knudsen, défini comme le double du rapport entre le libre parcours moléculaire moyen et le diamètre moyen des pores (aussi appelé régime moléculaire libre, régime transitoire, régime d'écoulement avec glissement à la paroi, régime d'écoulement continu) (Ziarani et Aguilera, 2011) (Sambaer *et al.*, 2011) (Sambaer *et al.*, 2012) (Maze *et al.*, 2007). La connaissance du type d'écoulement est importante, car le comportement d'une particule et donc sa capture en dépendent.

2.2 Filtration

La filtration de particules s'effectue selon trois mécanismes : le mouvement Brownien, l'interception et l'impaction inertielle. Le mouvement Brownien est le mécanisme dominant

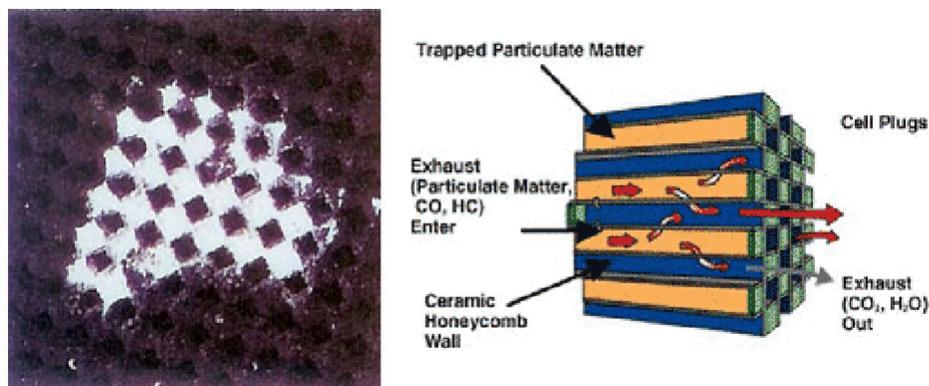


Figure 2.1 Photo et représentation schématique d'un monolithe et de ses canaux (adaptés de cumminsforum et Ifleet).

pour les particules qui ont un diamètre inférieur à 200 nm (Liu *et al.*, 2003). L'impaction inertielle est le mécanisme dominant pour les particules dont le diamètre est supérieur à 2000 nm (Liu *et al.*, 2003). L'interception, quant à elle, augmente avec le ratio entre la taille de la particule et une dimension caractéristique des collecteurs (par exemple, le diamètre d'une fibre) (Kulkarni *et al.*, 2011). Entre 200 et 2000 nm, plus d'un mécanisme sont importants et aucun n'est dominant en toutes circonstances (Liu *et al.*, 2003). Généralement, la taille des particules les plus pénétrantes, c'est-à-dire les moins capturées par le filtre, est autour de 200-300 nanomètres; c'est donc en fonction de ces tailles de particules que la performance d'un filtre est définie. L'efficacité de la filtration dépend de plusieurs autres facteurs comme la vitesse d'écoulement du gaz (Sambaer *et al.*, 2011) (Liu *et al.*, 2003) (Huang, 2013), la taille des fibres ou des pores du filtre (Huang, 2013) et la structure de ceux-ci (Sambaer *et al.*, 2012) (Huang, 2013) (Qian *et al.*, 2013) (Pradhan *et al.*, 2013). Il a également été démontré que, sous un certain seuil, la concentration des particules influence leur filtration (Wang *et al.*, 2006). Tel que démontré par Guo *et al.*, il est possible d'améliorer l'efficacité de capture d'un filtre, sans augmenter la perte de charge, en sacrifiant un autre paramètre géométrique comme la longueur du filtre (2011).

2.3 Perte de charge et régénération

La perte de charge dans un filtre monolithique de cordiérite est la somme de plusieurs contributions : la contraction du gaz à l'entrée du monolithe, le frottement avec les parois des canaux, la traversée du milieu poreux selon la loi de Darcy, l'expansion créant de la turbulence à la sortie du monolithe et la perte de charge due à l'inertie durant la traversée du milieu poreux (effet de Forchheimer) (Konstandopoulos *et al.*, 2001b) (Masoudi, 2002). À

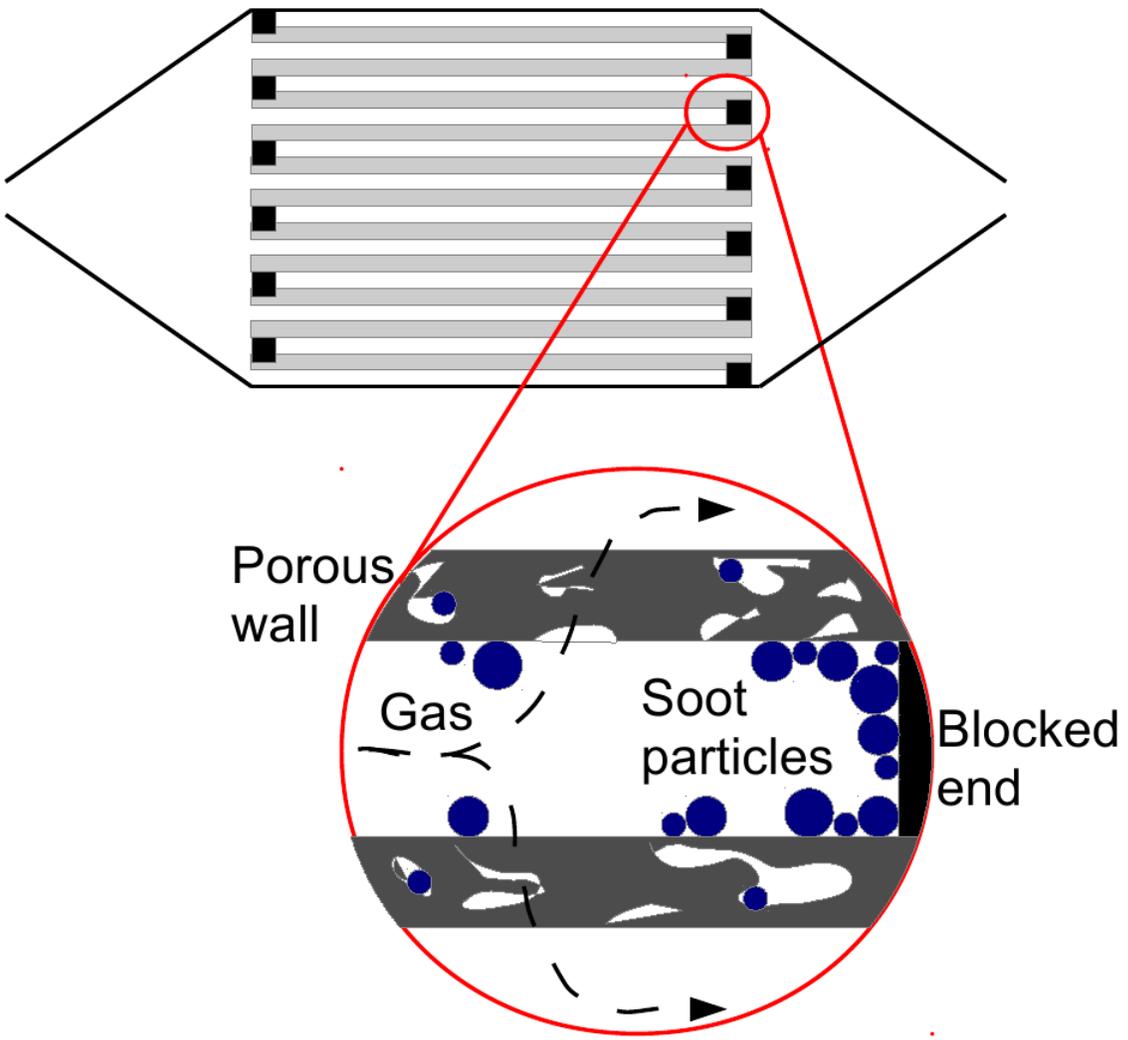


Figure 2.2 Coupe de côté d'un FPD illustrant l'écoulement et la capture.

cela vient s'ajouter l'expansion génératrice de turbulence à l'entrée du filtre et la contraction locale des gaz à la sortie du filtre. Tous ces phénomènes sont dépendants de la vitesse d'écoulement, de l'encrassement des canaux et/ou du régime d'écoulement (Konstandopoulos *et al.*, 2001b) (Masoudi, 2002). L'écoulement dans un canal est considéré laminaire jusqu'à un nombre de Reynolds de 2000, turbulent à partir de 10 000 et transitoire entre 2000 et 10 000 (Masoudi, 2002). Les canaux d'un DPF sont en écoulement laminaire. Une comparaison des contributions de chaque composante à la perte de charge totale a également été effectuée par Masoudi (2005).

La perte de charge admise dans un filtre est limitée puisqu'elle nuit à l'écoulement des gaz de combustion vers la sortie. Effectivement, le type de moteur détermine la valeur seuil de perte de charge totale à partir de laquelle il ne fonctionne plus adéquatement ; la régénération du filtre (combustion de la suie accumulée) est nécessaire afin de ne jamais atteindre cette valeur critique. Toutefois, il est possible de regrouper les moteurs par type pour obtenir approximativement la valeur de perte de charge à ne pas dépasser. Ainsi, le VERT, une association de producteurs de filtres particuliers diesel et de constructeurs de moteurs basée en Suisse, préconise une valeur de 40 kPa maximum pour les moteurs développant 50 kW et moins, 20 kPa pour les moteurs entre 50 et 500 kW et 10 kPa pour les moteurs plus puissants que 500 kW (Jääskeläinen, 2007). Toutefois, comme ces valeurs comprennent la perte de charge de l'ensemble des pièces suivant la combustion, la limite d'un filtre dépend du reste de l'arrangement et est donc généralement considérée, indépendamment du moteur, comme étant de 200 mbar (Heidelberg, 2013). Si la valeur critique de perte de charge est dépassée, le moteur ne peut plus opérer comme il se doit (Masoudi, 2005). Cela a un impact sur la température des gaz de combustion, la consommation de carburant augmente et, ultimement, cela pourrait bloquer l'écoulement des gaz de combustion (Masoudi, 2005) (Jääskeläinen, 2007). Dans le but de réduire cette perte de charge autant que possible, une équipe de chercheurs s'est attelée à modifier la structure des pores pour trouver une configuration optimale (Merkel *et al.*, 2003).

Au cours de son utilisation, des particules s'accumulent dans le filtre (étape 3 vers 1 de la Figure 2.3), ce qui modifie les caractéristiques de l'écoulement le traversant et son efficacité de filtration (Konstandopoulos *et al.*, 2000)(Zhong *et al.*, 2012)(Saleh *et al.*, 2013)(Yang *et al.*, 2009)(Yamamoto *et al.*, 2006)(Yamamoto et Otori, 2012). Plusieurs travaux ont été effectués pour modéliser l'agrégation et la déposition des particules (Meakin, 1989), à l'aide de modèles de déposition ballistique (Konstandopoulos, 2000), en résolvant l'équilibre des forces sur les particules (Li et Ahmadi, 1993) et à l'aide de modèles dynamiques (Finlay, 2001). Certains de ces modèles ont été appliqués à la formation des dépôts de suie sur un filtre de cordiérite (Konstandopoulos *et al.*, 2002). Étant donné que la perte de charge permise est limitée, il

est nécessaire de restreindre la quantité de particules qui peuvent être accumulées dans le filtre au moyen de la régénération (étape 2 de la Figure 2.3). Cette dernière peut s'effectuer de façon active (injection de carburant dans le filtre pour brûler les particules de suie) ou passive (en présence de catalyseur). L'effet du catalyseur peut être de diverses natures ; il peut convertir le NO en NO₂ qui consomme la suie à une température beaucoup plus faible que la température de régénération normale (250-400°C plutôt que 440-620°C) (Koltsakis *et al.*, 2013)(Valencia *et al.*, 2013)(Gieshoff *et al.*, 2001) ou peut agir sur la suie directement pour abaisser sa température de combustion (360-550°C) (Valencia *et al.*, 2013). L'étude expérimentale de la régénération (Pihl *et al.*, 2013) (Valencia *et al.*, 2013) (Wang-Hansen *et al.*, 2013) (Locker *et al.*, 2002) (Pidria *et al.*, 2007) (Lamharess *et al.*, 2013) (Ogunwumi *et al.*, 2005) (Doggali *et al.*, 2013) (Floerchinger *et al.*, 2003) a permis à d'autres auteurs de concevoir des modèles cinétiques de la combustion de la suie (Konstandopoulos *et al.*, 2000) (Konstandopoulos *et al.*, 2001a) (Konstandopoulos *et al.*, 2003) (Bensaid *et al.*, 2010) (Zheng et Banerjee, 2009).

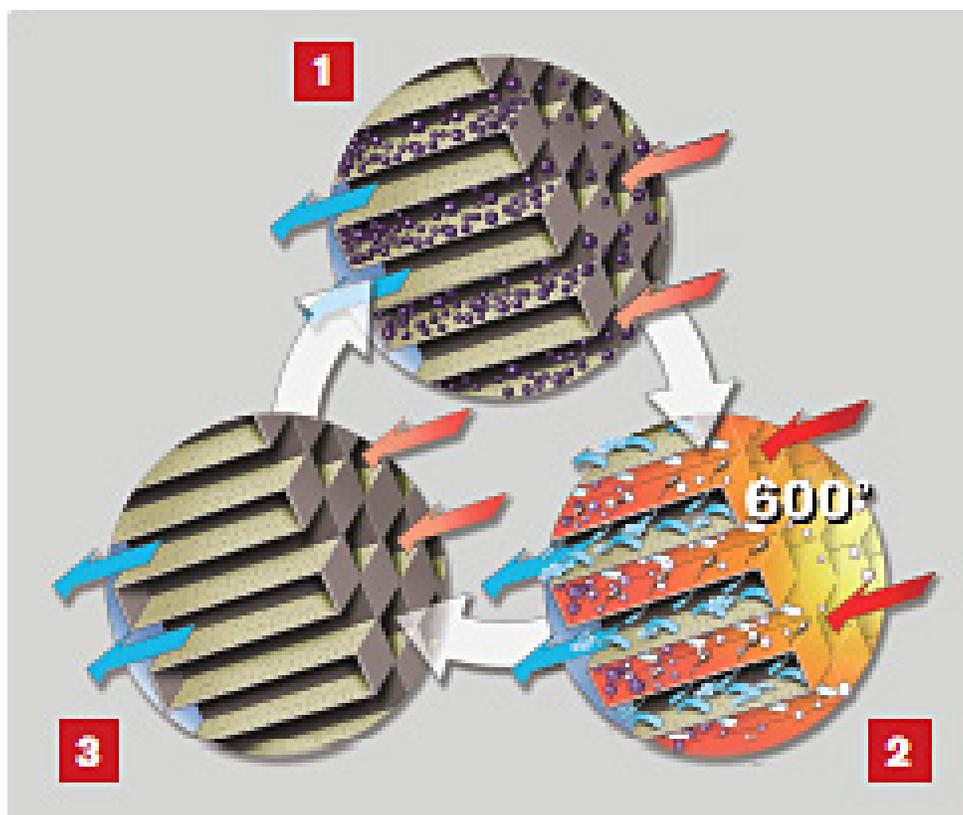


Figure 2.3 Cycle de filtration (Nissan). 1) filtre encrassé 2) combustion de la suie 3) filtre propre

2.4 Particules de suie et agglomération

La caractérisation (taille, forme, propriétés physiques,...) des particules de suie (voir Figure 2.4) est également un défi en raison de leurs tailles qui les rends difficiles à manipuler et plusieurs chercheurs s’y sont attelés (Andrews *et al.*, 2000) (Kittelson, 1998) (Burtscher, 2005) (Maricq et Xu, 2004) (Van Gulijk *et al.*, 2004) (Vanhaecke *et al.*, 2012). La distribution du diamètre des particules aura un effet différent sur le comportement des suies si elle est basée sur le diamètre de mobilité ou, au contraire sur, le diamètre aérodynamique (Van Gulijk *et al.*, 2004). En effet, le diamètre de mobilité représente le diamètre d’une particule sphérique sur laquelle le gaz aurait la même force de traînée que sur la particule observée (Van Gulijk *et al.*, 2004). En ce qui concerne le diamètre aérodynamique, il représente le diamètre d’une sphère ayant une densité de 1000 kg/m^3 qui aurait le même temps de relaxation, temps nécessaire pour retrouver un état d’équilibre après une perturbation, que la particule observée (Van Gulijk *et al.*, 2004). De plus, le mode d’opération du moteur influence la distribution de tailles des particules de suie (Schmidt *et al.*, 2007). Il est également important de bien connaître les propriétés structurales du dépôt de ces particules formant un milieu poreux au travers duquel l’écoulement passera, ce à quoi Konstandopoulos et al. ont contribué en modélisant la microstructure et l’impact sur la perte de charge des dépôts de suie (Konstandopoulos *et al.*, 2007).

Un autre effet potentiellement important sur la filtration est l’agrégation des particules durant leur trajet, en raison des interactions électromagnétiques entre ces dernières. Effectivement, elle ferait varier la distribution de taille des particules durant leur écoulement au travers du filtre. Lorsqu’il est présent, le mouvement Brownien contribue à l’agrégation en permettant aux particules d’entrer en contact les unes avec les autres (Wang *et al.*, 2005a). Lorsque le taux de cisaillement ou la concentration en particules augmente, le taux d’agrégation augmente également (L. Marchisio *et al.*, 2003). Toutefois, le taux de cisaillement est inversement proportionnel à la taille moyenne des particules agrégées (Wang *et al.*, 2005a) (Soos *et al.*, 2007). La tendance de l’agrégation n’est pas la même en régimes laminaire et turbulent (L. Marchisio *et al.*, 2003). Sous l’effet du phénomène d’agrégation, les particules deviennent plus compactes avec le temps, autant en écoulement laminaire qu’en écoulement turbulent, mais le processus est plus rapide dans le cas du régime turbulent (Wang *et al.*, 2005b). Ainsi, en plus de leur taille, l’agrégation fait varier certaines propriétés des particules (entre autres, la masse volumique et les conductivités électrique et thermique) étant donné la porosité croissante qui en résulte.

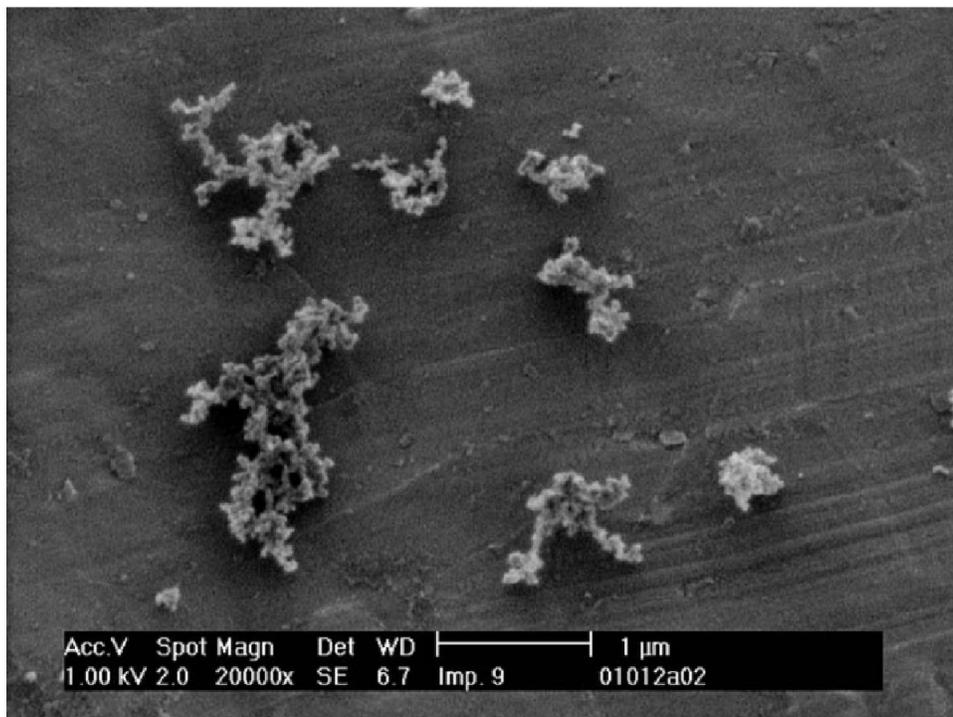


Figure 2.4 Particules de suie (Van Gulijk *et al.*, 2004).

2.5 Écoulement multiphasique et forces impliquées

Puisque la suie à filtrer est solide et qu'elle est portée par les gaz de combustion, l'écoulement traversant le filtre est un écoulement polyphasique. Les écoulements polyphasiques sont sujets à plusieurs forces et interactions hydrodynamiques qui ne sont pas présentes dans un écoulement monophasique. Parmi celles-ci, on peut compter les forces de Saffman, de Magnus, de Basset et de masse ajoutée (Finlay, 2001). La force de Saffman provient d'une vitesse inégale du fluide à différentes hauteurs de la particule. La force de Magnus résulte de la rotation de la particule, généralement induite par une collision. La force de Basset provient des sillons fait dans le fluide par la particule. La force de masse ajoutée a pour origine l'inertie supplémentaire que possède une particule en raison du fluide qui est aspiré dans son sillage et sert donc à prendre en compte cette inertie lors d'un changement de vitesse relative d'une particule par rapport au fluide. Il faut également prendre en compte l'influence des particules sur le fluide et celle des particules sur les autres particules. Par exemple, la présence de particules peut atténuer ou augmenter la turbulence du fluide porteur selon les circonstances (Brennen, 2005) (Oesterle, 2006).

En plus de ces forces spécifiques aux écoulements polyphasiques de type solide-liquide,

des forces plus classiques comme celle à l'origine du mouvement Brownien, celles de Van der Waals et la force électromagnétique peuvent influencer le déplacement des particules. Le mouvement Brownien provient de collisions aléatoires à l'échelle moléculaire (Sambaer *et al.*, 2011) et est non négligeable pour les particules inférieures au micromètre (Li et Ahmadi, 1993). Les forces de Van der Waals sont causées par des charges électriques locales sur les solides (dipôles). Elles sont généralement considérées comme responsables de l'adhésion des particules entre elles ou à une paroi (Oesterle, 2006). La force électromagnétique, elle, est fonction de la charge globale d'une particule (Kulkarni *et al.*, 2011). Elle peut influencer le déplacement des particules et en particulier de celles dont la taille est inférieure au micromètre (Kulkarni *et al.*, 2011). La force thermophorétique provient quant à elle d'un mouvement plus grand des molécules d'un fluide chaud par rapport à celui d'un fluide froid, ce qui résulte à une direction préférentielle du mouvement Brownien et force donc les particules vers les zones plus froides (voir Figure 2.5) (Kulkarni *et al.*, 2011). Malgré que la force thermophorétique provienne d'un biais du mouvement Brownien, aucun seuil (en gradient de température, en taille de particules,...) prédisant si la thermophorèse pouvait s'appliquer n'a été trouvé. Toutes les équations décrivant ces influences sur la trajectoire d'une particule ont été répertoriées par Guha (2008).

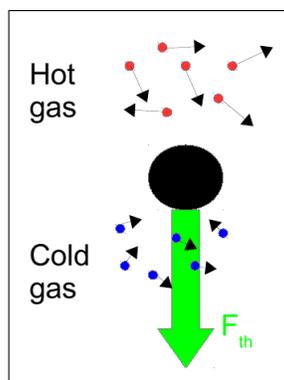


Figure 2.5 Source de la force thermophorétique.

2.6 Modélisation de FPDs

La modélisation d'un filtre particulaire diesel peut se faire à trois échelles : le filtre en entier, un canal ou un mur poreux. En 1984, Bisset a développé le premier modèle en 1D d'un écoulement au travers d'un canal et d'un mur poreux qui permettait d'évaluer le transport de plusieurs variables thermodynamiques comme l'énergie et les concentrations des différentes espèces (voir Figure 2.6) (Koltsakis *et al.*, 2013). Par la suite, pour une étude de l'impact de la

non uniformité de la déposition de la suie sur la régénération du filtre, le premier modèle 2D a été introduit (Konstandopoulos *et al.*, 2001a). Plus, récemment, un modèle en 3D, capable de prédire l'écoulement au travers d'un mur poreux, d'un canal et même de tout le filtre, a été conçu. Il s'agit d'un modèle multi-échelles pouvant être appliqué soit à une section du filtre, soit à l'intégralité de celui-ci (Konstandopoulos *et al.*, 2007). Enfin, un modèle prédisant l'efficacité de capture d'un filtre capable de prendre en considération les effets transitoires de la déposition de la suie a récemment été proposé (Zhong *et al.*, 2012). Pour une revue plus complète des avancements dans la modélisation des filtres particuliers diesel, consultez les articles de Konstandopoulos *et al.* (2007) et de Koltsakis *et al.* (2013).

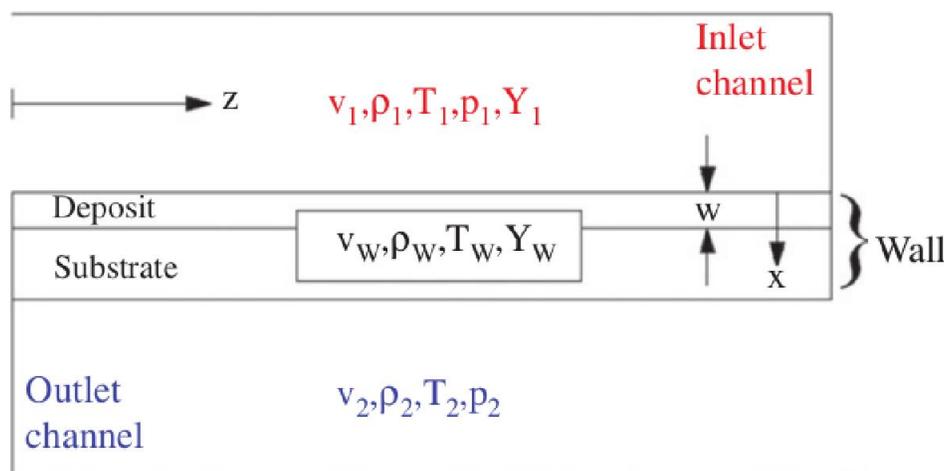


Figure 2.6 Modèle de Bisset (Koltsakis *et al.*, 2013).

Une équipe de chercheurs japonais a travaillé par ailleurs, sur la simulation d'un filtre particulaire diesel en utilisant la méthode de Boltzmann sur réseau (MBR). Ils ont obtenu l'écoulement au travers d'une section de paroi poreuse, et calculé les trajectoires des particules à partir du champ de vitesse obtenu (Tsushima *et al.*, 2010). Ils ont ainsi quantifié l'importance du phénomène de renardage dans le mur poreux d'un filtre de cordiérite et relevé l'importance de la structure microscopique du filtre particulaire. Ils ont également testé une gamme de vitesses du gaz à l'entrée et conclu qu'elle n'influencait pas réellement l'écoulement dans le milieu poreux. En effet, le nombre de Reynolds moyen dans le milieu poreux étant, au maximum, de l'ordre de 10^{-1} (pour un débit de gaz de combustion donnant un nombre de Reynolds de 150 000 à l'entrée du filtre) (Torregrosa *et al.*, 2011), l'écoulement est laminaire, les lignes de courants restent donc les mêmes. Le calcul du nombre de Reynolds

d'un écoulement dans un milieu poreux est donné par (Holdich, 2002) :

$$Re = \frac{\rho V}{(1 - \epsilon) S_v \mu} \quad (2.1)$$

où V est la vitesse superficielle du fluide, ρ sa masse volumique, ϵ la porosité du milieu, S_v la surface spécifique du milieu et μ la viscosité du fluide. Toutefois, étant donné la grande importance accordée au mouvement Brownien dans cet article (aucun autre mécanisme de filtration n'est mentionné), il est surprenant que la force thermophorétique, qui modifie le mouvement Brownien, n'ait pas été considérée. Enfin, la taille des particules traversant leur milieu poreux ne correspond pas vraiment à ce qui entre normalement dans un filtre particulaire. En effet, ils ont utilisé des particules de 1-10 nanomètres alors que la distribution de taille généralement admise se situe dans l'intervalle 18-800 nanomètres. Finalement, ils n'ont pas calculé l'efficacité de capture du filtre qu'ils ont simulé.

Plusieurs autres auteurs ont contribué à étudier l'impact de la microstructure sur la filtration. Certains se sont penchés sur l'effet de la microstructure d'un entassement de fibres sur des propriétés d'écoulement macroscopiques comme la perméabilité (Yazdchi *et al.*, 2012) (Yazdchi et Luding, 2013). Lors d'une étude portant sur l'impact de la distribution de la taille des pores (Ogyu, Kazutake *et al.*, 2008), il a été conclu qu'un écoulement homogène est favorable à la filtration. La longueur de dégradation, une grandeur caractéristique du milieu en lien avec la corrélation entre 2 points, a été introduite et reliée à la filtration (Fukushima *et al.*, 2007). La corrélation entre 2 points est la probabilité de trouver deux points d'une même phase (dans cette étude, la phase solide) séparés par une distance donnée. La longueur de dégradation, elle, est la distance pour laquelle l'extrapolation de la partie linéaire de la corrélation à 2 points vaut 0. Il a été démontré que la filtration était meilleure lorsque la longueur de dégradation est plus faible.

2.7 Objectifs spécifiques

Malgré les nombreuses avancées de la modélisation d'un FPD, certains phénomènes sont toujours négligés. C'est le cas de l'effet de la force thermophorétique sur la capture qui, malgré la présence de grands gradients de température dans le filtre, n'a pas, jusqu'à maintenant, reçu d'attention de la part des chercheurs. Aucune étude sur les liens entre la thermophorèse et la capture n'a été effectuée pour un cas réaliste de FPD.

Dans ce travail, une modélisation du mur poreux en 3D est proposée afin d'établir l'importance de la force thermophorétique sur la filtration des particules. Cela servira également de base pour un modèle multi-échelle permettant de représenter le régime transitoire et la variation du champ de vitesse qui en résultera.

L'objectif de ces travaux est de relier le pourcentage de capture des particules à des cas spécifique d'interaction avec la force thermophorétique. Ainsi, il sera possible d'améliorer la capture des particules dans le filtre sans nécessairement devoir augmenter la perte de charge en tirant profit de cette force. Plus spécifiquement ce travail propose de caractériser l'effet de la thermophorèse sur le mouvement des particules et leur capture

Ces objectifs seront poursuivis en résolvant les équations de Navier-Stokes du fluide traversant un élément de volume représentatif du filtre et en calculant les trajectoires des particules de suie. Cela sera réalisé à l'aide d'un modèle qui comprend trois étapes : la reconstruction d'un fragment de mur poreux de cordierite, l'obtention du champ de vitesse et l'obtention des trajectoires des particules.

CHAPITRE 3

MÉTHODOLOGIE

Dans ce chapitre, l'approche globale utilisée afin de réaliser ce projet sera décrite, les hypothèses et les simplifications utilisées seront posées, puis chacune des parties du modèle seront expliquée en détails.

3.1 3 étapes du modèle proposé

La première étape à accomplir pour simuler le mur poreux d'un filtre est de le construire numériquement. Pour la reconstruction d'un milieu poreux l'exercice est non-trivial et des techniques particulières ont donc été développées. Une de ces techniques est la reconstruction basée sur les fonctionnels de Minkowski (Arns *et al.*, 2002) (Mecke et Arns, 2005). Selon cette technique, un milieu est reconstruit en caractérisant la morphologie d'un grain, l'unité de base de la reconstruction, et en y reproduisant la bonne densité de ces grains. Une autre possibilité est le recuit simulé, une reconstruction stochastique qui minimise l'erreur avec un ou plusieurs fonctionnels (tel : fonction de corrélation entre 2 points, longueur de corde, etc.) décrivant le milieu à reconstruire (Fukushima *et al.*, 2007) (Vlachos et Konstandopoulos, 2006) (Rintoul et Torquato, 1997). Dans cette catégorie se retrouve l'algorithme de métropolis dont l'efficacité en 3D a été rapporté par Yeong et Torquato (1998b). Ils l'ont utilisée à partir des métriques structurelles que sont la fonction de corrélations entre 2 points et le trajet linéaire (Yeong et Torquato, 1998a). Le recuit simulé a été sélectionné, car il s'agit de la méthode la plus précise. Il est cependant très sensible à la géométrie initiale utilisée (Patelli et Schuëller, 2009).

Pour simuler un écoulement dans un milieu poreux, la méthode de Boltzmann sur réseau a été utilisée par le passé et est la plus appropriée en raison de la facilité à discrétiser un domaine aussi complexe et de sa capacité à être parallélisée efficacement (Vidal, 2008). Elle a été utilisée pour des filtres (Rebaï *et al.*, 2011), pour des écoulements polyphasiques (Lorenz *et al.*, 2009) (Parmigiani, 2011) et même pour simuler l'écoulement de filtres particuliers pour moteur diesel (Yang *et al.*, 2009) (Yamamoto *et al.*, 2006) (Stewart et Rector, 2004) (Muntean *et al.*, 2003). OpenWAM (Torregrosa *et al.*, 2011) a également servi à modéliser l'écoulement au travers de filtres. Ce modèle en 1D a été inspiré d'un modèle servant à décrire le mouvement des vagues (wave action model qui existe en 3D) (Müller et Natarov, 2003). Pour cette étude, la modélisation de l'écoulement a été effectué à l'aide de la MBR.

Enfin, pour simuler le déplacement des particules, il existe des méthodes lagrangiennes

(Maze *et al.*, 2007) (Qian *et al.*, 2013) (Pradhan *et al.*, 2013) (Rebaï *et al.*, 2011) ou eulériennes (Zhong *et al.*, 2012) (Konstandopoulos *et al.*, 2007) (Tandon *et al.*, 2010). Il est également possible de tenir compte de la turbulence et donc des variations de vitesses locales durant le trajet des particules (Wang et Squires, 1996). Le succès de modèles où la turbulence est influencée par les particules a également été rapporté (Truesdell et Elghobashi, 1994) (Boivin *et al.*, 2000). Une approche lagrangienne utilisant un algorithme de Runge-Kutta d'ordre 4 a été utilisée pour prédire la trajectoire des particules de suie (Vadeiko et Drolet, 2009). Cette approche permet de calculer la trajectoire des particules seulement à partir du champ de vitesse obtenu préalablement.

3.2 Hypothèses, simplifications et application au FPD

Le diamètre de mobilité des particules de suie considérées est compris entre 18 et 1000 nanomètres. La limite inférieure de cette distribution (en nombre) correspond à la taille des particules primaires (sans agglomération) (Konstandopoulos *et al.*, 2012). La limite supérieure a été établie de façon à englober les particules les plus grandes, sans avoir à extrapoler la courbe de distribution de façon significative (Figure 3.1) (Burtscher, 2005).

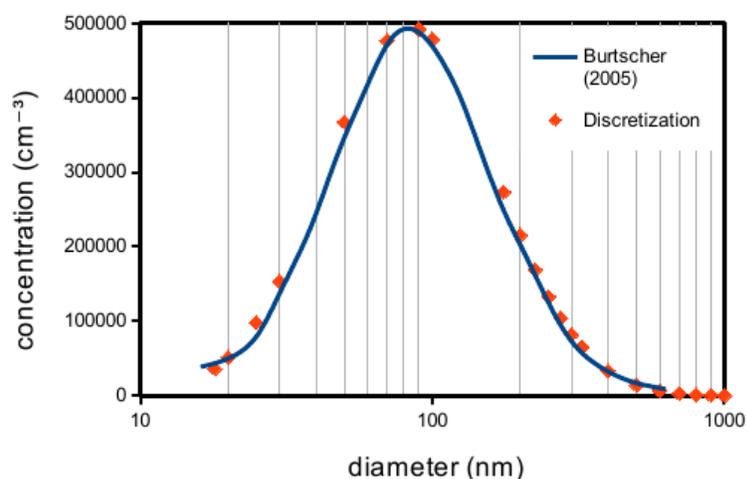


Figure 3.1 Distribution des particules de suie en fonction de leur diamètre de mobilité.

C'est cette dernière distribution qui est utilisée pour pondérer en nombre l'efficacité de capture des différentes tailles de particules et obtenir une efficacité globale du filtre. Il est à noter que l'effet de la force thermophorétique sera imprécise pour des particules inférieures à 30 nanomètres de diamètre, car leur nombre de Knudsen, défini comme le double du rapport entre le libre parcours moléculaire moyen et le diamètre des particules, est trop grand pour le

modèle qui ne peut gérer les effets de glissement thermique. Il en est ainsi car la température utilisée est trop élevée.

Lorsqu'un modèle d'écoulement polyphasique est développé, il est important d'en décider le niveau de couplage. On dit d'un modèle qu'il est couplé dans une direction si le mouvement du fluide influence le mouvement des particules. Il devient couplé dans deux directions si les particules influencent également le mouvement du fluide. Il est couplé à quatre directions si les interactions entre les particules s'ajoutent. Il est admis que le niveau de couplage n'a pas besoin d'excéder une direction lorsque la fraction volumique de la phase dispersée (ici, les particules solides), est inférieure à 10^{-6} (Oesterle, 2006). Selon les analyses de Kittelson, la fraction volumique des particules de suie dans les gaz d'échappement n'atteint jamais 10^{-6} pour un ratio molaire de diesel et d'air alimenté inférieur au double du ratio stoechiométrique (Kittelson, 1998). La faible fraction volumique des particules permet donc, qu'un couplage unidirectionnel soit utilisé pour le présent travail.

De toutes les forces citées précédemment (section 2.5), seulement quelques-unes seront utilisées pour la réalisation du modèle. En effet, lorsque l'écoulement polyphasique étudié est composé de particules solides portées par un gaz, les forces de Magnus, Basset, Saffman et de masse ajoutée peuvent être négligées, il reste donc, dans un contexte général, les forces de traînée et de gravité (Oesterle, 2006). De plus, pour les particules inférieures à 10 micromètres, la gravité et les rebonds mécaniques sur les murs sont aussi négligeables (Li et Ahmadi, 1993) (Oesterle, 2006). L'absence de rebond se traduit par une capture automatique des particules qui touchent une paroi, en raison des interactions électromagnétique entre cette-dernière et la particule. Pour les particules inférieures à 1 micromètre, le mouvement Brownien doit être ajouté puisqu'il joue un rôle important dans le mouvement des particules (Brennen, 2005). Dans le cas présent, les particules ont une taille qui varie entre 18 nanomètres et 1 micromètre ce qui signifie que le mouvement Brownien sera inclus dans le modèle. La force thermophorétique a également été prise en compte et fera l'objet d'une étude exhaustive.

L'agglomération des particules de suie ne semble pas avoir lieu dans un système d'échappement (Andrews *et al.*, 2000), bien que celles-ci ont indubitablement une nature fractale, ce qui indique qu'elles ont été formées par agglomération (Maricq et Xu, 2004). Les variations de la taille moyenne des particules qui sont rapportées dans le Tableau 3.1 pour le démarrage à froid sont supposées être dues à la déposition de particules de suie à la fin de l'utilisation précédente du montage expérimental (Andrews *et al.*, 2000). À la lumière de ces résultats, l'agglomération des particules de suie ne sera pas considérée dans ce travail. De plus, pour simplifier le problème, les propriétés physiques des aérosols seront considérées comme étant celles du graphite (voir plus loin Tableau 4.3) plutôt que de les faire varier en fonction du diamètre comme leur nature fractale le demanderait. De la même façon, les propriétés du

fluide porteur sont considérées égales à celles de l'air à 1000 K et à une pression de 1 atmosphère (voir plus loin Tableau 4.2). Cette pression est considérée indépendante de la vitesse d'écoulement et se justifie par le fait que la sortie du système de traitement des gaz de combustion est à une pression atmosphérique et que la perte de charge entre ces 2 points se doit d'être petite (inférieure à 200 mbar à laquelle s'ajoute la perte de charge due au convertisseur catalytique et à la tuyauterie).

GMD (nm)	avant le convertisseur catalytique	après le convertisseur catalytique	avant le second silencieux	pot d'échappement
30 s	164	125	180	136
10 min	87	87	85	87

Tableau 3.1 Diamètre moyen des particules de suies à différents endroits dans le système d'échappement (Andrews *et al.*, 2000)

Les débits standards rapportés pour un moteur diesel varient entre 0.0031 et 0.189 m^3/s (Zhong *et al.*, 2012). Le débit correspondant à un nombre de Reynolds, à l'entrée du FPD, de 150 000 est de 0.48 m^3/s (Torregrosa *et al.*, 2011). Des vitesses d'écoulement (0.005–0.22 m/s) correspondant à des débits de gaz de combustion variant entre 0.0125 et 0.55 m^3/s ont été utilisés dans ce projet afin de couvrir la gamme de débits usuels d'opération et même légèrement au-delà. Aucune simulation avec un débit inférieur à 0.0125 m^3/s n'a été effectuée car, à ce débit, la filtration est déjà complètement dominée par les effets Browniens. Le dépassement de débit sert à simuler des conditions d'écoulement qui pourraient localement dépasser les valeurs moyennes usuelles (par exemple du fait du colmatage de certains canaux). L'écoulement du gaz au travers du mur poreux est considéré stationnaire dans le cadre de cette étude.

Afin de vérifier si la thermophorèse pouvait avoir un impact dans la capture des particules de suie dans un FPD, la vitesse thermophorétique que les particules pouvaient atteindre a été comparée à leur vitesse engendrée par le mouvement Brownien, qui, pour ces tailles de particules, est considéré non négligeable. La vitesse à laquelle une particule se déplace en raison de la force thermophorétique est donnée par (Kulkarni *et al.*, 2011) :

$$v_{th} = \frac{2\left(\frac{k_g}{k_p}\right)k_g \nabla T}{5P\left(1 + \frac{2k_g}{k_p}\right)} \quad (3.1)$$

où k_g est la conductivité thermique du gaz en $kg\ m/K\ s^3$ et k_p celle des particules (ici celle de la graphite est utilisé), P est la pression en $kg\ m^{-1}s^{-2}$ (ici la pression atmosphérique)

et ∇T est le gradient thermique en K/m. Un portrait du profil de température radial plus complet (voir Figure 3.2) a été obtenu par une expérience dans laquelle la suie contenue dans un filtre est brûlée dans un four où le filtre entier a été déposé (Schmidt *et al.*, 2007). Un gradient de température maximal de 7000 K/m semble une valeur commune à quelques-unes de ces études (Koltsakis *et al.*, 2013) (Schmidt *et al.*, 2007) et sera donc utilisé afin de vérifier si la force thermophorétique peut avoir une influence dans certaines zones critiques du filtre. Ces zones (voir Figure 3.3) représentent un peu plus de la moitié du filtre et sont situées vers l'extérieur de celui-ci. Ce gradient thermique engendre une vitesse de $1.6 \times 10^{-8} \text{ m/s}$, ce qui est non négligeable, en comparaison aux autres contributions à la vitesse des particules comme le mouvement Brownien (environ $3 \times 10^{-11} \text{ m/s}$). Il est à noter que ceci ne prend pas en considération les gradients locaux de température. Ceux-ci peuvent dépasser cette valeur dans certains cas ; par exemple, la variation de température à l'intérieur d'une couche de suie déposée peut atteindre jusqu'à 40°C si suffisamment de suie est déposée. Cela mènerait à des gradients plus élevés d'un ordre de grandeur que ceux utilisés dans ce travail (Chen *et al.*, 2011).

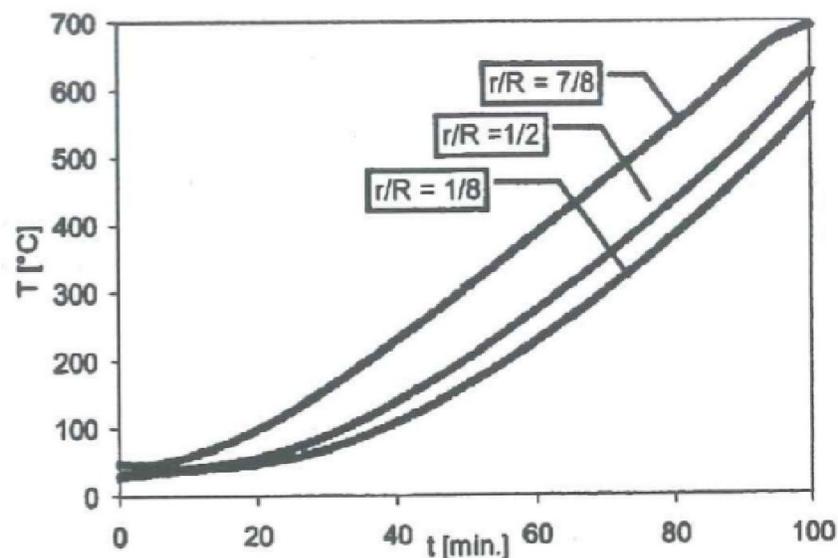


Figure 3.2 Température en trois points dans un FPD (Schmidt *et al.*, 2007).

L'effet de la température sur la densité du fluide porteur, et donc sur son écoulement, a été négligé puisqu'il n'affecte l'écoulement que de manière à augmenter la vitesse moyenne de moins de 1 % comme le montre la Figure 3.4 obtenue à l'aide de COMSOL. L'écart de température entre les extrémités du mur poreux n'est que de 2.1 K.

La modélisation des phénomènes importants dans un FPD doit se faire à au moins deux

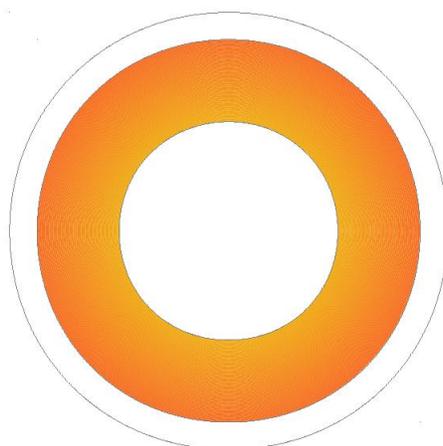


Figure 3.3 Coupe de face d'un FPD illustrant la zone où les gradients de température sont conséquents (zone colorée) calculée d'après (Schmidt *et al.*, 2007).

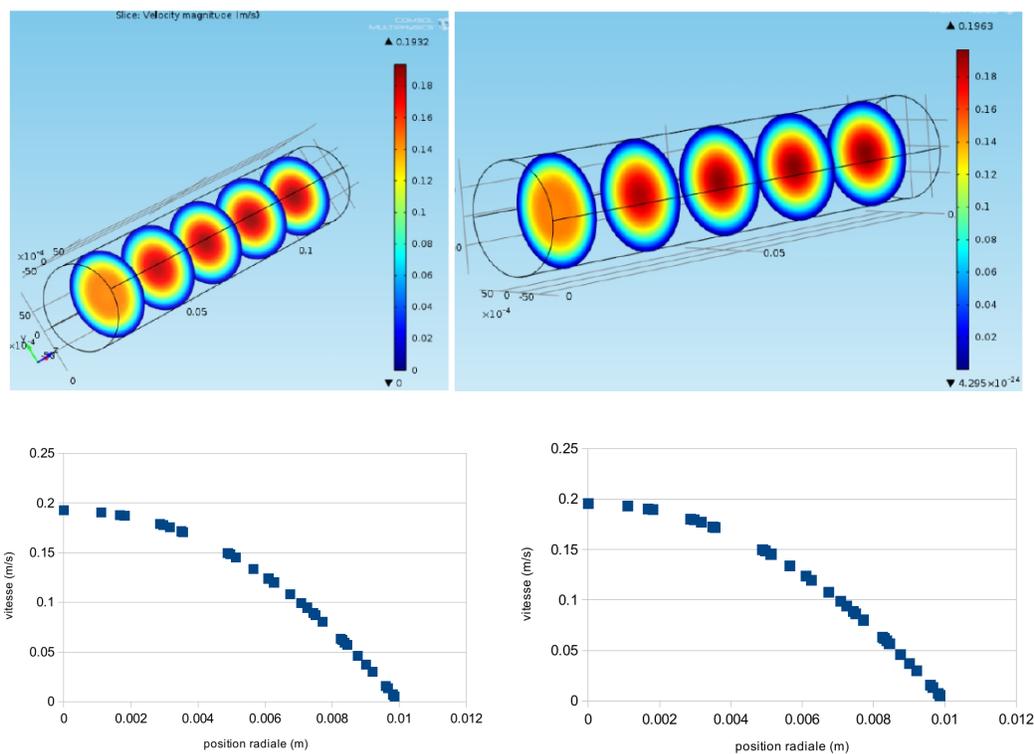


Figure 3.4 Comparaison d'un profil de vitesse isotherme (à gauche) et d'un profil de vitesse présentant une variation de 2.1 K (à droite).

échelles :

- l'échelle du mur, afin de bien représenter la filtration et l'écoulement dans le milieu poreux ;
- l'échelle du monolithe, afin d'observer les tendances générales et les zones préférentielles de l'écoulement (voir Figure 2.2 pour les 2 échelles).

Cette étude est donc la première étape d'un modèle permettant de prédire la capture dans l'intégralité du filtre en y ajoutant les phénomènes à l'échelle du monolithe.

3.3 Reconstruction du milieu poreux

À l'échelle du mur (celle de cette étude), il faut d'abord créer un milieu pour les simulations. Pour s'assurer que l'écoulement simulé est similaire à celui se produisant dans le milieu poreux réel, la perméabilité du milieu réel et reconstruit sont comparées. Pour reconstruire le mur poreux la technique de recuit simulé, " Simulated Annealing ", a été choisie puisqu'elle est la méthode de reconstruction la plus précise et que la perméabilité est une valeur très sensible à la géométrie (Patelli et Schuëller, 2009). Un algorithme permettant de reconstruire un milieu poreux selon la technique du recuit simulé a donc été développé pour ce travail. Les alternatives sont l'algorithme génétique et les méthodes basées sur le principe d'entropie maximum. Pour une comparaison plus complète entre ces trois méthodes, le lecteur pourra se référer à l'article de Patelli et Schuëller (2009). En utilisant une taille de maille de 1 micromètre, un milieu correspondant à un mur de filtre monolithique en cordiérite a été généré. Ce milieu est discrétisé en $300 \times 300 \times 300$ voxels (cubes correspondant à la plus petite résolution dans le milieu, équivalent du pixel mais en 3 dimensions). Cette taille de domaine a été obtenue en suite à des augmentations graduelles jusqu'à ce que les corrélations statistiques décrites plus loin soient bien respectées et que la perméabilité soit semblable à celle rapportée. Elle correspond à l'épaisseur du mur de cordiérite standard dans un FPD (Torregrosa *et al.*, 2011). Un autre critère qui contraint la taille du domaine généré provient de la mécanique des fluides et en particulier de la longueur dite de Brinkman (Jaganathan *et al.*, 2008). La longueur de Brinkman est une échelle permettant de déterminer si le domaine est suffisamment grand pour représenter fidèlement le milieu. Ce critère est donc respecté si cette inéquation est vraie :

$$300 \times 1\mu m > 14 \times \sqrt{k} = 7.25\mu m \quad (3.2)$$

où k est la perméabilité du milieu et le terme de gauche est la taille physique du domaine perpendiculairement à l'écoulement. Le critère est donc respecté et le milieu suffisamment grand.

Les fonctions de corrélation entre 2 points et de trajet linéaire d'une section du mur de cordierite sont décrites dans l'article de Vlachos et Konstandopoulos (2006). Avec ces informations sur la structure microscopique du mur et une méthode de métropolis basée sur la fonction de corrélation entre 2 points et le trajet linéaire comme celle utilisée par Yeong et Torquato (1998a), un milieu poreux similaire à celui de la cordierite a été reconstruit à l'aide d'un code de calcul que nous avons implanté (voir Figure 3.5). Dans ce code, la fonction de corrélation entre 2 points est calculée en comptant le nombre d'occurrences où 2 points solides sont séparés par une distance donnée dans les trois directions principales (x,y,z), et en divisant le tout par le nombre d'essais (nombre de mailles utilisées dans le plan orthogonal à la direction étudiée multiplié par le nombre de paires de plans séparés par la distance donnée). Le trajet linéaire, quant à lui, est calculé en considérant le nombre de lignes d'une certaine longueur entrant dans les différents pores, dans chacune des 3 directions principales, puis en normalisant ce nombre par la taille totale du domaine (en nombre de voxels).

La distribution de phase dans le milieu est initialisée aléatoirement de façon à ce que la porosité soit respectée. Ici, une porosité de 50 % est utilisée afin d'être cohérent avec les métriques structurelles rapportées par Vlachos et Konstandopoulos et qui seront utilisées par notre algorithme de reconstruction. Par la suite, les voxels sont déplacés de façon à ce que les fonctions mentionnées précédemment s'approchent de leur fonction de référence respective (voir Figure 3.6) selon un algorithme de type " spin-exchange " (Patelli et Schuëller, 2009). Lorsque 20 000 déplacements sont refusés de façon consécutive, l'algorithme s'arrête et la structure désirée est obtenue. Lorsque l'algorithme veut échanger deux points de même phase (solide ou espace vide), le déplacement n'est ni accepté ni refusé et deux nouveaux points sont choisis. Un déplacement est accepté s'il permet de réduire la pseudo-énergie du système donnée par :

$$E = \sum_x (S(x) - S_{exp}(x))^2 + (L(x) - L_{exp}(x))^2 \quad (3.3)$$

où S et L sont la corrélation à 2 points et le trajet linéaire du milieu reconstruit respectivement et S_{exp} et L_{exp} , la corrélation à 2 points et le trajet linéaire obtenus expérimentalement par Vlachos et Konstandopoulos (2006). Si l'énergie du système augmente avec un déplacement, la probabilité d'accepter tout de même le déplacement est donnée par :

$$P^0 = e^{(-\Delta E/T^0)}, \quad (3.4)$$

où ΔE est la variation d'énergie engendrée par le déplacement et T^0 un paramètre variant dans le temps nommé (pseudo) température. Il est à noter que l'algorithme ne calcule que les variations d'énergie qu'un déplacement provoque, plutôt que de recalculer, à chaque itération, les corrélations sur l'ensemble du milieu (Yeong et Torquato, 1998a). Cela signifie que,

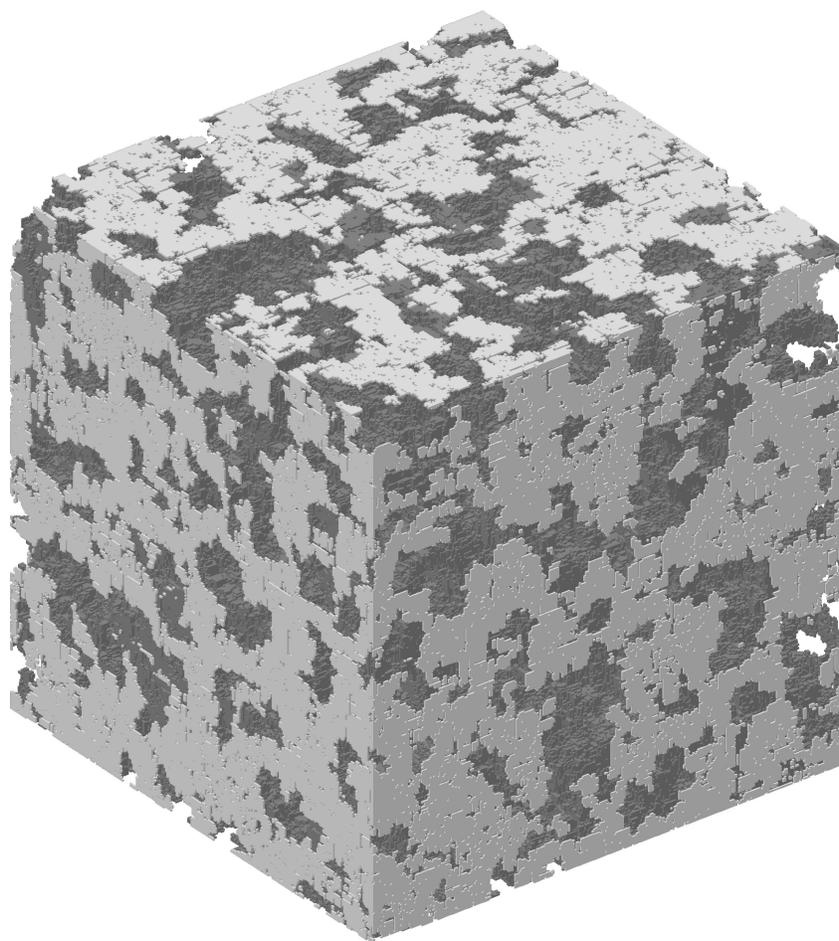


Figure 3.5 Mur poreux de cordiérite reconstruit.

lorsque deux voxels de phases différentes sont sélectionnés, les corrélations statistiques sont calculées pour 6 vecteurs (correspondants à chacun des axes, x, y et z, pour chacun des 2 voxels) avant et après le changement de phase. Les corrélations sur l'ensemble du milieu sont donc obtenues en les connaissant avant le déplacement, et en sachant ce qui a été perdu et gagné durant le déplacement. La température doit diminuer dans le temps afin de réduire la probabilité d'accepter un déplacement qui ne minimise pas l'énergie et parvenir à obtenir une convergence. Une fonction de température de

$$T^0 = 0.003/i \quad (3.5)$$

a été utilisée pour l'algorithme de métropolis puisqu'un refroidissement rapide donne de meilleurs résultats, où i représente le numéro de l'itération en cours (Manwart *et al.*, 2000). Le comportement du code a été vérifié avec quelques fonctions de températures différentes, mais c'est celle-ci qui a été retenue. La constante de proportionnalité est ainsi ajustée à 0.003, de telle sorte que la probabilité d'accepter le déplacement à la première itération est d'environ 50% (Yeong et Torquato, 1998a). Cela permet de réduire le risque que le milieu reconstruit corresponde à une configuration pour laquelle la pseudo-énergie atteint un minimum local.

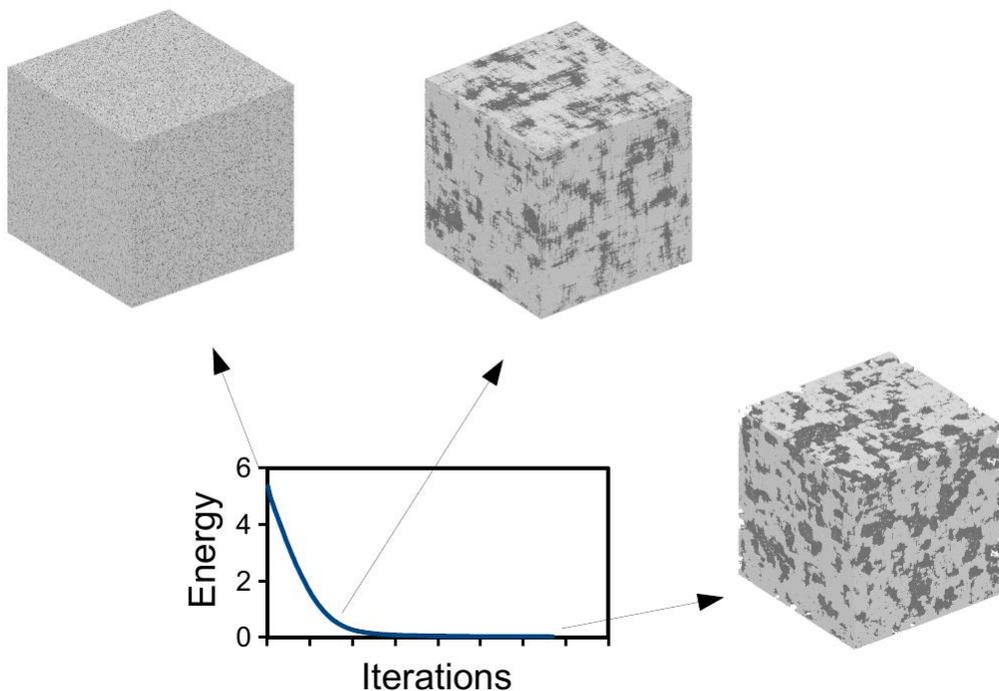


Figure 3.6 Évolution de la reconstruction du mur poreux de cordiérite avec le code développé.

La perméabilité présentée dans l'article (voir Chapitre 4) est une moyenne des perméa-

bilités calculées dans chacune des trois directions principales par le code de Boltzmann sur réseau utilisé pour la simulation du mouvement du fluide au travers du milieu. Cette méthode est décrite dans la prochaine section. Le code a été testé pour plusieurs tailles de domaines et de mailles, ainsi que pour un critère d'arrêt différent (nombre de déplacements refusés consécutifs avant la fin de la simulation). Plus précisément, des tailles de domaines de $10 \times 10 \times 10$, $50 \times 50 \times 50$, $100 \times 100 \times 100$ et $200 \times 200 \times 200$ voxels ont été testées en plus du milieu final de $300 \times 300 \times 300$. Afin d'ajuster les paramètres de reconstruction, des tailles de mailles entre 0.1 et 100 micromètres ont été utilisées. Le critère d'arrêt a été varié entre 2 et 20 000 000. L'impact du germe initialisant le générateur de nombres aléatoires, responsable de l'initialisation de la solution ainsi que de la sélection des voxels à permuter, a également été étudié. Il en est ressorti que différents germes donneront différentes solutions, mais aucun germe donnant une meilleure solution pour l'ensemble des tailles du domaine n'a pu être identifié.

Tous les milieux standards ont été obtenus avec les corrélations :

$$S(x) = 0.25e^{(-103250x)} + 0.25 , \quad (3.6)$$

et

$$L(x) = 0.5e^{(-61972x)} . \quad (3.7)$$

Ce sont ces corrélations qui déterminent quel sera le matériau reconstruit et ses propriétés.

3.4 Utilisation de l'équation de Boltzmann pour simuler un écoulement

Dans cette section, un bref aperçu de la théorie cinétique des gaz sera exposé afin de camper les bases de la méthode de Boltzmann sur réseau. Puis, la version de la MBR utilisée dans ce travail sera décrite.

3.4.1 Théorie cinétique des gaz

La méthode de Boltzmann sur réseau découle de la théorie cinétique des gaz. Une des équations principales de cette théorie est l'équation de Boltzmann qui décrit la probabilité de trouver une population à un point donné, à un instant donné et pour une direction donnée :

$$[\partial t + \frac{\vec{p}}{m} \partial x + \vec{g} \partial p] f(\vec{x}, \vec{p}, t) = \Omega \quad (3.8)$$

Selon cette équation, cette probabilité s'exprime selon la fonction de distribution $f(x, p, t)$. Le vecteur \vec{x} représente les coordonnées spatiales, \vec{p} représente la quantité de mouvement

linéaire, t le temps, Ω est l'opérateur de collision qui sera décrit plus loin, \vec{g} représente une ou plusieurs forces externes et m est la masse de la particule. La fonction de distribution a été introduite par Maxwell ; elle représente la probabilité de trouver une particule de gaz ayant une vitesse dans un intervalle donné (Kremer, 2010). Dans l'équation de Boltzmann présentée précédemment, l'opérateur de collision doit tenir compte de la probabilité de deux particules de se retrouver au même endroit en même temps. Cette probabilité fait à son tour intervenir une troisième particule, et ainsi de suite, ce qui est connu sous le nom de hiérarchie BBGKY (Succi, 2001). Pour résoudre cette suite de dépendance infinie, Boltzmann a posé plusieurs hypothèses :

- les particules peuvent être considérées comme des points dispersés dans l'espace, interagissent donc sur des périodes très courtes : le temps de collision.
- un chaos moléculaire est considéré, c'est-à-dire que les vitesses des particules ne sont pas corrélées avant leur collision (Kremer, 2010). Ainsi, les particules ne s'influencent pas les unes les autres en dehors de leurs collisions et suivent donc leur trajectoire librement entre celles-ci.
- l'effet des forces externes est négligeable durant le temps d'interaction entre deux particules (Kremer, 2010).
- entre deux collisions, la fonction de distribution ne varie pas beaucoup.
- enfin, puisque le fluide est considéré comme étant constitué de points dispersés dans l'espace, les collisions binaires sont considérées beaucoup plus probables que les collisions impliquant un plus grand nombre de particules (Kremer, 2010).

Avec ces hypothèses, les probabilités de trouver deux particules au même endroit et, donc d'entrer en collision, ne dépendent plus des autres particules environnantes, ce qui permet de fermer le système d'équations (Kremer, 2010). Il est important de noter qu'une composante de la vitesse d'une particule est indépendante d'une autre composante lui étant orthogonale (Kremer, 2010). La vitesse d'une particule est également considérée indépendante de la position de celle-ci (Nourgaliev *et al.*, 2003). Son calcul est fondé sur la masse d'une molécule et sur son énergie cinétique. L'énergie cinétique d'un gaz est liée à sa température par la constante de Boltzmann et donne lieu à une distribution de vitesse plus large lorsque la température augmente. En l'absence de force sur le fluide, il est supposé que la probabilité de trouver une particule avec une vitesse donnée dans toutes les directions est la même (Kremer, 2010). Cette probabilité peut être interprétée comme une fraction de la masse de fluide en un point étant donné le très grand nombre de particules qui sont présentes. C'est par cette équivalence entre la probabilité et la fraction de la masse, découlant de la loi des grands nombres, que l'on peut calculer les déplacements des populations. Pour plus de détails ainsi que le développement mathématique menant à la fonction de distribution, se référer au livre

de Kremer (2010).

La prochaine difficulté de l'équation de Boltzmann est l'opérateur de collision, qui est intégrodifférentielle non linéaire (Succi, 2001). Ces collisions mènent les populations vers un état d'équilibre local décrit par la distribution de Maxwell-Boltzmann. Ainsi, une nouvelle simplification est apportée par Bhatnagar, Gross et Krook qui ont trouvé que les collisions peuvent être approximées par (Succi, 2001) :

$$\Omega = \frac{f^0 - f}{\tau^0} \quad (3.9)$$

où $f = f((x, p, t)$, τ^0 est le temps de relaxation, c'est-à-dire le temps entre deux collisions :

$$\tau^0 = \frac{\mu}{\rho c_s^2 \partial t} \quad (3.10)$$

et f^0 est la distribution de Maxwell-Boltzmann :

$$f^0 = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp \left[-\frac{(\vec{e} - \vec{u})^2}{2RT} \right] \quad (3.11)$$

où D est le nombre de dimensions de l'espace étudié. Afin de discrétiser cette expression en perdant le moins de précision possible, une expansion en série de Taylor d'ordre 2 en vitesse est utilisée :

$$f^0 = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp \left[-\frac{\vec{e}^2}{2RT} \right] \left(1 + \frac{(\vec{e} \cdot \vec{u})}{RT} + \frac{(\vec{e} \cdot \vec{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\vec{e}^2}{2RT} \right) + O(\vec{u}^3) \quad (3.12)$$

C'est de cette étape que découle la contrainte sur le nombre de Mach pour la méthode de Boltzmann sur réseau, puisque cette expansion n'est valide que lorsque (Guo et Shu, 2013)

$$|\vec{u}|/\sqrt{RT} \ll 1 \quad (3.13)$$

3.4.2 Méthode de Boltzmann sur réseau

La méthode de Boltzmann sur réseau (MBR), lorsqu'utilisée pour la mécanique des fluides, représente une alternative à la résolution des équations de Navier-Stokes par des méthodes de volumes finis ou d'éléments finis. Elle est généralement utilisée pour son maillage structuré facile à mettre en place et sa grande capacité à être parallélisée grâce à la localité des opérations. Il est généralement admis que ses caractéristiques font de la MBR la méthode de choix pour la résolution des écoulements dans un milieu poreux (Succi, 2001). Elle sera donc adoptée pour le présent travail.

L'échelle de la méthode est mésoscopique. Cette échelle, qui est située entre l'échelle microscopique et macroscopique, observe des regroupements de particules nommés populations. En fait, ce sont les mouvements et les collisions de populations de ces particules qui sont suivis par la méthode. Le maillage de cette méthode est composé de cellules uniformes. Il existe différents types de réseaux qui correspondent aux directions de propagation qu'il est possible de prendre pour les populations lors de leurs déplacements. Dans le code de calcul utilisé pour ce travail, les réseaux sont de type D3Q15. D3 signifie que les réseaux sont tridimensionnels et Q15 signifie qu'il y a 15 directions de propagation possibles pour une population (incluant la stagnation). Donc, une population peut uniquement se rendre aux centres des faces, aux sommets des cellules ou encore rester sur place tel qu'illustré sur la Figure 3.7.

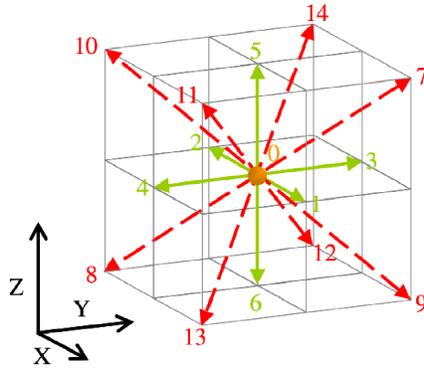


Figure 3.7 Directions considérées dans un réseau D3Q15 (Vidal, 2008).

Pour que la méthode de Boltzmann sur réseau puisse donner les mêmes résultats que Navier-Stokes, les poids w_i associés aux directions c_i doivent être choisis de façon à ce que l'expansion de la distribution à l'équilibre respecte la quadrature (Guo et Shu, 2013) :

$$\int \vec{e}^k f^0 de = \sum_i w_i \vec{c}_i^k f^0(\vec{c}_i), \quad 0 \leq k \leq 3 \quad (3.14)$$

La quadrature utilisée est Gauss-Hermite donc les poids sont :

$$w_0 = \frac{2}{9}; \quad w_{1-6} = \frac{1}{9}; \quad w_{7-14} = \frac{1}{72} \quad (3.15)$$

par conséquent, les fonctions de distributions directionnelles peuvent être définies :

$$f_i(\vec{x}, t) = w_i f(\vec{x}, \vec{c}_i, t) \quad (3.16)$$

et ces fonctions à l'équilibre, pour un D3Q15 sont (Vidal *et al.*, 2010) :

$$f_i^0(x, t) = w_i \rho \left[1 + 3 \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{u})}{c_s^2} + \frac{9(\vec{c}_i \cdot \vec{u})^2}{2c_s^4} + \frac{3(\vec{u} \cdot \vec{u})}{2c_s^2} \right] \quad (3.17)$$

La forme finale de l'équation est donc :

$$f_i(\vec{x}, t) = f_i(\vec{x} - \vec{c}_i \partial t, t - \partial t) - \frac{f_i(\vec{x} - \vec{c}_i \partial t, t - \partial t) - f_i^{eq}(\vec{x} - \vec{c}_i \partial t, t - \partial t)}{\tau^*} \quad (3.18)$$

$$\text{où } \tau^* = \tau^0 + 1/2 \quad (3.19)$$

Une façon commune de traiter les populations à l'équilibre est d'inclure la force externe dans le calcul :

$$f^{eq} = f^0 + \tau^* F \quad (3.20)$$

où F est la discrétisation de la force externe. Toutefois, dans le code utilisé pour ce travail,

$$f^{eq} = f^0 \quad (3.21)$$

et la force externe imposée a pour effet d'ajouter des populations dans toutes les directions dont la projection, par rapport au sens de l'écoulement, est strictement positive, et d'en enlever dans toutes les directions dont la projection, par rapport au sens de l'écoulement, est strictement négative. Par exemple, pour une perte de charge imposée, les populations seront modifiées de la façon suivante :

$$f(\vec{x}, \vec{c}_i, t) = f(\vec{x}, \vec{c}_i, t) + \frac{\vec{c}_i \cdot \vec{g}}{\|\vec{c}_i \cdot \vec{g}\|} \|\vec{g}\| \quad \forall i | \vec{c}_i \cdot \vec{g} \neq 0 \quad (3.22)$$

$$\text{où } \|\vec{g}\| = \frac{1}{bc_s^2} \frac{\|\Delta P\|}{n_x} \quad (3.23)$$

b étant le nombre de directions non perpendiculaires à l'écoulement et n_x le nombre de mailles dans le sens des x (sens de l'écoulement). Selon la classification de (Guo et Shu, 2013), cette façon d'imposer une force laisse des termes résiduels proportionnels à la divergence de \vec{g} et à sa variation dans le temps. Dans l'utilisation présente de l'imposition de la force, ces termes sont nuls et ne posent donc pas de problèmes. En effet, la force imposée n'étant qu'un gradient de pression constant, ses dérivées temporelles et spatiales sont nulles. Comme tous les termes résiduels sont fonctions de ces dérivées, ils s'annulent et l'erreur engendrée par cette partie spécifique de l'algorithme est donc inexistante.

L'équation de Boltzmann peut être vue comme une division des phénomènes dynamiques en 2 étapes : la propagation (terme de gauche) et la collision (terme de droite). Cette sépa-

ration, à l'intérieur même de l'équation, se répercutera sur l'algorithme utilisé pour résoudre l'équation, qui sera lui aussi divisé en ces deux étapes se succédant. La méthode de Boltzmann sur réseau a une précision d'ordre deux en temps lorsqu'elle est dérivée correctement (Malaspinas, 2009). En ce qui concerne l'ordre de précision en espace, elle est dépendante des conditions frontières utilisées. Dans le présent code, les conditions frontières aux interfaces liquide-solide sont de types rebond à mi-chemin (Vidal, 2008). Ce type de conditions frontières signifie que le mur est situé à la moitié de la distance qui sépare deux cellules. Les populations qui percutent une frontière sont retournées après un pas de temps. La figure 3.8 représente ce qui se produit sur une de ces frontières. Cette procédure est également utilisée pour la méthode de rebond, ce qui semble moins cohérent, puisque cela signifie qu'une population se déplace deux fois plus vite lorsqu'elle percute une frontière (Guo et Shu, 2013). Les populations sortant du liquide, à l'instant t , vont frapper le mur avant de se rendre au noeud qu'elles auraient atteint s'il avait été liquide, ce qui les fait revenir au noeud d'où elles sont parties. À l'instant $t + \Delta t$, ces mêmes populations sont toujours dans la cellule, mais en sortiront dans la direction opposée. Il a été démontré que le rebond à mi-chemin conserve une précision d'ordre deux (He *et al.*, 1997).

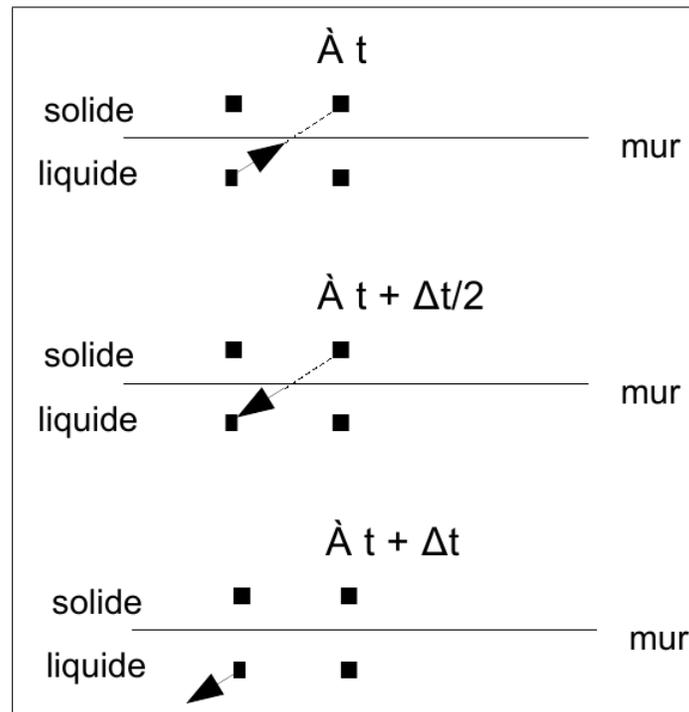


Figure 3.8 Condition frontière de rebond à mi-chemin.

Lorsqu'une population de particules quitte le domaine de calcul, le type de conditions

frontières utilisé est dit périodique. Cela signifie que les populations sortantes à une extrémité, entrent à l'extrémité opposée comme s'il s'agissait de cellules adjacentes.

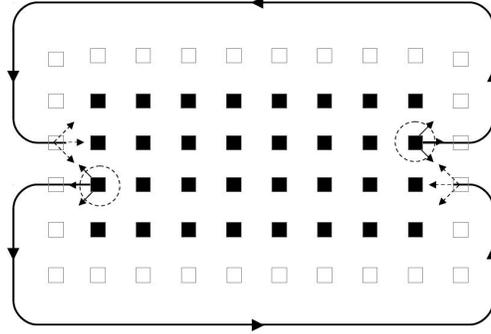


Figure 3.9 Condition frontière périodique (adapté de Vidal, 2008).

La Figure 3.9 montre comment deux populations sortantes sont réinjectées à l'entrée au moment même où elles sortent. La propagation de la sortie vers l'entrée et la propagation de l'entrée vers la sortie par l'extérieure du domaine se produit de la même façon.

Puisque la MBR sert à obtenir la solution des équations de Navier-Stokes dans ce travail, il est important de pouvoir retrouver les propriétés macroscopiques de l'écoulement. La MBR permet de récupérer des moments d'ordres suffisamment élevés pour permettre la conservation de la densité, la vitesse macroscopique, et l'énergie cinétique du fluide. La densité du fluide s'exprime avec les variables de la MBR selon :

$$\rho = \sum_{i=0}^{14} f_i , \quad (3.24)$$

la vitesse macroscopique du fluide (\vec{u}) :

$$\vec{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^{14} f_i \vec{c}_i , \quad (3.25)$$

et l'énergie cinétique (E_k) :

$$E_k = \frac{1}{2\rho} \sum_{i=0}^{14} f_i (\vec{c}_i - \vec{u})^2 . \quad (3.26)$$

où f_i est le nombre de populations dans la direction i et \vec{c}_i est le vecteur de la vitesse des populations se déplaçant dans la direction i .

Puisque le modèle utilisé est valide pour des fluides peu compressibles, les simulations doivent comporter un faible nombre de Mach ($Ma \ll 1$). Ce nombre \vec{u}/c_s , où c_s représente

la vitesse du son du réseau. On a de plus (Vidal *et al.*, 2010) :

$$c_s = \sqrt{\frac{3(1-w_0)}{7}} \frac{dx}{dt} \quad (3.27)$$

Pour le D3Q15, $w_0 = 2/9$ de tel sorte que :

$$c_s = \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{dx}{dt} . \quad (3.28)$$

En pratique, une limite de 0.2 pour le nombre de Mach doit être respectée en tout point du réseau pour que la simulation soit suffisamment précise. Cette contrainte est très importante pour la MBR puisque, pour la satisfaire, une simulation avec un nombre de Reynolds élevé, doit avoir des pas de temps et d'espace petits, ce qui devient rapidement extrêmement coûteux en temps de calcul.

3.5 Trajectoire de particules

La trajectoire des particules est calculée à partir du champ de vitesse du fluide porteur obtenue à l'aide de la méthode de Boltzmann sur réseau. Elle est calculée selon une méthode lagrangienne et utilise un algorithme de Runge-Kutta pour résoudre les équations différentielles de la position et de la vitesse des particules. Ces équations (3.29 et 3.30) prennent en compte les contributions de la traînée (déterministe) et du mouvement Brownien (stochastique) (Vadeiko et Drolet, 2009) :

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v} \quad (3.29)$$

et

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \gamma(\vec{V} - \vec{v}) + \vec{\Gamma} , \quad (3.30)$$

où \vec{V} est la vitesse du fluide porteur, $\vec{\Gamma}$ une force de Langevin représentant le mouvement Brownien et γ l'inverse multiplicatif du temps de relaxation de la particule :

$$\frac{1}{\gamma} = \tau = \frac{m * c_c}{3\pi D_p \mu} \quad (3.31)$$

avec m la masse de la particule, D_p son diamètre, c_c le coefficient de correction de Cunningham et μ la viscosité du fluide. Le coefficient de correction de Cunningham sert à prendre en compte le glissement entre les particules et le fluide. La solution de l'équation de la vitesse

de la particule et sa discrétisation en temps donne :

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t)e^{-\gamma\Delta t} + \gamma e^{-\gamma\Delta t} \int_0^{\Delta t} e^{\gamma t'} \vec{V} dt' + e^{-\gamma\Delta t} \int_0^{\Delta t} e^{\gamma t'} \vec{\Gamma}(t + t') dt' \quad (3.32)$$

En considérant que la vitesse du fluide est une fonction continue, il est possible d'en faire l'expansion en série de Taylor. Cette expansion sera utilisée pour corriger l'effet de la traînée sur la particule suite à son déplacement dû au mouvement Brownien. En effet, la composante déterministe du déplacement est calculée en premier, puis la contribution stochastique est ajoutée pour obtenir le déplacement total de la particule. Or, puisque la contribution déterministe dépend de la position de la particule qui, elle, dépend de la contribution stochastique, une correction est ajoutée pour tenir compte de la position réelle de la particule qui tient compte des deux contributions.

Il est ensuite nécessaire de calculer l'intégrale de la force de Langevin, ce qui fait entrer en jeu des processus de Wiener définis comme :

$$\vec{W}^0(\Delta t, \omega) = \int_0^{\Delta t} e^{-\gamma(\Delta t - t')} \vec{\Gamma}(t + t') dt' = \sqrt{\frac{K_B T}{m}} * \sqrt{1 - e^{-2\gamma\Delta t}} * \vec{Y}_0 \quad (3.33)$$

où K_B est la constante de Boltzmann et les composantes de \vec{Y}_0 des nombres aléatoires avec 0 de moyenne qui se situent dans l'intervalle $[-1,1]$. Le processus de Wiener est un processus stochastique à temps continu qui permet de modéliser le mouvement Brownien (en résolvant l'intégrale précédente). Des processus de Wiener d'ordres supérieurs sont également utilisés dans le code et la façon de les obtenir est décrite en annexe de l'article original sur la conception de celui-ci (Vadeiko et Drolet, 2009).

Une particule est considérée capturée lorsque la distance séparant son centre de la cellule solide la plus proche est inférieure à son rayon. En ce sens, l'algorithme est de type "freeze". Cette hypothèse est supportée par la taille des particules (Li et Ahmadi, 1993) et par le nombre de Knudsen de l'écoulement (Maze *et al.*, 2007). Le nombre de Knudsen est défini comme étant le ratio entre le libre parcours moyen moléculaire et une grandeur caractéristique (le diamètre des pores pour l'écoulement ou celui des particules pour le coefficient de traînée) :

$$Kn = 2 \frac{\lambda}{D} \quad (3.34)$$

avec

$$\lambda = \lambda_0 * \left(\frac{101,325}{P}\right) * \left(\frac{T}{293}\right) * \left(1 + \frac{110}{293}\right) / \left(1 + \frac{110}{T}\right) \quad (3.35)$$

où λ est le libre parcours moléculaire moyen et λ_0 est cette quantité mesurée à 293 K et 101 325 $kg\ m^{-1}s^{-2}$. Le pas de temps utilisé est fixé en fonction de la vitesse moyenne du fluide.

Lorsque la taille des particules est très petite et que leur temps de relaxation dépasse un certain seuil tel que

$$\tau > \frac{5}{V_{max}} \quad (3.36)$$

où V_{max} est la vitesse maximale du fluide, les équations sont alors résolues à l'aide d'un schéma implicite et menant à la résolution d'un système matriciel. Pour plus de détails sur les schémas numériques utilisées pour le calcul des trajectoires de particules, le lecteur est invité à consulter (Vadeiko et Drolet, 2009).

3.5.1 Ajout de la force thermophorétique

La force thermophorétique a été ajoutée au modèle pour tester son impact sur la capture. Lorsque cette force est ajoutée, l'équation différentielle régissant la vitesse d'une particule (équation 3.30) change et devient (Li et James Davis, 1995) :

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \gamma(\vec{V} - \vec{v}) + \vec{\Gamma} - \frac{3}{m}\pi D_p \mu \beta \zeta \delta \nabla T \quad (3.37)$$

avec

$$\beta = \frac{3}{2} \frac{\mu}{\rho T}, \quad (3.38)$$

$$\zeta = \frac{1}{(1 + 3Kn)}, \quad (3.39)$$

et

$$\delta = \frac{\lambda_r + 15/8Kn}{1 + 2\lambda_r + 15/4Kn} \quad (3.40)$$

où λ_r est le ratio entre la conductivité thermique du fluide et celle de la particule. La température doit être exprimée en Kelvin (Hinds, 2012). Cette équation est valide pour un régime d'écoulement presque continu et de Knudsen, c'est-à-dire pour des nombres de Knudsen particulaire entre 0.2 et 20 (Li et James Davis, 1995). La force thermophorétique est donc traitée comme une force de traînée thermique dans le code et n'impacte pas la partie stochastique de l'équation 3.37. En raison de la taille des particules considérées dans ce travail, la possibilité que le terme de thermophorèse pousse les particules dans le sens du gradient de température a été négligée. En effet, ce phénomène appelé thermophorèse négative ne peut avoir lieu que sous certaines conditions, notamment pour des particules de taille inférieure au nanomètre (Wang et Li, 2012). De plus, Ce phénomène découle d'un transfert incomplet de la quantité de mouvement, le négliger est donc cohérent avec les hypothèses découlant de la méthode de Boltzmann sur réseau traitant de la collision des molécules de gaz comme des collisions de sphères solides. Puisque les gradients de température sont toujours orientés vers le centre du

filtre, leur angle relatif à l'écoulement au travers d'un mur poreux dépendra de la position de celui-ci dans le filtre. Ainsi, à l'intérieur d'un même filtre, la thermophorèse ne n'agira pas sur les particules de suie de la même façon partout. Afin de valider son importance dans plusieurs cas de figure trois cas spécifiques ont été retenus (voir Figure 3.10), à savoir : lorsque le gradient thermique pousse les particules dans le même sens que l'écoulement (cas du haut sur la figure 3.10), lorsqu'il les pousse dans le sens inverse de l'écoulement (deuxième cas sur la figure 3.10), et lorsqu'il les pousse perpendiculairement au sens de l'écoulement (troisième cas sur la figure 3.10). Étant donné la petite taille du domaine de simulation, le gradient de température a été considéré constant sur l'ensemble du domaine.

3.6 Plan expérimental

Afin d'étudier l'impact de la force thermophorétique sur la capture des particules de suie, 12 milieux poreux différents ont été sélectionnés. Tous représentent un mur de cordiérite construit à partir de l'algorithme de recuit simulé décrit à la Section 3.3. Sept de ces milieux ont été obtenus à partir de corrélations standards et choisis selon un algorithme basé sur la densité de données, garantissant une représentativité statistique (Chaudhuri, 1994). Les milieux ont été répartis dans l'espace en fonction de la trace de leur tenseur de perméabilité, de l'écart-type entre les termes diagonaux et de la somme des termes non-diagonaux (près de 0) de ce tenseur. Les cinq autres milieux ont été générés à partir de corrélations statistiques modifiées. Pour chacun de ces murs poreux, trois pertes de charge ont été appliquées de façon à obtenir les vitesses d'écoulement moyennes voulues (0.005 m/s, 0.11 m/s et 0.22 m/s) correspondant aux débits standards pour un filtre particulaire diesel. Les pertes de charge appliquées sont donc, pour le mur de référence, par exemple, de $66 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-2}$, $1338 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-2}$ et $2678 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-2}$ ce qui est bien moindre que la perte de charge autorisée dans un FPD. Pour chacun des 3 champs de vitesse obtenus, la capture a été calculée en utilisant les trois cas spécifique pour la force thermophorétique ainsi que le cas sans thermophorèse. Cette étude a nécessité un total d'environ 240 simulations. Les propriétés du fluide, des particules et de l'écoulement considérées pour ces simulations sont résumées aux Tableaux 4.2, 4.3 et 4.4, respectivement.

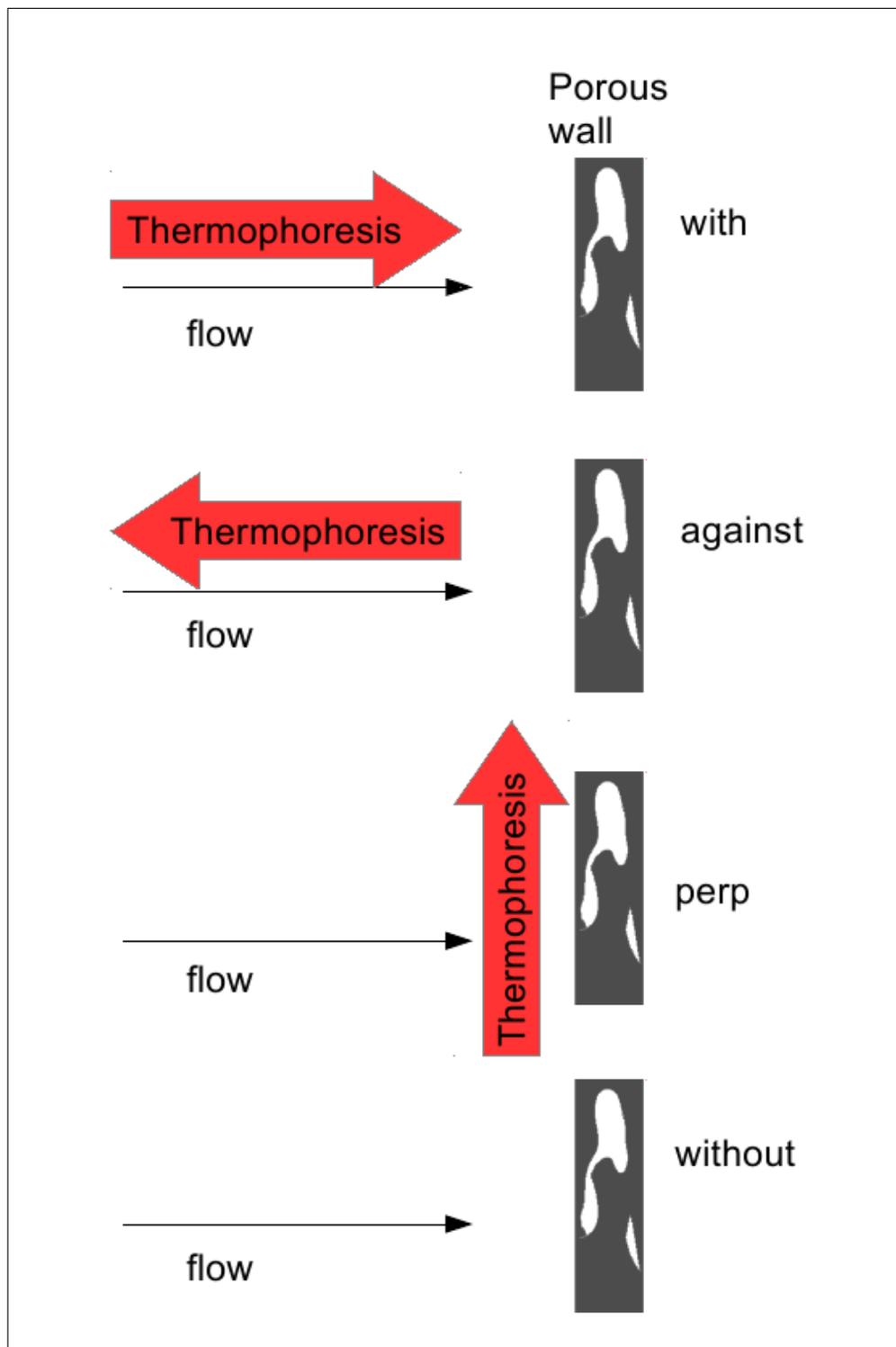


Figure 3.10 Présentation des cas de thermophorèse considérés dans ce travail (de haut en bas) : le cas “avec”, le cas “contre”, le cas “perp”, et le cas “sans”.

Propriété	Valeur
Conductivité thermique (kg m/K s ³)	6.75×10^{-2}
Masse volumique (kg/m s)	3.53×10^{-1}
Viscosité (kg/m s)	4.15×10^{-5}
Température (K)	1.00×10^3
Pression (kg/m s ²)	1.01×10^5
Libre parcours moyen (m)	3.36×10^{-7}

Tableau 3.2 Propriétés du fluide porteur.

Propriété	Valeur
Conductivité thermique (kg m/K s ³)	1.19×10^2
Masse volumique (kg/m s)	2.20×10^3
Diamètre (m)	$[1.80 \times 10^{-8} - 1.00 \times 10^{-6}]$

Tableau 3.3 Propriétés des particules.

Nombre adimensionnel	Valeur
Knudsen	3.84×10^{-2}
Reynolds	$[6.00 \times 10^{-5} - 2.00 \times 10^{-2}]$
Stokes	$[3.92 \times 10^{-7} - 7.07 \times 10^{-1}]$
Knudsen particulaire	$[6.72 \times 10^{-1} - 3.73 \times 10^1]$

Tableau 3.4 Propriétés de l'écoulement.

CHAPITRE 4

ARTICLE 1 : Numerical investigation of the impact of thermophoresis on the capture efficiency of diesel particulate filters

Ce chapitre rapporte l'article soumis en décembre 2014 au Canadian Journal of Chemical Engineering, et synthétisant les résultats obtenus à l'aide du modèle présenté au chapitre précédent.

Numerical investigation of the impact of thermophoresis on the capture efficiency of diesel particulate filters

Guillaume Matte-Deschênes, David Vidal, François Bertrand*

URPEI, Chemical Engineering Department, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Qc, Canada, H3C 3A7

Robert E. Hayes

Department of Chemical and Materials Engineering, University of Alberta, Edmonton, AL, Canada T6G 2G6

19 janvier 2015

Abstract

The purpose of the present study was to investigate the impact of thermophoresis on soot capture in the clean cordierite porous wall of a diesel particulate filter (DPF). A three-step numerical model was developed, that consists of : (1) the numerical reconstruction of a representative volume of the cordierite porous wall, (2) the computation of gas flow through the porous wall using the lattice Boltzmann method, and (3) the prediction of DPF capture efficiency based on the resolution of a modified Langevin equation that takes thermophoresis into account. The validity of the approach was verified by carefully comparing the permeability predictions of a reconstructed cordierite porous wall to data from the literature. The impact of the magnitude and orientation of the thermophoretic force on the capture of soot particles of various sizes under different flow conditions was investigated. The thermophoretic force applied in or against the flow direction affected the particle capture significantly, depending on particle size and flow velocity. Our results also suggested that thermophoresis can

*Corresponding author : francois.bertrand@polymtl.ca

potentially affect soot deposition uniformity in DPFs. Since the thermophoretic force mainly impacted soot capture efficiency in the presence of particle and flow inertia, a dimensionless quantity defined as the product of Stokes and Reynolds numbers is proposed to predict the onset of what can be called thermophoresis-enhanced inertial impaction. While similar results have been reported by others using simple flow geometries, this is the first time, to our knowledge, that this phenomenon has been reported for a complex cordierite porous wall.

Keywords : diesel particulate filter, thermophoresis, filtration efficiency, modeling, lattice Boltzmann method

4.1 Introduction

Global demand for diesel fuel has witnessed constant growth in recent decades and is predicted to continue growing for the next two to three decades. One major oil and gas company has even forecast up to 75% growth in demand over the 2010-2040 period (Exxon-Mobil, 2013). In addition to the expansion of the transportation industry, the increase can be explained by the numerous advantages of diesel over gasoline. For example, diesel engines are more efficient, emit less CO_2 , and have longer life spans than gasoline engines. On the other hand, diesel engines emit approximately ten times more particulate matter, i.e., soot, which are harmful both for the environment and human health. The automotive industry introduced diesel particulate filters (DPF) in the 1980s in order to remove particulates from engine exhaust gas.

The inner structure of a DPF consists of several thousand narrow parallel channels arranged in a checkerboard pattern, with extremities alternately open and closed to force the gas to flow radially through the porous wall, which is commonly made of cordierite or silicon carbide (see Figure 4.1). The filtration process usually proceeds through a number of cycles. When the filter is clean or freshly regenerated, soot is captured in the porous wall. Eventually, as the wall gets clogged with soot, in-depth filtration is gradually replaced by wall surface filtration until the pressure drop through the wall and the soot filter cake becomes too high. The filter is then regenerated by active means such as increasing the temperature of the exhaust gas by, for instance, burning additional fuel. Once cleaned, a new filtration

cycle starts.

In addition to high filtration efficiency, the main requirements for DPFs are compactness, low back pressure generation, thermal and mechanical resistance, long lifespan, and good regeneration capability. Most of these requirements are contradictory, making the design of an optimal filter quite challenging. Furthermore, in response to increasingly stringent regulations that mandated, e.g., a decrease in particulate emissions from 0.1 to 0.0045 g/km over the 1996-2014 period in Europe, the performance of DPFs must be constantly improved, which requires a better understanding of the capture dynamics of soot particles in DPFs.

Initial soot capture inside the inner porous wall of a DPF involves three main mechanisms : diffusion, interception, and inertial impaction. Since the diameters of the soot particles to be removed ranges from 18-1000 nm (Burtscher, 2005), all three mechanisms usually play a significant role in the capture process. Their respective importance mainly depends on the flow conditions, the porous structure of the filtering medium, and the size of the soot particle. Diffusion is usually the dominant mechanism for particle diameters of 100 nm and less (Hinds, 2012). Interception occurs at larger particle diameters, usually in the 100-800 nm range, when the gas flow streamline brings soot particles within one particle radius of the surface of the filtering medium, resulting in particle impingement on the medium. Lastly, in the case of even larger soot particles and sudden changes in flow direction, particles may also swerve from the streamlines due to inertia, setting them on a collision course with the filtering medium and resulting in inertial impaction.

Given the multi-scale nature of the transport phenomena involved and their interactions, numerical modeling is considered a useful approach for developing an in-depth understanding of the phenomena and for designing better filters. Shortly after DPFs were introduced by the industry, Bisset (1984) proposed the first 1D model of gas flows through both the channels and the wall of a DPF in order to evaluate the transport of many thermodynamic variables involved, including energy, and species (Koltsakis *et al.*, 2013). Konstandopoulos *et al.* (2000) studied the relationship between aging, soot loading, and pressure drops across a DPF while

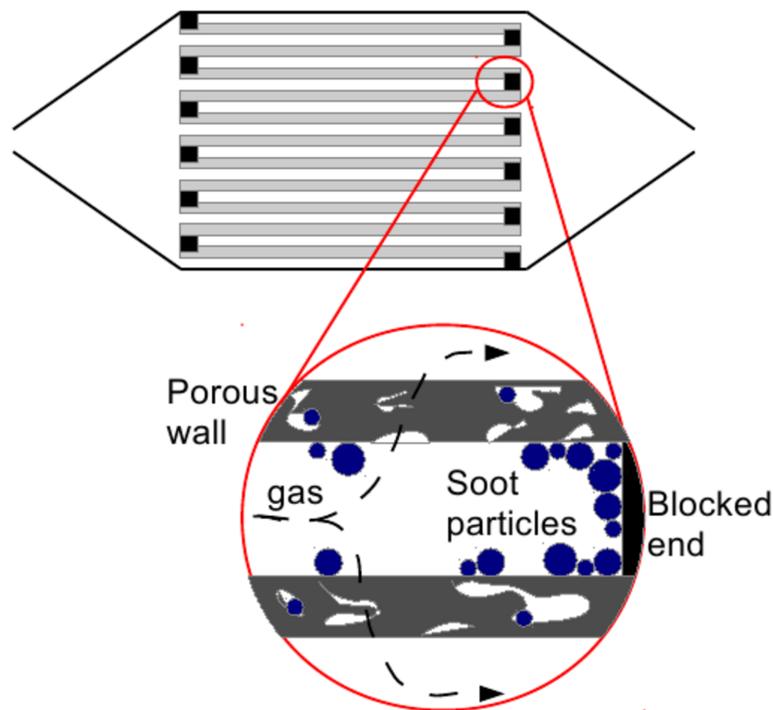


Figure 4.1 Side view of a DPF with soot capture.

Konstandopoulos (2000) investigated soot deposition and the interactions of the particles with the deposited soot particles as a function of several parameters, including the incidence angle, rebound angle, and velocity. The soot deposition non-uniformities can significantly affect regeneration time and thus DPF performance as evidenced by Konstandopoulos *et al.* (2001a). Muntean *et al.* (2003) predicted the trajectories of soot particles through a porous wall using the lattice Boltzmann method (LBM). Oxarango *et al.* (2003) simulated with FluentTM soot loading in a bundle of channels. Konstandopoulos *et al.* (2007) developed 2D and 3D multi-scale models based on the LBM to study gas flows through a portion of or an entire DPF. Simulation of a full-scale DPF was achieved by solving with openFOAM[®] software Navier-Stokes equations that include a resistance term to account for the porous walls. More recently, Bensaid *et al.* (2010) used a multi-fluid model to study the impact of various operating conditions on filter regeneration, while Zhong *et al.* (2012) developed a model to study soot build-up inside the wall of a DPF and used it to predict filtration

efficiency. The development of the numerical models described has been supported by a series of experimental results. More details on the various numerical models for DPFs can be found in recent reviews (Konstandopoulos *et al.*, 2007; Koltsakis *et al.*, 2013).

Experiments have been conducted on passive regeneration using various catalysts and low temperatures (Koltsakis *et al.*, 2013) and on active regeneration (Valencia *et al.*, 2013; Pidria *et al.*, 2007). These studies showed that large temperature gradients occur inside DPFs, with the highest temperatures occurring at the center of the filter (Schmidt *et al.*, 2007; Koltsakis *et al.*, 2013). Schmidt *et al.* (2007) reported radial temperature gradients of up to 7000 K/m in a zone ranging from one-half to seven-eighths of the DPF radius, or over 50% of the total filter area. While the effects of these gradients on the combustion of soot particles have been studied (Schmidt *et al.*, 2007), their impact on soot capture has not been investigated, especially in a context where both the wall and the flow are the same temperature.

Particles in a fluid with a temperature gradient are attracted toward cooler regions by a phenomenon known as thermophoresis. The thermophoretic force is proportional to the temperature gradient, as described by the following equation :

$$\vec{F}_{th} = -3\pi D_p \mu \beta \zeta \delta \vec{\nabla} T, \quad (4.1)$$

where

$$\beta = \frac{3}{2} \frac{\mu}{\rho_f T}, \quad (4.2)$$

$$\zeta = \frac{1}{1 + 3Kn}, \quad (4.3)$$

$$\delta = \frac{\lambda_r + \frac{15Kn}{8}}{1 + 2\lambda_r + \frac{15Kn}{4}}, \quad (4.4)$$

T is the temperature, ρ_f is the density of the fluid, μ is the viscosity of the fluid, λ_r is the ratio of the thermal conductivities of the fluid and particles, and Kn is the particle Knudsen number defined as the fluid mean free path λ divided by the particle radius ($D_p/2$). Thermophoretic deposition in different contexts or geometries has also been studied (Kon-

standopoulos et Rosner, 1995; Johnson et Kittelson, 1996; Shi et Harrison, 2001; Crane *et al.*, 2002; Messerer *et al.*, 2003; Ström et Sasic, 2012). However, to our knowledge, the effect of thermophoresis on particle capture in the porous wall of a DPF has not been well documented and has never been formally investigated. Given the magnitude of the reported temperature gradients (Schmidt *et al.*, 2007) and the size of the zone where they occur, thermophoresis likely has a significant impact on capture dynamics.

The purpose of the present study was to develop a model to predict the capture efficiency of the inner porous wall of a DPF and to assess the impact of thermophoresis. A model based on a three-step procedure was developed that consists of : (1) the reconstruction of a portion of the porous wall using the simulated annealing (SA) technique, (2) the computation of gas flow through the porous medium using the LBM, and (3) the computation of soot particle trajectories through the wall by solving a modified Langevin equation that takes the thermophoretic force into account. This multi-step approach will be described in detail. The properties of a reconstructed cordierite porous structure and the resulting hydraulic properties predicted by the LBM model will then be compared to data from the literature. Lastly, the analysis of the effect of thermophoresis and the importance of the thermophoresis in designing DPFs will be discussed.

4.2 Methodology

Modeling soot particle capture in the cordierite porous wall of a DPF can be divided into three distinct parts, which can be treated separately. In the absence of tomographic data from a cordierite sample, a representative volume of the porous wall can still be reconstructed from experimental statistical structural correlations obtained from the literature. Then, considering that the soot volume fraction is lower than 10^{-6} , the interaction between the gas flow and the particle trajectories can be treated through a one-way coupling (Kittelson, 1998), which consists of computing the air flow using the LBM without taking disturbances from aerosols into account, and using the resulting flow field to calculate the particle trajectories by solving

a modified Langevin equation that takes thermophoresis into account. These three steps are described in greater detail in subsequent sections. Lastly, in this section, we provide a description of the numerical experiments performed to determine the impact of thermophoresis on the capture mechanisms.

4.2.1 Reconstruction of the cordierite porous wall

We reconstructed a fragment of a porous cordierite DPF wall using a classic simulated annealing (SA) technique, which belongs to a class of Metropolis algorithms and relies on an energy minimization procedure. It has been chosen over genetic algorithms or the maximum entropy reconstruction technique because it has been reported to be the most precise of the three methods (Patelli et Schuëller, 2009).

With the SA technique, the porous medium to be reconstructed is approximated by a set of voxels, each carrying one of two phases, i.e., solid or void. Starting with an initial random phase configuration, the SA technique iteratively inverts the randomly selected voxel phase and verifies whether this makes the new phase configuration more similar to the real medium, which is evaluated by determining the total pseudo-energy of the configuration. The selected algorithm uses a spin-exchange inversion, which means that two voxels of opposite phases are selected at a time and their phases are inverted, unlike spin-flip inversion where only one voxel is selected and its phase flipped. Spin-exchange inversion has the advantage of conserving the exact porosity of the initial configuration (Patelli et Schuëller, 2009). The pseudo-energy of the system is determined by comparing the statistical phase correlations of a real sample with those of the medium to be reconstructed.

While one statistical phase correlation can be employed, two are often used to determine the pseudo-energy of a given configuration. Indeed, a two-point correlation is not sufficient to reconstruct a medium with similar hydraulic characteristics to those of the real porous media, because of the lack of phase connectivity information. Because of this, like others, we combined, two-point and lineal-path correlations (Patelli et Schuëller, 2009; Yeong et

Torquato, 1998a). The two-point correlation function related to a domain Ω is defined as :

$$S(d) = \sum_{\Omega} \frac{\delta_s(d)}{n_t(d)}, \quad (4.5)$$

where $\delta_s(d)$ and $n_t(d)$ are, respectively, the total number of pairs of solid voxels and the number of pairs of voxels separated by a distance d . The lineal-path correlation function is defined as :

$$L(l) = \sum_{\Omega} \frac{\omega_s(l)}{n_{\Theta}}, \quad (4.6)$$

where $\omega_s(l)$ is the number of line segments of length l starting from a specific voxel that fits entirely in the void phase of the medium, and n_{Ω} is the total number of voxels within the domain Ω . Note that these statistical correlations are calculated using the reference frame orthogonal directions and are considered identical in each of these directions since the medium to reconstruct is isotropic. The total pseudo-energy of a given configuration Ω was thus defined by :

$$E(\Omega) = \sum_{d,l} [(S(d) - S_{exp}(d))^2 + (L(l) - L_{exp}(l))^2], \quad (4.7)$$

where S_{exp} and L_{exp} refer, respectively, to the two-point and lineal-path correlations obtained experimentally from a real fragment of cordierite. The energy minimization procedure of the SA technique accepts every proposed phase inversion that reduces the current total pseudo-energy of the system (i.e. $\Delta E = E(\Omega_{after}) - E(\Omega_{before}) \leq 0$) while conditionally accepting the ones that increase it with the following probability :

$$P = \exp(-\Delta E/T_0), \quad (4.8)$$

where T_0 is an arbitrary dimensionless fictitious temperature of the system and ΔE is the energy variation generated by the phase inversion. The SA procedure uses fast cooling to increase precision (Yeong et Torquato, 1998a). To reduce the probability of an increase in

pseudo-energy toward the end of the reconstruction procedure, which might prevent convergence, the temperature T_0 was taken inversely proportional to the number of iterations performed and was chosen such that the probability of conditionally accepting a “bad” inversion is approximately 50% at the beginning and decreases over time. In the present study, the reconstruction ended when 20,000 inversion attempts were consecutively rejected. A typical value of the energy obtained at the end of the reconstruction procedure was approximately 2×10^{-2} compared to over 5 at the beginning. Figure 4.2 illustrates the SA reconstruction procedure.

The statistical phase correlations obtained from a real fragment of cordierite using scanning electron microscopy as reported by Vlachos 2006 used here are :

$$S_{exp}(d) = 0.25 \times \exp(-103250 \times d) + 0.25 \quad (4.9)$$

and

$$L_{exp}(l) = 0.5 \times \exp(-61972 \times l) . \quad (4.10)$$

The cordierite porous medium had a porosity of 50% and was discretized using a domain composed of $300 \times 300 \times 300$ voxels with a grid spacing of $1 \mu\text{m}$. Initially, the voxels were randomly flagged as solid or void. This domain size was chosen in order to reproduce the real thickness of a cordierite porous wall in a DPF (i.e., around $300 \mu\text{m}$). Since the positions of the solid voxels were only governed by mathematical functions and were not constrained by physics, it was possible for one voxel or small group of voxels (i.e., 200 voxels or fewer) to be isolated and not connected to the rest of the solid phase, especially when close to the boundaries of the domain. Because of the unphysical nature of these small groups of voxels, they were filtered out of the medium, although the impact of this filtering was negligible both visually and in terms of porosity. The final porosity was $50.29\% \pm 0.02\%$ for all the reconstructed domains, which was acceptably close to the 50% porosity target.

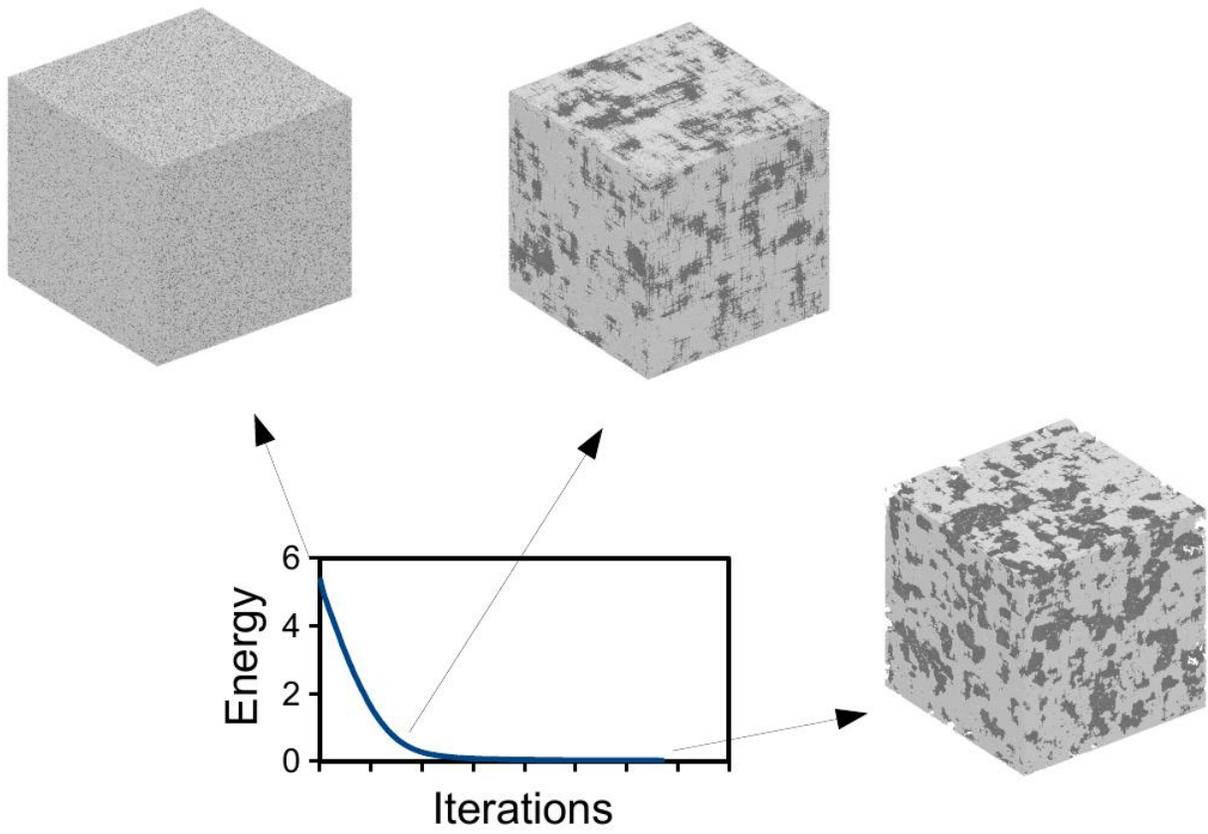


Figure 4.2 Illustration of the simulated annealing reconstruction procedure.

4.2.2 Simulation of air flow through the porous wall

Once a representative volume of cordierite has been reconstructed, the flow of a gas through it can be computed using the LBM, which is the method of choice for simulating flows through complex porous media (Vidal *et al.*, 2009). The flow field obtained was used to determine the hydraulic permeability of the porous medium and to calculate the soot particle trajectories.

Unlike the conventional CFD methods that solve the Navier-Stokes equations directly, the macroscopic flow behavior is recovered by the LBM from a mesoscopic representation of the fluid. Formally, the LBM involves the discretization of the Boltzmann equation in space (\vec{x}), velocity (\vec{e}), and time (t). The Boltzmann equation from the kinetic gas theory describes the evolution of the probability distribution function of a fluid particle, noted $f(\vec{x}, \vec{e}, t)$, based on its microdynamic interactions, i.e., propagation and collisions with other particles.

In the LBM, the probability distribution function $f(\vec{x}, \vec{e}, t)$ is represented by particle populations. Discrete populations of particles, noted $f_i(\vec{x}, t)$, propagate and collide at every time step Δt on a discrete Cartesian lattice, with spacing Δx and along n_d velocity directions \vec{e}_i , where $i = \{1, \dots, n_d\}$ and n_d is the number of discrete directions considered. We used a D3Q15 lattice, i.e., a 3-D lattice with $n_d = 15$ velocity directions (Vidal *et al.*, 2010). At each iteration, $f_i(\vec{x}, t)$ moving in direction \vec{e}_i at position \vec{x} and time t was updated using the following expression :

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) + \Omega_{coll}[f_i(\vec{x}, t)] , \quad (4.11)$$

where $\Omega_{coll}[f_i(\vec{x}, t)]$ is the collision term. Particle collisions were modeled using the Bhatnagar-Gross-Krook approximation (Succi, 2001), which is a simple approximation of relaxation to local equilibrium. The collision term Ω_{coll} in Eq. (4.11) is given by :

$$\Omega_{coll}[f_i(\vec{x}, t)] = \frac{f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau} , \quad (4.12)$$

where $f_i^{eq}(\vec{x}, t)$ is the equilibrium particle population [see (Succi, 2001) for a detailed expression] and τ is the dimensionless relaxation time that is related to fluid viscosity μ and density ρ :

$$\tau = 3 \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{\mu}{\rho} + \frac{1}{2}. \quad (4.13)$$

Local density ρ and macroscopic fluid velocity \vec{u} were obtained, respectively, from the particle populations :

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^{15} f_i(\vec{x}, t) \quad (4.14)$$

and

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^{15} f_i(\vec{x}, t) \vec{e}_i. \quad (4.15)$$

Starting from initial conditions and using appropriate boundary conditions, the LBM scheme described in Eq.(4.11) was stepped in time until convergence was reached. The LBM scheme is explicit, which means the population update at a given lattice node is a local operation since it only requires the populations of the immediate neighboring nodes. This makes it well adapted to distributed parallelization.

Parameters	Values
Dimensionless relaxation time, $\tau(-)$	1.00
Lattice spacing, Δx (m)	1.00×10^{-6}
Time step, Δt (s)	1.42×10^{-9}
Convergence criterion, $(d\ \vec{u}\ /dt)/(d\ \vec{u}\ /dt)_{max}$ (-)	10^{-8}
Initial local fluid densities, $\rho(\vec{x}, 0)$ (kg/m ³)	0.00
Initial local fluid velocities, $\vec{u}(\vec{x}, 0)$ (m/s)	$\vec{0}$

Tableau 4.1 Numerical parameters used for all LBM simulations. For the convergence criterion, $\|\cdot\|$ represents the Euclidean norm.

Table 4.1 summarizes the LBM numerical parameters used for our simulations performed with the parallel LBM implementation described in (Vidal *et al.*, 2010). Three classical boundary conditions for porous media were used. First, the boundary conditions at the periphery

of the domain were periodic, which means that any out-going population re-enters the domain on the opposite side. Second, to impose a pressure drop in a given \vec{e}_j direction, a body force pointing in this direction was added to each population pointing in a direction not normal to \vec{e}_j . Combined with periodic boundary conditions, this “trick” adequately enforces the prescribed pressure gradient (Bertrand *et al.*, 2012). Third, the no-slip wall boundary conditions on the inner solid surfaces of the porous domain were modeled using the classical half-way bounce-back rule, which reflects any in-coming populations to the wall in the opposite direction at the next iteration (Succi, 2001).

This scheme led to the solution of the transient incompressible Navier-Stokes equations up to a second-order truncation error in the limit of low Knudsen and Mach numbers, i.e., for $Kn \ll 1$ and $Ma \ll 1$. For more information on LBM fundamentals and developments, the reader is referred to the textbooks by Guo & Shu 2013, Kremer 2010, and Succi 2001.

Once the flow field is obtained, the medium hydraulic permeability can be evaluated using Darcy’s law. To determine the full permeability tensor, three flow simulations per medium are performed by sequentially applying a pressure drop in each of the three directions of the reference frame (Gao *et al.*, 2012). In particular, this allows the isotropy of the reconstructed media to be verified.

Lastly, while large temperature gradients can occur in a DPF (about 7000 K/m), as already mentioned, we did not study the effect of temperature on the flow field. Simulations in a simple channel using COMSOL Multiphysics[®] modeling software have indicated that such temperature gradients would increase the mean velocity by less than 1%, which is not surprising given that the temperature variation through a 300- μm -thick cordierite wall is only about 2 K. However, these temperature gradients might have a more significant impact on aerosol trajectories due to the thermophoretic force. The methodology used to verify this point is examined next.

4.2.3 Determination of aerosol trajectories and capture

If gravity and electrostatic interactions with the porous wall are ignored, the trajectories of soot particles in the flow can be computed by integrating a Langevin equation that takes drag (a deterministic process) and Brownian motion (a stochastic process) into account :

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \gamma (\vec{u} - \vec{v}) + \vec{\Gamma} , \quad (4.16)$$

where

$$\gamma = \frac{3\pi D_p \mu}{m c_c} , \quad (4.17)$$

\vec{v} is the aerosol particle velocity, m is the aerosol mass, $\vec{\Gamma}$ is the Langevin force used to take Brownian effects into account, and c_c is the Cunningham's slip correction factor defined as (Kulkarni *et al.*, 2011) :

$$c_c = 1 + Kn \left(1.142 + 0.558 \exp\left(\frac{-0.999}{Kn}\right) \right) . \quad (4.18)$$

A formal solution for the velocity of the particle is provided by the following equation (Vadeiko et Drolet, 2009) :

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t)e^{-\gamma\Delta t} + \gamma e^{-\gamma\Delta t} \int_0^{\Delta t} e^{\gamma t'} \vec{u}(\vec{x}(t + t')) dt' + e^{-\gamma\Delta t} \int_0^{\Delta t} e^{\gamma t'} \vec{\Gamma}(t + t') dt' \quad (4.19)$$

We solved this equation using two fourth-order semi-implicit numerical schemes, where the choice of the scheme depended on the stiffness of the problem. When the problem was not too stiff, a classical Runge-Kutta-Cash-Karp scheme was employed. However, when $\gamma\Delta t \ll 1$, the problem became stiff and the more robust scheme proposed by Vadeiko & Drolet (2009) was used.

It is worthwhile noting that this problem formulation assumed that aerosols are spherical solid particles and that no agglomeration of particles (or conversely breakage of clusters) takes place. The validity of the last assumption has been verified by Andrews *et al.* (2000).

The overall particle trajectory scheme assumed that the aerosols enter the domain upstream from the filter with the same velocity as that of the fluid. The whole procedure is described in greater detail in Rebaï *et al.* 2011.

To take the thermophoretic force (Eq. (4.1)) into account, the following modified Langevin Eq. (4.16) was used :

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \gamma(\vec{u} - \vec{v}) + \vec{\Gamma} + \vec{F}_{th} . \quad (4.20)$$

Obviously, the thermophoretic force is a deterministic contribution to this equation. Based on the same procedure that led to Eq. (4.19), the solution can be expressed as :

$$\begin{aligned} \vec{v}(t + \Delta t) = & \vec{v}(t)e^{-\gamma\Delta t} + \gamma e^{-\gamma\Delta t} \int_0^{\Delta t} e^{\gamma t'} \vec{u}(\vec{x}(t + t')) dt' + e^{-\gamma\Delta t} \int_0^{\Delta t} e^{\gamma t'} \vec{\Gamma}(t + t') dt' \\ & + e^{-\gamma\Delta t} \int_0^{\Delta t} e^{\gamma t'} \vec{F}_{th}(t + t') dt' . \end{aligned} \quad (4.21)$$

To solve Eq. (4.21), the aforementioned numerical schemes can be used in a straightforward way. Note that Eq. (4.1) becomes inaccurate for very small particles, i.e., for $D_p < 30$ nm (Li et James Davis, 1995). In addition, because the temperature variation in the domain was relatively small (about 2 K), as discussed in Section 4.2.2, a constant temperature was used to calculate the Brownian force term in Eq. (4.21).

The efficiency of the filter for capturing aerosol particles with diameter D_{p_i} can be evaluated from their trajectories obtained by solving Eq. (4.21) :

$$E_i(D_{p_i}) = \left(1 - \frac{n_{out_i}}{n_{in_i}} \right) , \quad (4.22)$$

where n_{in_i} and n_{out_i} are the numbers of aerosol particles of diameter D_{p_i} entering and leaving the filter, respectively. To this end, choosing D_p value based on the particle size distribution in Figure 4.3, 22,800 particles were evenly distributed on the domain entry plane upstream from the medium, and their trajectories were computed. A particle was considered captured when the distance between the center of the particle and the center of the nearest solid voxel was less than the sum of the particle radius and $\frac{\Delta x}{2}$, i.e., when the particle and the voxel were

in contact or overlapped. This “freeze” kind of capture is justified because the flow Knudsen number (Kn_f) was much smaller than one (i.e., no-slip at the wall) and the particles were too small to bounce off the walls (Li et Ahmadi, 1993). Once captured, the particle was eliminated from the domain so that clogging of the filter was not taken into account. In other words, the filter was considered clean or freshly regenerated.

This procedure was repeated for all $D_{p,i}$ values used to discretize the experimental size distribution as depicted on Figure 4.3. The global efficiency E can then be evaluated using the following equation :

$$E = \sum_i E_i \times p_i , \quad (4.23)$$

where p_i represents the fraction of particles of diameter $D_{p,i}$ in the distribution.

4.2.4 Numerical experiments

To determine whether thermophoresis has a significant impact on soot particle trajectories and thus on the overall efficiency of a DPF, the orientation of the temperature gradient with respect to the direction of the gas flow through the porous wall was considered. The temperature gradient is oriented radially to the DPF. However, the filter contains several thousand porous walls arranged in a Cartesian checkerboard pattern, creating thousands of possible flow directions with respect to the temperature gradient orientation. To account for this, we studied the four cases presented in Figure 4.4 : (1) the “with” case in which both the thermophoretic force and gas flow point in the same direction, (2) the “against” case in which they point in opposite directions, (3) the “perp” case in which they point in perpendicular directions and, (4) the “without” case in which no thermophoretic force is present. The fourth case served as a reference for evaluating the impact of thermophoresis on capture efficiency.

In addition to the orientation of the thermophoretic force with respect to the flow direction, the impact of the magnitude of both the temperature gradient and the flow velocity on soot capture was investigated for the four cases : three temperature gradients (3500 K/m, 7000 K/m, and 14000 K/m), and three superficial gas velocities (0.005 m/s, 0.11 m/s and

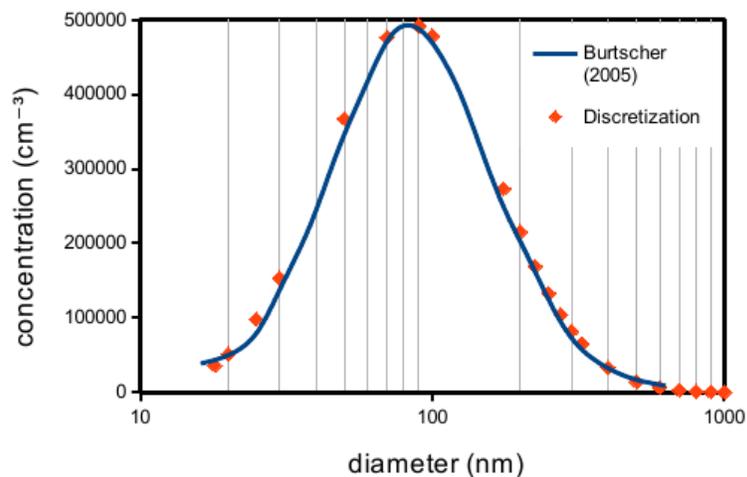


Figure 4.3 Experimental distribution of soot particle diameters used and discretization.

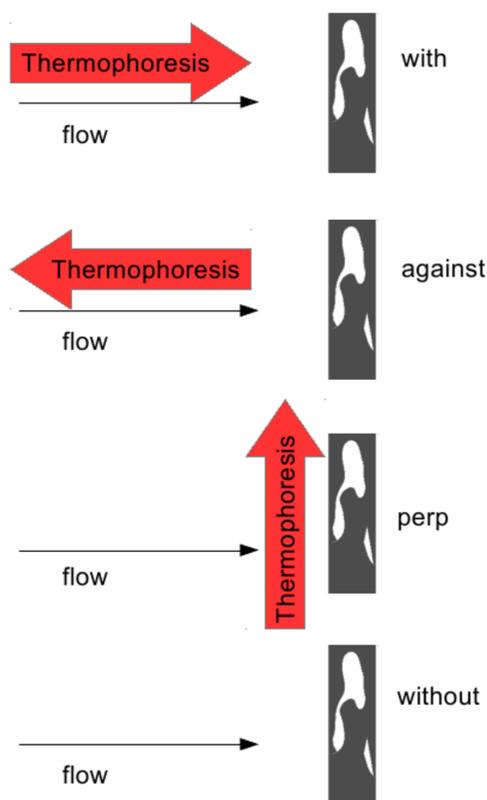


Figure 4.4 Four cases of thermophoretic force orientation with respect to the direction of the flow. The red arrows indicate the direction of the thermophoretic force, and the thin arrows indicate the direction of the flow within the porous wall.

0.22 m/s, corresponding to average flow rates of 0.0125 m³/s, 0.275 m³/s and 0.55 m³/s, respectively) were used. The middle range values of 7000 K/m and 0.11 m/s are typical numbers usually reported for a DPF (Schmidt *et al.*, 2007; Zhong *et al.*, 2012).

In addition, to assess the statistical uncertainty resulting from the stochastic medium reconstruction, the overall simulation procedure was repeated for seven different reconstructed porous walls. More precisely, seven media were chosen from thirteen reconstructed media based on a selection method proposed by Chaudhuri (1994) to ensure statistical representativeness, which was here, based on the trace of the permeability tensor of the porous medium and the standard deviation of its diagonal terms.

Lastly, Tables 4.2 and 4.3 summarize the properties used for the gas and aerosol particles in our simulations. The exhaust gas considered was air at 1000 K and the soot particles were assumed to have the same properties as graphite. Table 4.4 reports corresponding relevant dimensionless numbers. Note that the flow Knudsen number (Kn_f) is $\ll 1$, which is a necessary condition for LBM simulations (Kremer, 2010).

Property	Value
Thermal conductivity (W/m K)	6.75×10^{-2}
Density (kg/m ³)	3.53×10^{-1}
Viscosity (Pa s)	4.15×10^{-5}
Temperature (K)	1.00×10^3
Pressure (Pa)	1.01×10^5
Mean free path (m)	3.36×10^{-7}

Tableau 4.2 Properties of the fluid.

Property	Values
Thermal conductivity (W/m K)	1.19×10^2
Density (kg/m ³)	2.20×10^3
Diameter (m)	$[1.80 \times 10^{-8} - 1.00 \times 10^{-6}]$

Tableau 4.3 Properties of the particles.

Dimensionless number	Values
Knudsen	3.84×10^{-2}
Particle Knudsen	$[6.72 \times 10^{-1} - 3.73 \times 10^1]$
Reynolds	$[6.00 \times 10^{-5} - 2.00 \times 10^{-2}]$
Stokes	$[3.92 \times 10^{-7} - 7.07 \times 10^{-1}]$

Tableau 4.4 Properties of the flow.

4.3 Results and discussion

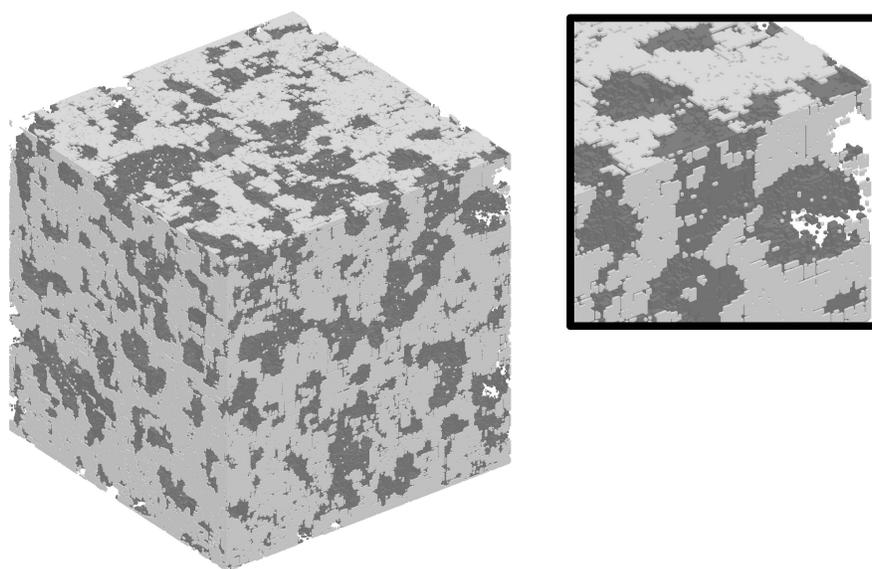
The presentation of the results is divided in two parts. First, the representativeness of the reconstructed media was assessed with various structural and hydraulic characteristics reported in the literature for cordierite media. Second, the results from the numerical experiments performed to study the impact of thermophoresis on capture efficiency are reported and discussed. In the second part, since all capture efficiency data for the seven selected media were similar, the results for only one of these media are presented.

Simulations were carried out using up to 16 cores of Compute Canada clusters. The computational time for the reconstruction procedure and the trajectory calculations ranged from two to three days, whereas the LBM fluid flow computations required ten hours on average.

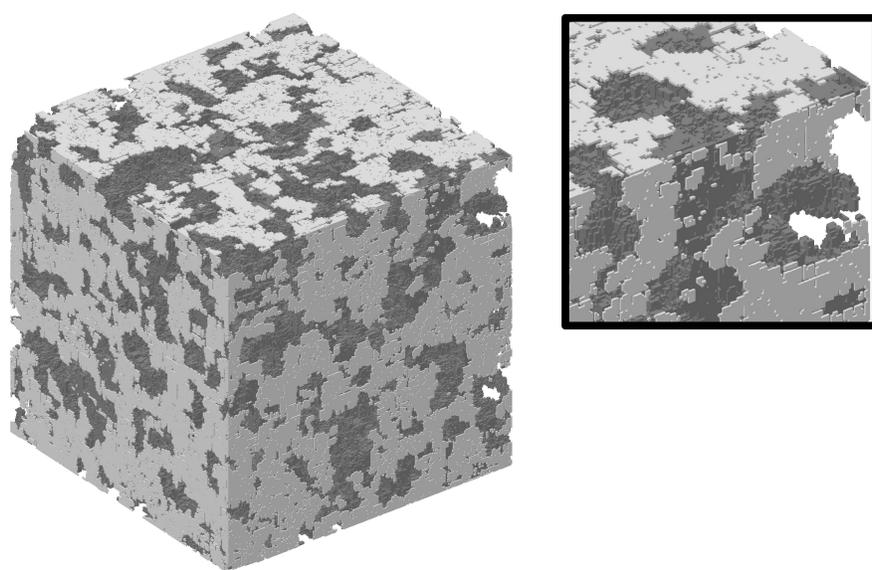
4.3.1 Cordierite medium and gas flow verification

A typical reconstruction of a cordierite porous medium obtained using our implementation of the SA method is presented before (Figure 4.5a) and after (Figure 4.5b) filtering out unconnected groups of voxels, as discussed at the end of Section 2.1. Figure 4.6 shows the simulated flow field obtained for this filtered reconstructed medium using the LBM. Unless mentioned otherwise, the results presented hereafter refer to these filtered media.

Thirteen virtual porous media were reconstructed using the two-point and lineal-path correlations proposed by Vlachos et Konstandopoulos (2006) for a cordierite sample of 50% porosity and were filtered. As discussed in Section 4.2.4, the seven media selected had, on



(a)



(b)

Figure 4.5 Example of a reconstructed cordierite porous wall medium before (a) and after (b) filtering out the unconnected voxels (note the unconnected voxels just below the top right corner in (a)).

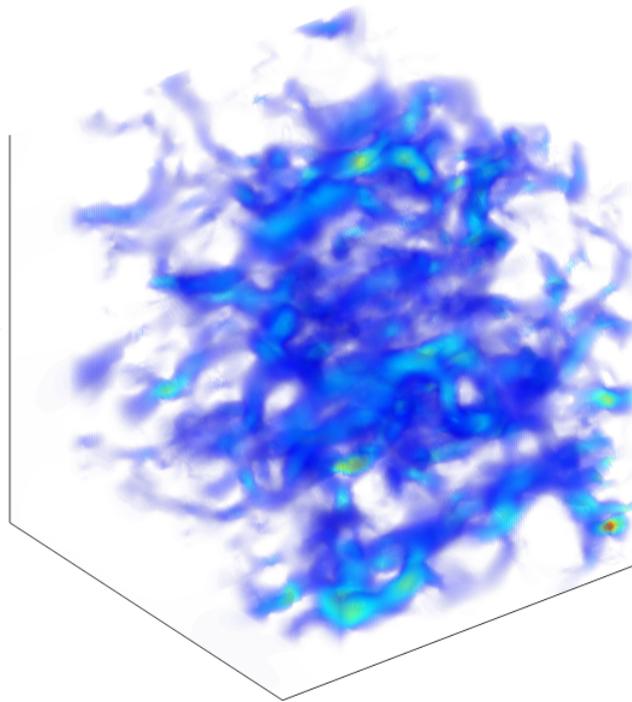


Figure 4.6 Example of the simulated flow field through the reconstructed medium for an average velocity of 0.22 m/s. The color scale represents the magnitude of the velocity and ranges from 0 m/s (transparent blue) to 11 m/s (red).

average, a 50.3% porosity and a 16.2- μm -pore (Sauter) diameter. An average permeability of $9.60 \pm 0.50 \times 10^{-13} \text{ m}^2$ was obtained for the filtered reconstructed media. These values, backed out from the LBM flow simulations using Darcy's law, corresponds to the mean of the diagonal terms of the permeability tensor averaged over the seven reconstructed media. Note that the expected isotropy of the media was reasonably well respected since the standard deviation of the three diagonal terms of this tensor was at most approximately 10%.

Porosity ϵ (%)	Pore diameter D (μm)*	Permeability k $\times 10^{13}(\text{m}^2)$	Corrected permeability k_{corr} $\times 10^{13}(\text{m}^2)**$	Reference
50.3	16.2	9.60	9.60	Our reconstructed media
53.7	17.7	NA	NA	(Fukushima <i>et al.</i> , 2007)
49	13	6.10	9.72	(Liu <i>et al.</i> , 2003)
48.8	12.8	3.96	5.62	(Wirojsakunchai <i>et al.</i> , 2007)
45.7	11.8	2.42	5.02	(Wirojsakunchai <i>et al.</i> , 2007)
45.1	11.8	2.37	4.98	(Wirojsakunchai <i>et al.</i> , 2007)
41.5	12	2.49	5.50	(Torregrosa <i>et al.</i> , 2011)

Tableau 4.5 Structural and hydraulic properties calculated from our reconstructed media and reported in the literature for cordierite porous walls.

* Experimental literature data were measured by mercury porosimetry.

** Permeability values were corrected for a porosity $\epsilon_{corr} = 50.3\%$ and a pore diameter $D_{corr} = 16.2 \mu m$, using $k_{corr} = k \times \frac{D_{corr}^2 \epsilon_{corr}}{D^2 \epsilon}$ derived from the Carman-Kozeny equation (Hinds, 2012).

As can be seen in Table 4.5, these structural and hydraulic properties compare well to the experimental data reported in the literature for various cordierite porous samples with $41.5\% \leq \epsilon \leq 49\%$. Permeability is a very sensitive hydraulic property with respect to pore size and porosity, and is thus a very good quantity for comparing porous media. In order to better compare our permeability data to those from the literature, the experimental permeabilities were corrected to the same porosity and pore size as those of our virtual reconstructions (Table 4.5). Our permeability value was very similar to the corrected data reported by Liu *et al.* (2003) and was only about twice as large as other reported values. This relatively small overestimation can be attributed in part to the grid spacing ($\Delta x = 1 \mu m$) used. Note

also that the voxel filtering procedure affected the permeability since the value obtained for the unfiltered media was $6.71 \pm 0.30 \times 10^{-13} \text{ m}^2$, i.e., in even better agreement with the values reported in the literature. Overall, our results indicated that both the reconstruction procedure and the LBM can be used to evaluate soot particle capture.

4.3.2 Aerosol capture and impact of thermophoresis

Figure 4.7 illustrates the impact of particle size and flow velocity on particle trajectories (launched $60 \mu\text{m}$ upstream from the same reconstructed medium) as calculated by our trajectory algorithm. For the lowest flow velocity (Figure 4.7a), the three groups of particle sizes displayed relatively similar behavior, i.e., a wide spreading of the trajectories due to Brownian diffusion, with more pronounced spreading for the smallest particles (in blue). As the flow velocity increased (Figure 4.7b), the biggest particles (in red) tended to move in a more straightforward manner following the fluid streamlines, while the middle size particles (in green) and the smallest ones (in blue) were still significantly affected by Brownian motion. Lastly, at the highest flow velocity (Figure 4.7c), only the smallest particles did not follow the streamlines, as was expected.

Aerosol capture efficiencies as a function of aerosol size are presented in Figure 4.8 for the three flow velocities investigated and for the four cases defined in Section 4.2.4 to assess the impact of the orientation of the thermophoretic force with respect to the flow direction. Let us first focus on the “without” case, i.e., the results with no thermophoretic force. At the two highest flow velocities (Figure 4.8b, 4.8c), the efficiency curves go through a minimum (corresponding to the most penetrating particle size), which is typical behavior (Hinds, 2012). This can be explained by the fact that, as discussed in the Introduction, two and sometimes three capture mechanisms may compete, depending on the aerosol size and the fluid velocity : diffusion owing to Brownian motion, interception, and inertial impaction. For the lowest flow velocity (Figure 4.8a), a monotonic decreasing curve was obtained, meaning that only Brownian diffusion affected capture in the range of aerosol sizes investigated.

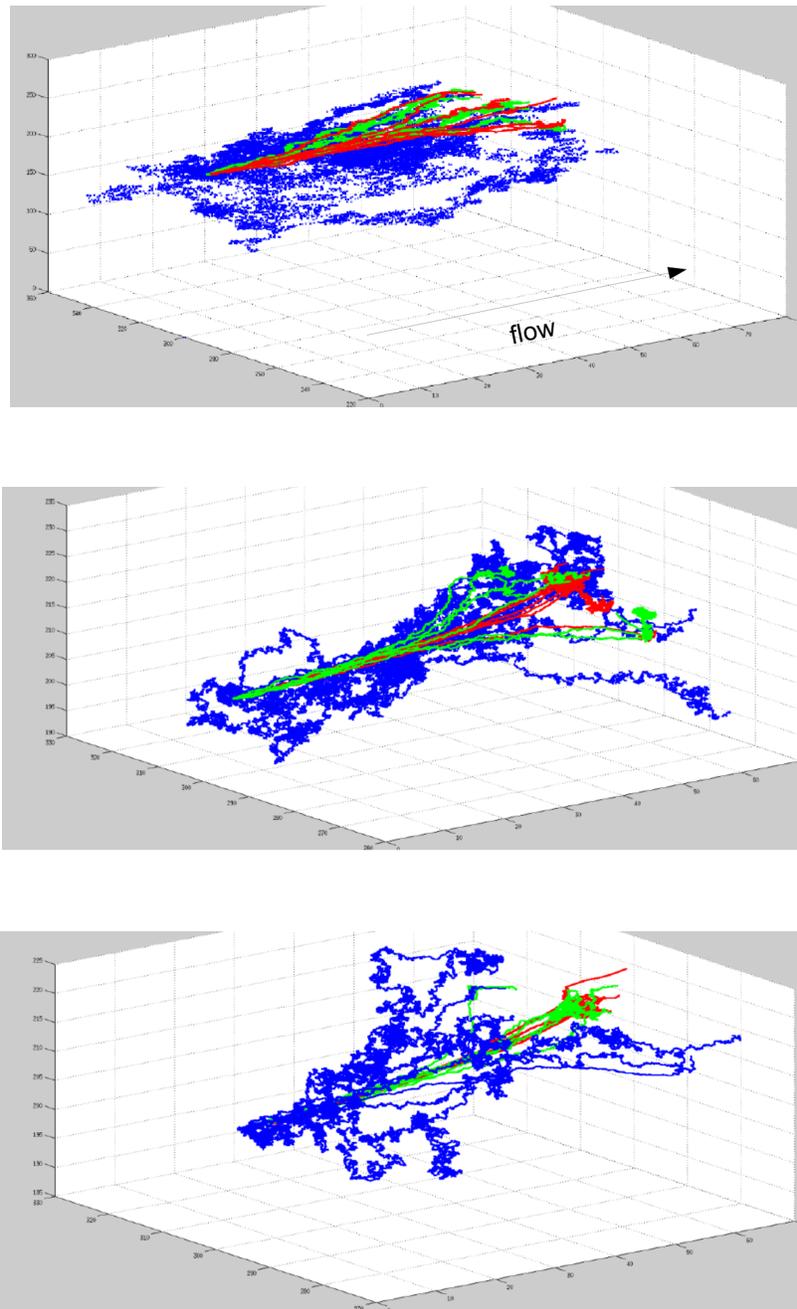
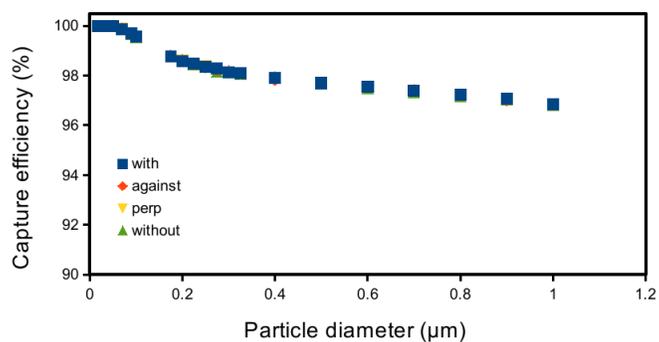
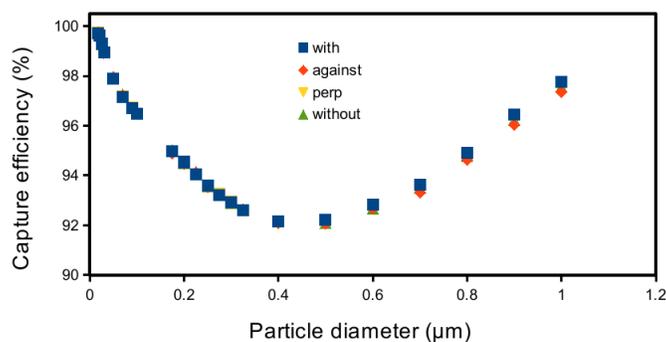


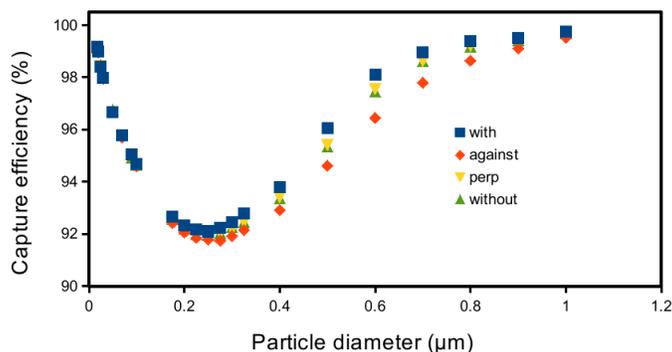
Figure 4.7 Aerosol trajectories computed by our numerical algorithm from a given location at the entrance of the reconstructed medium for the following velocity : 0.005 m/s (a), 0.11 m/s (b), and 0.22 m/s (c). Red trajectories correspond to aerosols with $0.4 \mu m \leq D_p \leq 1 \mu m$, green with $0.2 \mu m \leq D_p \leq 0.325 \mu m$ and blue with $0.018 \mu m \leq D_p \leq 0.175 \mu m$.



Flow velocity = 0.005 m/s.



Flow velocity = 0.11 m/s.



Flow velocity = 0.22 m/s.

Figure 4.8 Impact of flow velocity and thermophoretic force orientation (for $\|\nabla T\| = 7000 \text{ K/m}$) on capture efficiency curves as a function of aerosol size (error bars are not shown because they are smaller than the size of the symbols).

For the three flow velocities examined (with no thermophoretic force), the global capture efficiencies, as calculated by Eq. (4.23), gave 99.3%, 96.2% and 94.7% for increasing flow velocities. This means that the impact of Brownian diffusion decreased when the velocity increased. These predicted global efficiencies were lower than the values provided by DPF manufacturers, which are usually over 99.5% for all aerosol sizes (Heidelberg, 2013). However, it is important to note that our efficiency values were calculated for a clean (or freshly regenerated) DPF, whereas the manufacturer’s values corresponded to an average value over a whole operating cycle. Obviously, the clogging of the DPF between two regeneration cycles can drastically improve capture efficiency.

Next, if we focus on the impact of thermophoresis, it can be seen in Figure 4.8a that, at the lowest flow velocity, thermophoresis (whatever its direction with respect to the flow) had no impact on capture efficiency for all aerosol sizes, meaning that Brownian motion is the predominant capture mechanism. For a flow velocity of 0.11 m/s (Figure 4.8b), a similar conclusion can be drawn except for the largest particle diameters ($D_p > 0.6 \mu m$), for which small but statistically significant differences appeared between the “with” and the “against” cases, i.e., when the thermophoretic force acts in or against the flow direction. Lastly, at the largest flow velocity (Figure 4.8c), significant differences appeared for the four cases when $D_p > 0.2 \mu m$, i.e., when the magnitude of the interception and inertial impaction mechanisms exceed Brownian diffusion. Interestingly, there was virtually no difference between the “perp” and “without” cases, i.e., between the case for which the thermophoretic force was applied perpendicular to the flow direction and the case for which there was no thermophoresis. This can also be observed for all the results presented hereafter. However, capture efficiency was substantially enhanced in the “with” case, whereas it was lower in the “against” case. This could suggest that the thermophoretic force has the same impact as increasing or decreasing the magnitude of the flow field, whether it acts in or against the flow direction, and that it has no impact when it acts perpendicular to the flow. We will get back to this later.

Based on these results, it was possible to estimate the proportion of soot particles that

can be affected by thermophoresis in a DPF. Indeed, Schmidt *et al.* (2007) showed that the temperature gradient mainly takes place over a fraction of the DPF cross-section. Wu *et al.* (2011) also showed that soot particles travelling through this region make up 27.4% of the total number of particles (this fraction was deduced from the results reported in Figures 10, 11, and 12 of their article (Wu *et al.*, 2011) for 1000- and 100-nm particles). Furthermore, for the largest flow velocity (Figure 4.8c), the data showed that 25.5% of the total number of soot particles entering the filter are large enough ($D_p > 0.2 \mu m$) to be affected by thermophoresis. We thus estimated the fraction of particle affected by the thermophoretic force at the highest flow velocity to be 6.9% ($25.5\% \times 27.4\%$) of the total number of particles entering the filter. Note that this fraction of particles nonetheless represented about 26.9% of the total volume of soot entering the DPF.

To understand where these particles were captured, the penetration depth in the filter of 0.7- μm -particles, i.e., for a particle size that is affected by thermophoresis, is shown in Figure 4.9 for the highest flow velocity, where the ordinate corresponds to the variation of the capture efficiency relative to the case where there is no thermophoretic force. When the thermophoretic force acted in the flow direction (“with” case), capture was enhanced in the entry region of the filter, whereas the reverse was observed when it acted opposite to the flow (“against” case). The average capture depth for the various aerosol sizes is reported in Figure 4.10 for the different flow conditions. The impact of the thermophoretic force on capture depth was also only noticeable at the highest flow velocity for $D_p > 0.2 \mu m$ (Figure 4.10c). Within this diameter range, aerosols were captured as much as 10 μm earlier in the porous structure in the “with” case than in the “against” case, which are the two extremes. While this difference may seem small, it indicates that there is an impact on the transition from deep-bed filtration to soot-cake filtration, i.e., earlier clogging for channels subjected to a thermophoretic force acting in the same direction as that of the flow. Such a change in capture behavior could lead to asymmetries between the opposite walls of the channels, which in turn could affect the regeneration time (Konstandopoulos *et al.*, 2001a). Given the non-uniform gas

velocity distribution in DPFs evidenced by Oxarango *et al.* (2003), thermophoresis could lead to non-uniform soot deposition, which in turn could accentuate flow non-uniformity over time and eventually affect the regeneration and overall performance of DPFs.

As observed earlier in Figure 4.8c, the impact of thermophoresis on capture efficiency is mainly observed at the highest flow velocity for a range of aerosol sizes (i.e. $D_p > 0.2 \mu m$), for which interception and inertial impaction are the predominant capture mechanisms. However, the reason why barely no impact of thermophoresis was observed for a flow velocity only twice as small (see Figure 4.8b) is not obvious. To explain this sudden change in behavior, the capture efficiency data must be analyzed more thoroughly. Figure 4.11 displays the difference in fractional capture, defined as $\alpha_i = -\ln(1 - E_i)$ for each aerosol size (Hinds, 2012), between the “against” and “without” cases as a function of the product of the Stokes (St) and Reynolds (Re) numbers. The quantity $\frac{\alpha_i(\text{“against”}) - \alpha_i(\text{“without”})}{\alpha_i(\text{“without”})}$ is thus a measure of the impact of thermophoresis on capture, with a positive value indicating an increase in capture and a negative value a decrease.

The Stokes number, which can be seen as the ratio of the particle inertial forces to the viscous dissipation forces (in the laminar flow regime) is defined here as :

$$St = \frac{\rho_p D_p^2 C_c V (1 - \epsilon) S_v}{108 \mu}, \quad (4.24)$$

where V is the characteristic speed equal to the flow velocity (0.005, 0.11, or 0.22 m/s) and S_v is the specific surface area of the porous medium (which can be related to the Sauter pore diameter by $D = \frac{6}{(1-\epsilon) S_v}$). This dimensionless number characterizes the ability of a particle to closely follow a fluid streamline when $St \ll 1$, or to swerve away from a streamline due to inertia at higher Stokes values. The Reynolds number, which represents the ratio of inertial to viscous forces, is defined here as :

$$Re = \frac{6 \rho V}{(1 - \epsilon) S_v \mu}. \quad (4.25)$$

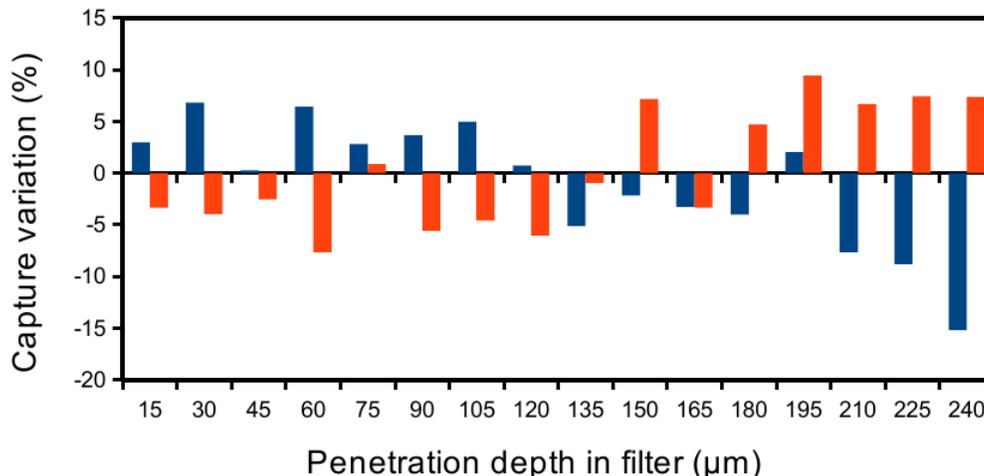
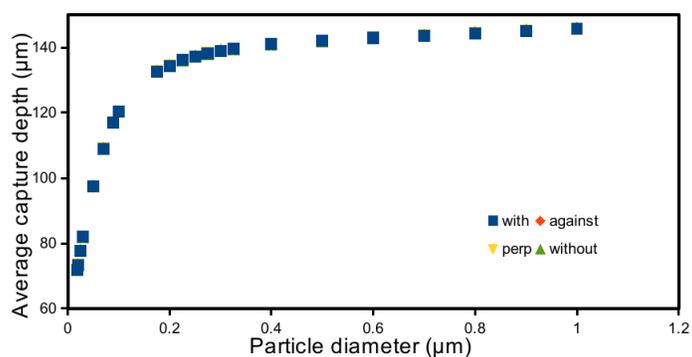


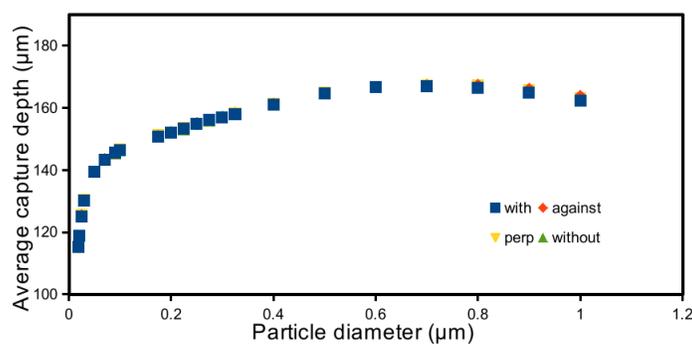
Figure 4.9 Effect of thermophoresis on particle capture as a function of the penetration depth of $0.7 \mu\text{m}$ particles in the filter at a flow velocity of 0.22 m/s and a temperature gradient of 7000 K/m , for the “with” (blue bars) and the “against” (orange bars) cases as compared to the “without” case (reference).

The $St \times Re$ product is thus a combined measure of the magnitude of both flow and particle inertial forces over viscous forces. As such, the larger this product the more pronounced the impact of inertia on aerosol trajectories.

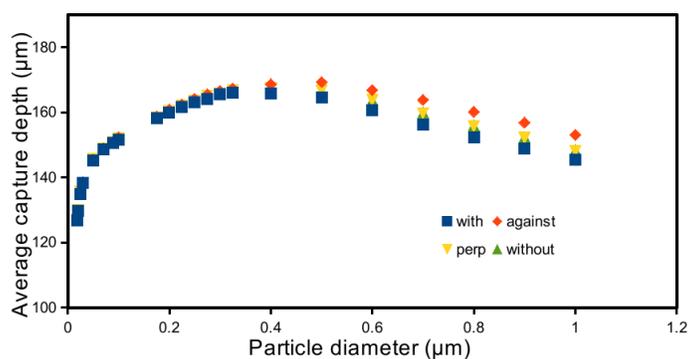
Figure 4.11 shows that the impact of thermophoresis was only significant when $St \times Re > 4 \times 10^{-4}$ for the three temperature gradients investigated, and that it increased with the value of $St \times Re$ as well as with the magnitude of the temperature gradient. Note that a similar trend was observed with respect to particle capture depth (not shown), as expected. Furthermore, similar conclusions can be drawn from the “with” case but results are also not shown here. This result suggested that there is a link between inertia and the onset of thermophoretic effects. In fact, Konstandopoulos and Rosner (1995) observed an inertially enhanced thermophoretic deposition of small particles in the case of boundary layer aerosol flows over surfaces with streamwise curvatures. They reported that the dimensionless parameter governing inertial effects on thermophoretic transport is $St \times Re_x^{1/2}$, where $Re_x^{1/2}$ is the boundary layer Reynolds number, i.e., a dimensionless number very similar to ours. They also suggested that inertia can cause major changes in aerosol deposition rates even when



Flow velocity = 0.005 m/s.

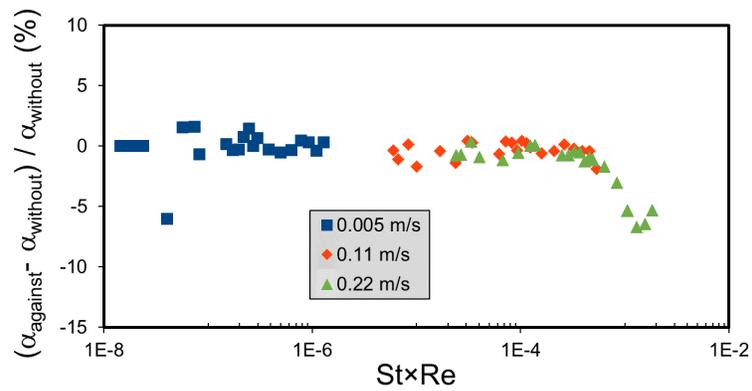


Flow velocity = 0.11 m/s.

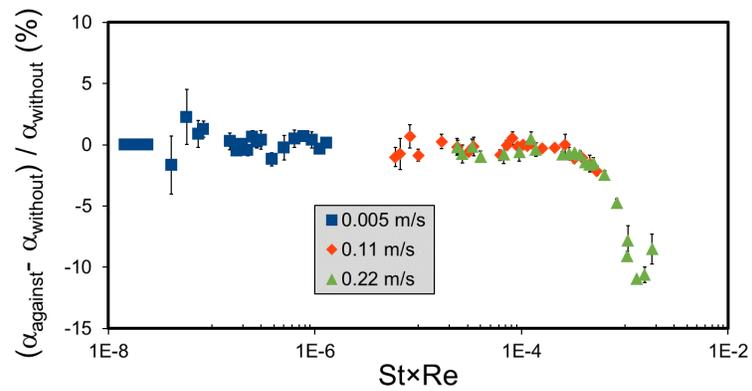


Flow velocity = 0.22 m/s.

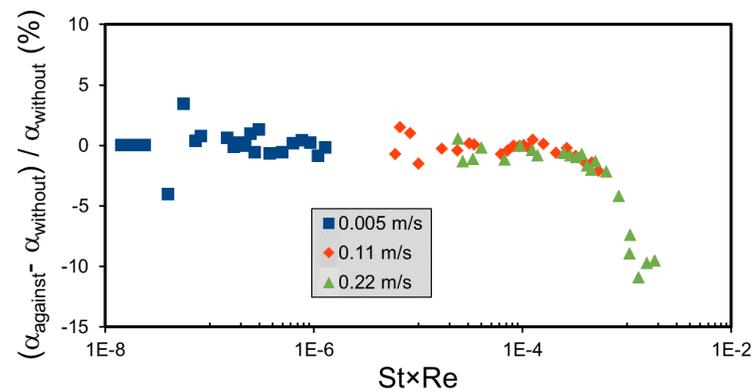
Figure 4.10 Average capture depth as a function of aerosol size for various flow velocities and a temperature gradient of 7000 K/m (error bars are not shown because they are smaller than the size of the symbols).



Temperature gradient = 3500 K/m.



Temperature gradient = 7000 K/m.



Temperature gradient = 14000 K/m.

Figure 4.11 Impact of thermophoresis for the “against” case as a function of the magnitude of inertia for three temperature gradients. The blue, orange, and green symbols correspond to flow velocities of 0.005, 0.11 and 0.22 m/s , respectively. (Error bars based on standard deviation have only been determined for the middle range temperature gradient, but are expected to be similar for other temperature gradients.)

$St \ll 1$ as long as Re_x is large enough.

Based on all these results, the following mechanism of action for thermophoresis can be established. Within the diffusion regime, thermophoretic effects are negligible with respect to the chaotic motion of aerosols and, consequently, no impact can be detected. Within the interception regime, the Stokes number is small and particles generally flow around obstacles by closely following streamlines (they can only be captured when the distance between the streamline followed and the obstacle is smaller than the particle radius, as mentioned earlier). As the Stokes number increases, soot particles swerve away from streamlines due to an increase of inertia, which sets them more frequently on a collision course with eventual obstacles. This is the inertial impaction regime. In addition to an increase of particle inertia, an increase of fluid inertia, i.e., Reynolds number, leads to the compression of the viscous boundary layer in front of obstacles, resulting in streamlines passing closer to obstacles, thus improving capture. The impact of thermophoresis on soot capture is enhanced by both factors. However, the main reason for particles to swerve away from streamlines stems from a component of the particle velocity towards the obstacle that cannot be cancelled out because of the presence of the thermophoretic force, as highlighted by the force balance of Figure 4.12. Lastly, the impact of thermophoresis in the presence of inertia explains why the “perp” and “without” cases displayed similar behavior in the capture efficiency curves shown on Figure 4.8. Indeed, in the “perp” case, the thermophoretic force was perpendicular to the fluid streamlines and could thus either pull a particle away from an obstacle or push it closer to the obstacle. It is thus reasonable to think that the net effect is null.

4.4 Conclusion

An efficient three-step simulation model, based on simulated annealing for the reconstruction of the porous wall of a DPF, the LBM for the simulation of air flow through it and a modified Langevin equation for the computation of particle trajectories, was developed. It was used to shed light on the impact of thermophoresis on soot capture in a cordierite porous

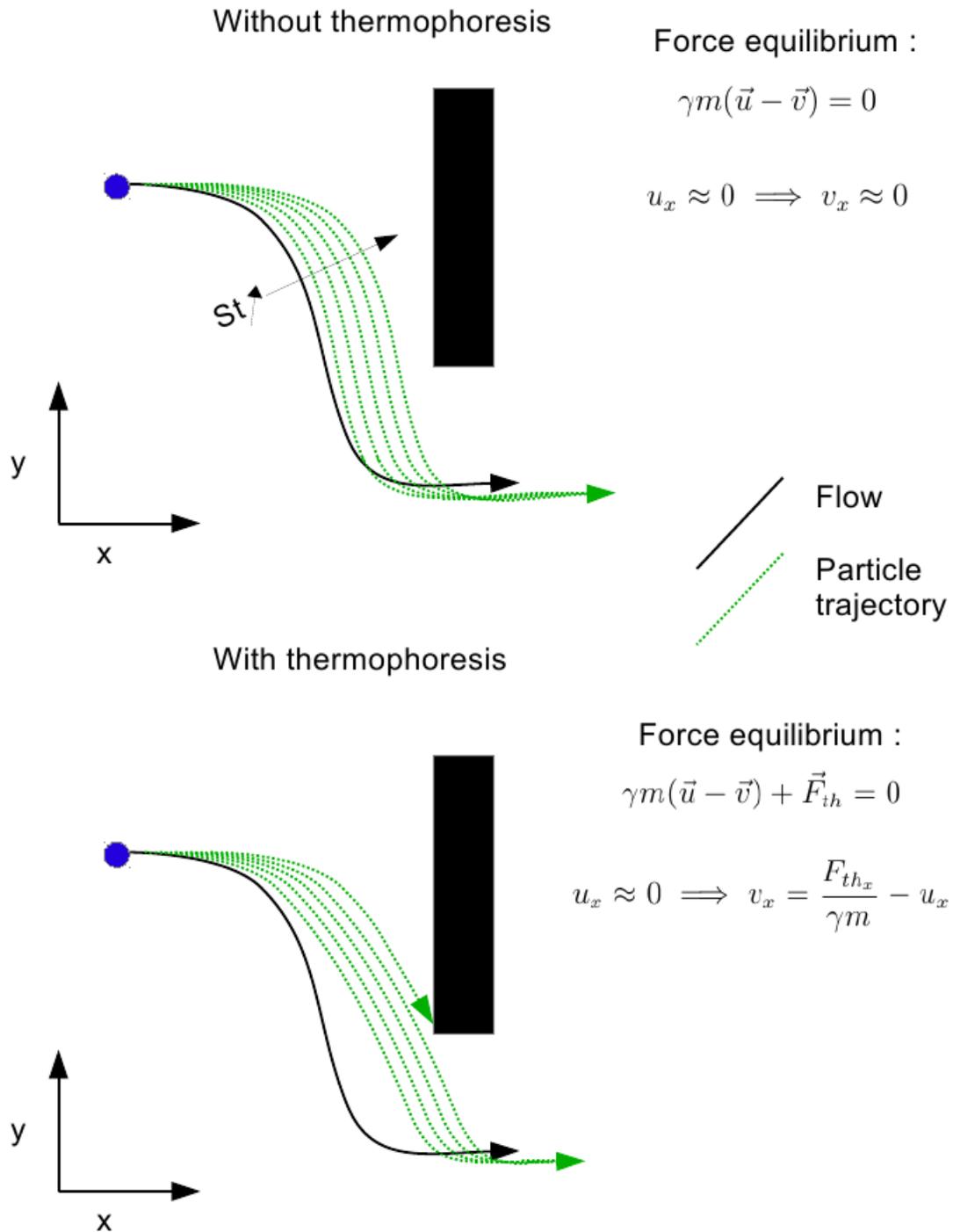


Figure 4.12 Proposed mechanism of action of thermophoretic force on particle capture. As the Stokes number increases, the particle takes a trajectory (in green) closer to the obstacle.

wall of a clean (or freshly regenerated) DPF. Permeability predictions of reconstructed portions of a cordierite porous wall computed using the LBM agreed well with data from the literature, confirming the soundness of the approach. From the computed flow field through the cordierite porous wall, the trajectories of soot particles of various sizes were obtained for different operating conditions, and various thermophoresis orientations and magnitudes. Our results showed that applying the thermophoretic force at the highest flow velocity investigated, either in or against the flow direction, can affect particle trajectories significantly, mainly those of particles ranging in size from 0.2 to 1 μm .

The thermophoretic force impacted soot capture efficiency, mainly in the presence of particle and flow inertia, for a flow regime in which the momentum relaxation time of the particle was not negligible with respect to the characteristic time of the flow. A dimensionless quantity defined as the product of the Stokes and Reynolds numbers was proposed to predict the onset of what can be referred to as thermophoresis-enhanced inertial impaction. While similar results have been reported in the case of boundary layer aerosol flows over surfaces with streamwise curvatures (Konstandopoulos et Rosner, 1995), this is the first time, to our knowledge, that such a phenomenon has been reported for a complex cordierite porous wall.

Lastly, even though the impact of thermophoresis was only observed for the highest flow velocity, up to 26.9% of the soot volume entering the DPF was affected by it under these flow conditions. The magnitude of the impact also depended on the orientation of the thermophoretic force with respect to the flow direction. Given the inherent non-uniform gas velocity distribution within DPFs, thermophoresis could potentially lead to non-uniform soot deposition, which in turn could accentuate flow non-uniformity over time and ultimately affect the regeneration and overall performance of DPFs. The proposed model is a first step towards the development of a multiscale model to predict soot distribution and clogging in a whole DPF. Such a model could serve as a design tool for improving the efficiency of future generations of DPF by, for instance, providing guidelines to make the best use of the thermophoretic force.

Acknowledgements

The authors gratefully acknowledge the financial support of the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada and the computer resource allocations provided by Compute Canada.

CHAPITRE 5

DISCUSSION GÉNÉRALE

Afin de modéliser l'effet de la thermophorèse sur la capture de la suie dans un FPD (introduit au Chapitre 1), un modèle original en 3 étapes a été développé. Il a donc été nécessaire d'établir une revue de la littérature exhaustive portant sur les phénomènes potentiellement importants dans un FPD (c'est l'objet du Chapitre 2). Le modèle développé (qui a été décrit en détail au Chapitre 3) utilise un algorithme de reconstruction stochastique mis au point pour ce travail, un code de MBR, et un algorithme permettant de prédire les trajectoires des particules, qui a été modifié pour ce travail afin de pouvoir prendre en compte la force thermophorétique. L'analyse des résultats obtenus (dans l'article rédigé et rapporté au Chapitre 4) a mené à l'établissement d'une valeur seuil permettant de prédire le degré d'impact de la thermophorèse sur la déposition de suie dans un FPD. La modélisation de l'effet de la force thermophorétique dans une géométrie complexe n'avait jamais été fait auparavant à ma connaissance. Toutefois, pour en évaluer pleinement l'impact dans un FPD, d'autres travaux seront nécessaires, dont une validation expérimentale plus poussée. De plus, l'applicabilité de ce modèle ne se borne pas à l'étude des FPDs. Il pourrait être utilisé, notamment pour d'autres pièces automobiles comme les échangeurs de chaleur préchauffant le carburant et éventuellement à des domaines n'étant pas liés à l'automobile.

CHAPITRE 6

CONCLUSION

Dans le cadre de la filtration de la suie dans un FPD, un modèle de capture des particules de suie capable de prendre en compte la thermophorèse a été conçu. Ce modèle est constitué de trois parties : la reconstruction du milieu poreux selon la méthode du recuit simulé, la simulation de l'écoulement à l'aide de la méthode de Boltzmann sur réseau et le calcul de la trajectoire des particules de suie par résolution d'une équation modifiée de Langevin. La thermophorèse a été étudiée en interaction avec les autres forces plutôt que d'isoler la déposition thermophorétique. Cette étude se place dans le contexte où le filtre vient tout juste d'être régénéré, c'est-à-dire qu'il est propre et les gradients de température sont très intenses. Il a été démontré que la thermophorèse a un effet statistiquement significatif sur la capture des particules ayant un diamètre entre 0.225 et 1 μm pour une vitesse d'écoulement moyenne de 0.22 m/s. Il a aussi été démontré qu'un total de 27% du volume de suie entrant dans un FPD peut être affecté par la thermophorèse tel que calculé en tenant compte de la distribution de tailles de la suie et de la section du FPD réellement affectée par la thermophorèse. L'effet de la force thermophorétique sur la capture apparaît seulement lorsque les particules ont une inertie non négligeable ou sont soumises à l'inertie du fluide. Pour les différents cas de thermophorèse testés, la capture ne s'effectue pas au même endroit dans le mur poreux. Ainsi, pour un même FPD, les profils de déposition de la suie dans le mur poreux peuvent varier d'un mur à un autre, ce qui pourrait avoir comme conséquence d'affecter l'uniformité de capture du filtre et donc d'allonger son temps de régénération et ultimement de diminuer les performances du FPD. Il a également été démontré que la force thermophorétique a un effet sur la capture des particules de suie lorsque $St \times Re > 4 \times 10^{-4}$, c'est-à-dire dans des conditions d'opération pour lesquelles l'inertie des particules de suie ou du fluide ne sont pas négligeable.

6.1 Principales contributions

Les principales contributions de ce travail sont :

- la conception d’un algorithme de reconstruction de type recuit simulé ;
- la conception d’un modèle original capable de prédire la capture de particules dans un filtre particulaire diesel et de prendre en compte la thermophorèse ;
- la démonstration de l’effet de la thermophorèse sur la capture des particules de suie dans un FPD ;
- l’établissement d’un critère permettant de quantifier l’importance de la thermophorèse en fonction des nombres de Stokes et de Reynolds.

6.2 Travaux futurs

Ce travail a permis de déterminer que la thermophorèse peut avoir un effet non négligeable dans le contexte d’un FPD. Toutefois, le modèle actuel ne peut pas prendre en compte les phénomènes transitoires comme l’accumulation de la suie ou sa combustion. Il serait donc judicieux de développer un modèle capable de gérer ces phénomènes afin de mieux caractériser l’effet de la thermophorèse. Aussi, des gradients de température linéaires et constants ont été utilisés dans cette étude, mais dans le futur, il serait préférable d’utiliser des températures locales et de calculer des gradients locaux. Il serait également pertinent de combiner ce modèle à l’échelle du mur, et d’autres pour obtenir un modèle multi échelle prédisant la capture dans l’ensemble d’un FPD. De plus, une étude plus complète des effets de la thermophorèse en fonction des gradients de température serait très intéressante. Enfin, étant donné que l’effet de la thermophorèse croît avec l’inertie des particules, l’utilisation de plus grosses particules serait justifiée afin de vérifier les tendances observées au cours de ces travaux.

Il serait intéressant de se pencher sur une nouvelle métrique dont l’objectif est de caractériser l’ampleur des changements de direction du fluide porteur et son effet sur la capture. Nous présentons dans la section qui suit, les prémices de ces travaux futurs qui ont été

entamés, mais n'ont pu être menés à leurs termes dans le cadre de ce projet de maîtrise.

6.2.1 Concept de la densité de rotation

Étant donné que l'interception et l'impaction inertielle sont des mécanismes de capture qui ont lieu en présence d'un changement de direction du fluide porteur, le nombre et l'intensité de ces changements de directions devraient avoir un impact sur la filtration. Ainsi, la métrique de densité de rotation $\Phi(m^{-3})$ sert à prendre en compte ces paramètres. Afin que la mesure caractérise le milieu, elle doit être indépendante de la vitesse et de la nature du fluide qui s'écoule au travers du milieu poreux. Cela est atteint en régime de Stokes si elle est définie sur le domaine Θ à partir du rotationnel du champ de vitesse selon l'équation :

$$\Phi = \frac{\mu \sum_{\Theta} \sqrt{|\nabla \times \vec{u}|^2}}{\Delta P V_{\epsilon}} \quad (6.1)$$

Rappelons que \vec{u} est la vitesse locale du fluide, μ sa viscosité, ΔP la perte de charge au travers du milieu et V_{ϵ} le volume du domaine qui contribue à l'écoulement. La viscosité a été incluse dans la définition afin que le résultat prenne en compte la nature du fluide utilisé. La perte de charge, quant à elle, sert à normaliser le rotationnel selon la vitesse du fluide. L'invariance en fonction de la vitesse et de la nature du fluide de cette équation a été démontrée sur COMSOL à l'aide de réseaux hydrauliques simples (conduites en U, en coude et avec déviation). COMSOL a aussi été utilisé pour vérifier que la densité de rotation (Φ) d'un réseau est proportionnelle au nombre de coudes du réseau, pour une même distance parcourue, et qu'elle diminue lorsque la longueur des tuyaux droits augmente. Pour prédire l'efficacité de capture d'un filtre particulaire diesel, l'effet de plusieurs facteurs a été considéré dont la porosité et le diamètre des pores (Fukushima *et al.*, 2007). On peut calculer le diamètre des pores (D_m) selon :

$$D_m = \frac{6}{(1 - \epsilon) S_v} \quad (6.2)$$

où ϵ est la porosité du domaine et S_v , sa surface spécifique. Pour les murs poreux reconstruits dans le cadre de cette étude, le lien entre le diamètre des pores et l'efficacité de capture n'est pas clair comme illustré à la Figure 6.1. Par contre, la perméabilité a un lien plus étroit avec la filtration comme la Figure 6.2 le démontre. En corrigeant la perméabilité par la densité de rotation (telle que définie à l'équation 6.1) une meilleure prédiction peut être obtenue (Figure 6.3). L'exposant d'un quart a été choisi de façon à maximiser le coefficient de corrélation. Toutefois, la validité de cette approche dans le cas général reste à démontrer, mais cette métrique demeure une voie intéressante à explorer dans le futur.

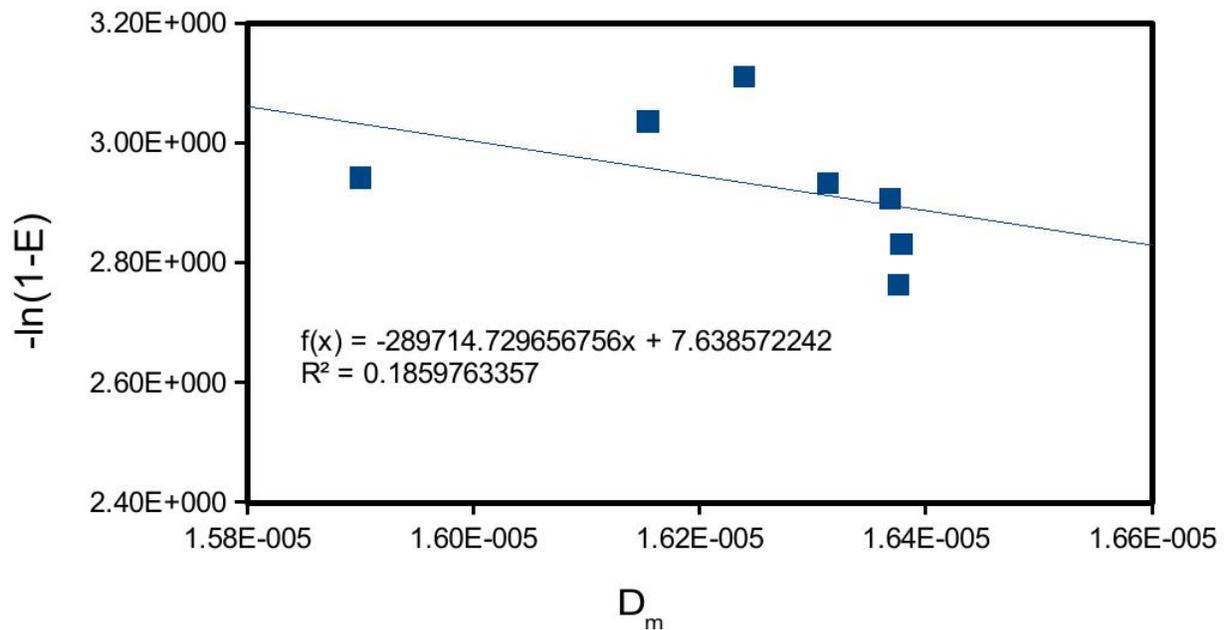


Figure 6.1 Influence du diamètre des pores (D_m) sur l'efficacité globale de filtration (E).

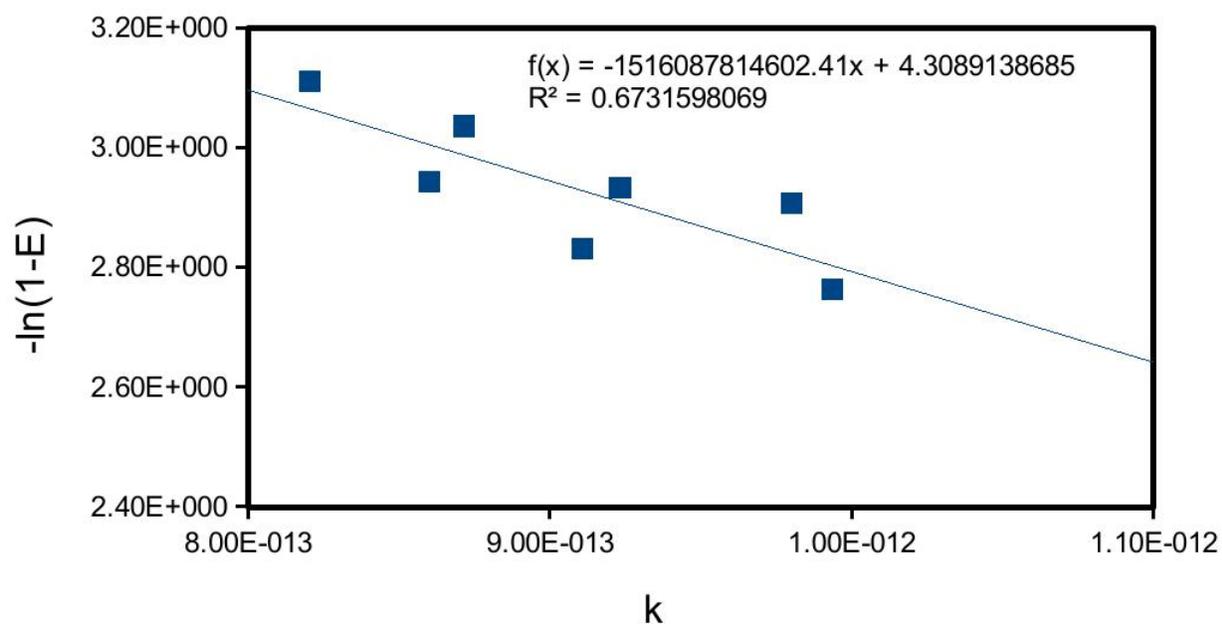


Figure 6.2 Influence de la perméabilité (k) sur l'efficacité globale de filtration (E).

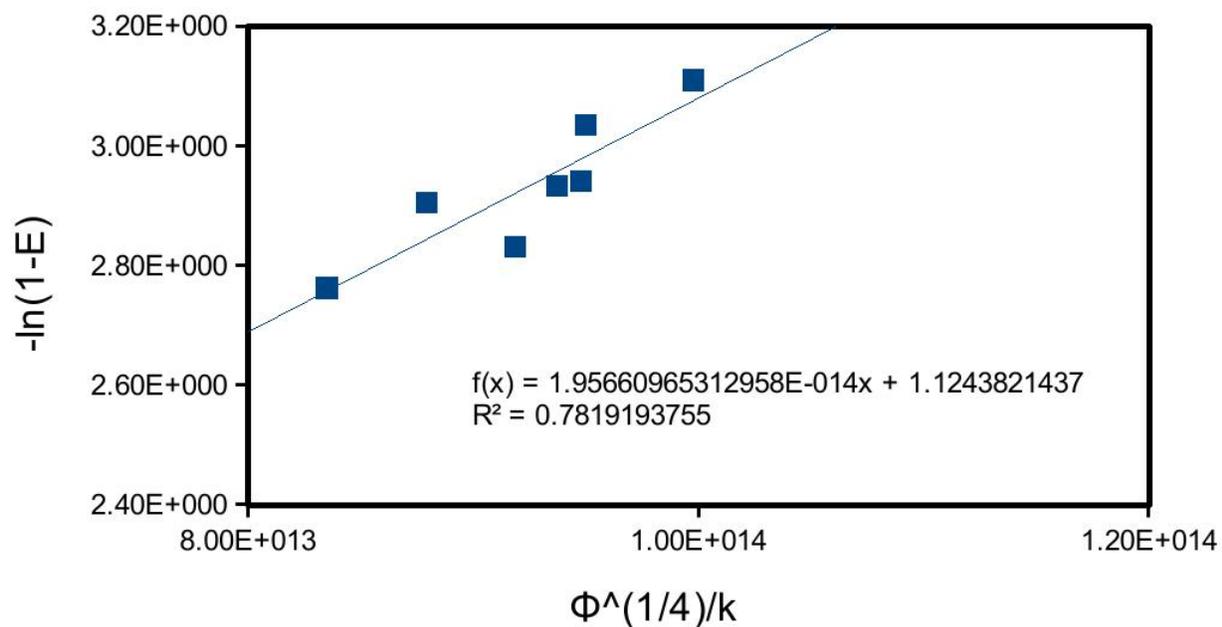


Figure 6.3 Influence de la densité de rotation (Φ) et de la perméabilité (k) sur l'efficacité globale de filtration (E).

RÉFÉRENCES

- ANDREWS, G., CLARKE, A., ROJAS, N., GREGORY, D. et SALE, T. (2000). Diesel particle size distribution changes along a practical exhaust system during cold start in a passenger car IDI diesel. SAE paper 2000-01-0514.
- daly d (2001) mechanism of soot suppression during diesel combustion by water. *Fuel Chemistry Division Preprints*, 46, 394–399.
- ARMAS, O., GÓMEZ, A. et RAMOS, (2013). Comparative study of pollutant emissions from engine starting with animal fat biodiesel and GTL fuels. *Fuel*, 113, 560–570.
- ARNS, C. H., KNACKSTEDT, M. A. et MECKE, K. R. (2002). Characterising the morphology of disordered materials. *Morphology of Condensed Matter*, Springer. 37–74.
- BENSAID, S., MARCHISIO, D. L. et FINO, D. (2010). Numerical simulation of soot filtration and combustion within diesel particulate filters. *Chemical Engineering Science*, 65, 357–363.
- BERTRAND, F., DEVALS, C., VIDAL, D., PRÉVAL, C. S. D. et HAYES, R. E. (2012). Towards the simulation of the catalytic monolith converter using discrete channel-scale models. *Catalysis Today*, 188, 80–86.
- BIRD, R. B., STEWART, W. E. et LIGHTFOOT, E. N. (2007). *Transport phenomena*. Wiley. com.
- BOIVIN, M., SIMONIN, O. et SQUIRES, K. D. (2000). On the prediction of gas–solid flows with two-way coupling using large eddy simulation. *Physics of Fluids*, 12, 2080.
- BRENNEN, C. E. (2005). *Fundamentals of multiphase flow*. Cambridge University Press.
- BURTSCHER, H. (2005). Physical characterization of particulate emissions from diesel engines : a review. *Journal of Aerosol Science*, 36, 896–932.
- CHAUDHURI, B. B. (1994). How to choose a representative subset from a set of data in multi-dimensional space. *Pattern recognition letters*, 15, 893–899.

CHEN, K., MARTIROSYAN, K. et LUSS, D. (2011). Temperature gradients within a soot layer during DPF regeneration. *Chemical Engineering Science*, 66, 2968–2973.

CRANE, R., RUBINO, L., ARCOUMANIS, C., GOLUNSKI, S., MCNAMARA, J., POULSTON, S. et RAJARAM, R. (2002). Strategies for gasoline particulate emission control - a “foresight vehicle” project. Rapport technique, SAE Technical Paper.

CUMMINSFORUM (""). The definitive guide to the emissions equipment in today’s diesel trucks! url = <http://www.cumminsforum.com/forum/2013-general-discussion/933601-definitive-guide-emissions-equipment-todays-diesel-trucks.html>.

DOGGALI, P., KUSABA, H., RAYALU, S., TERAOKA, Y. et LABHSETWAR, N. (2013). Bench scale experiments of diesel soot oxidation using pr0.7sr0.2k0.1mno3 perovskite type catalyst coated on ceramic foam filters. *Topics in Catalysis*, 56, 457–461. 1-8.

EXXONMOBIL (2013). The outlook for energy : A view to 2040. Rapport technique, ExxonMobil.

FINLAY, W. H. (2001). *The mechanics of inhaled pharmaceutical aerosols : an introduction*.

FLOERCHINGER, P., ANDERSON, M., ZHIXIN, H., TAUBERT, T., STEINBRUECK, E. et ANGELO, T. (2003). Prediction and validation of pressure drop for catalyzed diesel particulate filters. *SAE transactions*, 112, 669–679. 4.

FUKUSHIMA, S., OHNO, K., VLACHOS, N. et KONSTANDOPOULOS, A. (2007). New approach for pore structure and filtration efficiency characterization. 1999, 09–27.

GAO, Y., ZHANG, X., RAMA, P., LIU, Y., CHEN, R., OSTADI, H. et JIANG, K. (2012). Calculating the anisotropic permeability of porous media using the lattice Boltzmann method and x-ray computed tomography. *Transport in Porous Media*, 92, 457—4726.

GIESHOFF, J., PFEIFER, M., SCHÄFER-SINDLINGER, A., HACKBARTH, U., TEYSET, O., COLIGNON, C., RIGAUDEAU, C., SALVAT, O., KRIEG, H. et WENCLAWIAK, B. (2001). Regeneration of catalytic diesel particulate filters. *Training*, 2012, 09–05.

- GUHA, A. (2008). Transport and deposition of particles in turbulent and laminar flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 40, 311–341.
- GUO, X., DU, D., WANG, F., MA, Y., YANG, C. et ZHANG, H.-Z. (2011). Study on test instrument and filtration theory of the carbonized micron wood fiber DPF. *Microporous and Mesoporous Materials*, 142, 655–660. 2-3.
- GUO, Z. et SHU, C. (2013). Lattice Boltzmann method and its applications in engineering (advances in computational fluid dynamics).
- HANSEN, K. et PEDERSEN, L. (2001). 2001-01-3201 large scale particulate filter demonstration project in odense. SAE; 1999, 19–24.
- HE, X., ZOU, Q., LUO, L.-S. et DEMBO, M. (1997). Analytic solutions of simple flows and analysis of nonslip boundary conditions for the lattice boltzmann BGK model. *Journal of Statistical Physics*, 87, 115–136. 1-2.
- HEIDELBERG, V. H. (2013). VERT standards and procedures for retrofit to reduce diesel engine emissions.
- HINDS, W. C. (2012). *Aerosol technology : properties, behavior, and measurement of airborne particles*. John Wiley & Sons.
- HOLDICH, R. G. (2002). *Fundamentals of particle technology*. Midland Information Technology and Publishing.
- HUANG, S.-H. (2013). Factors affecting filter penetration and quality factor of particulate respirators. *Aerosol and Air Quality Research*.
- IFLEET (""). reduce emissions. url = http://www.ifleet.co.za/pages/reuce_missions.htm.
- JAGANATHAN, S., TAFRESHI, H. V. et POURDEYHIMI, B. (2008). Two-scale modeling approach to predict permeability of fibrous media. *J. Eng. Fibres Fabr. Spl.*
- JOHNSON, J. E. et KITTELSON, D. B. (1996). Deposition, diffusion and adsorption in the diesel oxidation catalyst. *Applied Catalysis B : Environmental*, 10, 117–137.

- JOHNSON, T. V. (2009). Diesel emission control in review. *SAE international journal of fuels and lubricants*, 2, 1–12.
- JÄÄSKELÄINEN, H. (2007). Engine exhaust back pressure.
- KITTELSON, D. B. (1998). Engines and nanoparticles : a review. *Journal of Aerosol Science*, 29, 575–588.
- KOLTSAKIS, G., HARALAMPOUS, O., DEPCIK, C. et RAGONE, J. C. (2013). Catalyzed diesel particulate filter modeling. *Reviews in Chemical Engineering*, 29, 1–61.
- KONSTANDOPOULOS, A. G. (2000). Deposit growth dynamics : particle sticking and scattering phenomena. *Powder Technology*, 109, 262–277.
- KONSTANDOPOULOS, A. G., KOSTOGLU, M. et HOUSIADA, P. (2001a). Spatial non-uniformities in diesel particulate trap regeneration. *SAE TRANSACTIONS*, 110, 609–620.
- KONSTANDOPOULOS, A. G., KOSTOGLU, M., HOUSIADA, P., VLACHOS, N. et ZARVALIS, D. (2003). Multichannel simulation of soot oxidation in diesel particulate filters. *SAE transactions*, 112, 587–604. 4.
- KONSTANDOPOULOS, A. G., KOSTOGLU, M., LORENTZOU, S. et VLACHOS, N. (2012). Aspects of multifunctional diesel particulate filters and their efficient simulation. *Catalysis Today*, 188, 2–13. 1.
- KONSTANDOPOULOS, A. G., KOSTOGLU, M., SKAPERDAS, E., PAPAIOANNOU, E., ZARVALIS, D. et KLADOPOULOU, E. (2000). Fundamental studies of diesel particulate filters : transient loading, regeneration and aging. *SAE technical paper*, 01–1016.
- KONSTANDOPOULOS, A. G., KOSTOGLU, M., VLACHOS, N. et KLADOPOULOU, E. (2007). Advances in the science and technology of diesel particulate filter simulation. *Advances in Chemical Engineering*, 33, 213–294.

- KONSTANDOPOULOS, A. G. et ROSNER, D. E. (1995). Inertial effects on thermophoretic transport of small particles to walls with streamwise curvature. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38, 2305–2315.
- KONSTANDOPOULOS, A. G., SKAPERDAS, E. et MASOUDI, M. (2001b). Inertial contributions to the pressure drop of diesel particulate filters. *SAE TRANSACTIONS*, 110, 621–630. 4.
- KONSTANDOPOULOS, A. G., SKAPERDAS, E. et MASOUDI, M. (2002). 2002-01-1015 microstructural properties of soot deposits in diesel particulate traps. *SAE TRANSACTIONS*, 111, 434–442. 4.
- KREMER, G. M. (2010). *Interaction of Mechanics and Mathematics : Introduction to the Boltzmann Equation and Transport Processes In Gases*. Springer.
- KULKARNI, P., BARON, P. A. et WILLEKE, K. (2011). *Aerosol measurement : principles, techniques, and applications*. John Wiley & Sons.
- L. MARCHISIO, D., DENNIS VIGIL, R. et O. FOX, R. (2003). Implementation of the quadrature method of moments in CFD codes for aggregation–breakage problems. *Chemical Engineering Science*, 58, 3337–3351. 15.
- LAMHARESS, N., STARCK, L., MILLET, C. N. et COSTA, P. (2013). Effect of biofuels on catalyzed diesel particulate filter regeneration. *Topics in Catalysis*, 56, 462–466. 1-8.
- LI, A. et AHMADI, G. (1993). Deposition of aerosols on surfaces in a turbulent channel flow. *International Journal of Engineering Science*, 31, 435–451. 3.
- LI, C. G., KOELMAN, H., RAMANATHAN, R., BARETZKY, U., FORBRIGER, G. et MEUNIER, T. (2009). Particulate filter design for high performance diesel engine application. *SAE International Journal of Fuels and Lubricants*, 1, 1307–1312.
- LI, W. et JAMES DAVIS, E. (1995). Measurement of the thermophoretic force by electrodynamic levitation : microspheres in air. *Journal of aerosol science*, 26, 1063–1083.

- LIU, Z. G., SKEMP, M. D. et LINCOLN, J. C. (2003). Diesel particulate filters : Trends and implications of particle size distribution measurement. *SAE transactions*, 112, 80–93. 4.
- LOCKER, R., GUNASEKARAN, N. et SAWYER, C. (2002). 2002-01-1009 diesel particulate filter test methods. *SAE TRANSACTIONS*, 111, 413–424. 4.
- LORENZ, E., CAIAZZO, A. et HOEKSTRA, A. (2009). Corrected momentum exchange method for lattice boltzmann simulations of suspension flow. *Physical Review E*, 79. 3.
- MALASPINAS, O. P. (2009). *Lattice Boltzmann Method for the Simulation of Viscoelastic Fluid Flows*. thesis.
- MANWART, C., TORQUATO, S. et HILFER, R. (2000). Stochastic reconstruction of sandstones. *Physical Review E*, 62, 893–899. 1.
- MARICQ, M. (2000). Gasoline engines : Ultrafine particle emissions.
- MARICQ, M. M. et XU, N. (2004). The effective density and fractal dimension of soot particles from premixed flames and motor vehicle exhaust. *Journal of Aerosol Science*, 35, 1251–1274. 10.
- MASOUDI, M. (2002). Hydrodynamics of diesel particulate filters. *SAE TRANSACTIONS*.
- MASOUDI, M. (2005). Pressure drop of segmented diesel particulate filters. *SAE paper*, 0971. 2005-01.
- MAZE, B., VAHEDI TAFRESHI, H., WANG, Q. et POURDEYHIMI, B. (2007). A simulation of unsteady-state filtration via nanofiber media at reduced operating pressures. *Journal of Aerosol Science*, 38, 550–571. 5.
- MEAKIN, P. (1989). Simulation of aggregation processes. D. Avnir, éditeur, *The Fractal Approach to Heterogeneous Chemistry*, John Wiley & Sons.
- MECKE, K. et ARNS, C. (2005). Fluids in porous media : a morphometric approach. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 17, S503. 9.

MERKEL, G. A., TAO, T., CUTLER, W., CHIFFEY, A., PHILLIPS, P., TWIGG, M. V. et WALKER, A. (2003). New cordierite diesel particulate filters for catalyzed and non-catalyzed applications.

MESSERER, A., NIESSNER, R. et PÖSCHL, U. (2003). Thermophoretic deposition of soot aerosol particles under experimental conditions relevant for modern diesel engine exhaust gas systems. *Journal of Aerosol Science*, 34, 1009–1021.

MOKHRI, M. A., ABDULLAH, N. R., ABDULLAH, S. A., KASALONG, S. et MAMAT, R. (2012). Soot filtration recent simulation analysis in diesel particulate filter (DPF). *Procedia Engineering*, 41, 1750–1755.

MUNTEAN, G. G., RECTOR, D., HERLING, D., LESSOR, D. et KHALEEL, M. (2003). Lattice-boltzmann diesel particulate filter sub-grid modeling-a progress report. *SAE Technical Papers*, 0835.

MÜLLER, P. et NATAROV, A. (2003). The internal wave action model (IWAM).

NISSAN (""). Clean diesel technology : Newly developed diesel engine m9r. url = <http://www.nissan-global.com/EN/TECHNOLOGY/OVERVIEW/m9r.html>.

NOURGALIEV, R., DINH, T., THEOFANOUS, T. et JOSEPH, D. (2003). The lattice boltzmann equation method : theoretical interpretation, numerics and implications. *International Journal of Multiphase Flow*, 29, 117–169.

OESTERLE, B. (2006). *Écoulements multiphasiques : des fondements aux méthodes d'ingénierie*. Hermes Science Publications.

OGUNWUMI, S., TEPESCH, P., CHAPMAN, T., WARREN, C., MELSCOET-CHAUVEL, I. et TENNENT, D. (2005). Aluminum titanate compositions for diesel particulate filters.

OGYU, K., OYA, T., OHNO, K. et KONSTANDOPOULOS, A. G. (2008). Improving of the filtration and regeneration performance by the SiC-DPF with the layer coating of PM oxidation catalyst.

OGYU, KAZUTAKE, OYA, TOMOKAZU, FUKUSHIMA, SHIHO, IWATA, HIDEMASA, OHNO, KAZUSHIGE, VLACHOS, NICKOLAS et KONSTANDOPOULOS, ATHANASIOS (2008). The study of pore structure of SiC-DPF for future PM emission regulation. *Future Powertrain Engine Transmission Propulsion and Emission - Proceedings of the 2008 Global Powertrain Congress*. Vaals, Netherlands.

OXARANGO, L., SCHMITZ, P., QUINTARD, M. et BARDON, S. (2003). 3d macroscopic model for fluid flow and soot deposit in wall flow honeycomb dpf. Rapport technique, SAE Technical Paper.

PARMIGIANI, A. (2011). *Lattice Boltzmann calculations of reactive multiphase flows in porous media*. Thèse de doctorat.

PATELLI, E. et SCHUËLLER, G. (2009). On optimization techniques to reconstruct microstructures of random heterogeneous media. *Computational Materials Science*, 45, 536–549.

PIDRIA, M. F., PARUSSA, F. et BORLA, E. M. (2007). Mapping of diesel soot regeneration behaviour in catalysed silicon carbide filters. *Applied Catalysis B : Environmental*, 70, 241–246.

PIHL, J. A., LEWIS, J. A., TOOPS, T. J., ADELMAN, B. J. et DERYBOWSKI, E. M. (2013). Development of a surface area dependent rate expression for soot oxidation in diesel particulate filters. *Topics in Catalysis*, 56, 499–503. 1-8.

PRADHAN, A. K., DAS, D., CHATTOPADHYAY, R. et SINGH, S. (2013). Effect of 3d fiber orientation distribution on particle capture efficiency of anisotropic fiber networks. *Powder Technology*, 249, 205–207.

QIAN, F., HUANG, N., ZHU, X. et LU, J. (2013). Numerical study of the gas–solid flow characteristic of fibrous media based on SEM using CFD–DEM. *Powder Technology*, 249, 63–70.

- REBAĬ, M., DROLET, F., VIDAL, D., VADEIKO, I. et BERTRAND, F. (2011). A lattice boltzmann approach for predicting the capture efficiency of random fibrous media. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 6, 29–37.
- RENAULT (""). Caractéristiques dacia lodgy dci 90 fap. url = <http://www.forum-dacia.com/forum/lodgy-finition-moteur/caracteristiques-dacia-lodgy-dci-fap-t124.html>.
- RICHTER, J. M., KLINGMANN, R., SPIESS, S. et WONG, K.-F. (2012). Application of catalyzed gasoline particulate filters to GDI vehicles. *SAE International Journal of Engines*, 5, 1361–1370.
- RINTOUL, M. D. et TORQUATO, S. (1997). Reconstruction of the structure of dispersions. *Journal of Colloid and Interface Science*, 186, 467–476. 2.
- SALEH, A. M., HOSSEINI, S. A., VAHEDI TAFRESHI, H. et POURDEYHIMI, B. (2013). 3-d microscale simulation of dust-loading in thin flat-sheet filters : A comparison with 1-d macroscale simulations. *Chemical Engineering Science*, 99, 284–291.
- SAMBAER, W., ZATLOUKAL, M. et KIMMER, D. (2011). 3d modeling of filtration process via polyurethane nanofiber based nonwoven filters prepared by electrospinning process. *Chemical Engineering Science*, 66, 613–623. 4.
- SAMBAER, W., ZATLOUKAL, M. et KIMMER, D. (2012). 3d air filtration modeling for nanofiber based filters in the ultrafine particle size range. *Chemical Engineering Science*, 82, 299–311.
- SCHMIDT, N., ROOT, T., WIROJSAKUNCHAI, E., SCHROEDER, E., KOLODZIEJ, C., FOSTER, D. E., SUGA, T. et KAWAI, T. (2007). Detailed diesel exhaust particulate characterization and DPF regeneration behavior measurements for two different regeneration systems.
- SCHWARTZ, L., MARTYS, N., BENTZ, D., GARBOCZI, E. et TORQUATO, S. (1993). Cross-property relations and permeability estimation in model porous media. *Physical Review E*, 48, 4584. 6.

- SHI, J. P. et HARRISON, R. M. (2001). Study of a water-cooled fluidized bed for diesel particle agglomeration. *Powder technology*, 115, 146–156.
- SOOS, M., WANG, L., FOX, R. O., SEFCIK, J. et MORBIDELLI, M. (2007). Population balance modeling of aggregation and breakage in turbulent taylor-couette flow. *J Colloid Interface Sci*, 307, 433–46. 2.
- STEWART, M. et RECTOR, D. (2004). A mechanistic model for particle deposition in diesel particulate filters using the latticeboltzmann technique. Wiley Online Library, 437–446.
- STRÖM, H. et SASIC, S. (2012). The role of thermophoresis in trapping of diesel and gasoline particulate matter. *Catalysis Today*, 188, 14–23.
- SUCCI, S. (2001). *The lattice Boltzmann equation : for fluid dynamics and beyond*. Oxford university press.
- TANDON, P., HEIBEL, A., WHITMORE, J., KEKRE, N. et CHITHAPRAGADA, K. (2010). Measurement and prediction of filtration efficiency evolution of soot loaded diesel particulate filters. *Chemical Engineering Science*, 65, 4751–4760. 16.
- TORREGROSA, A. J., SERRANO, J. R., ARNAU, F. J. et PIQUERAS, P. (2011). A fluid dynamic model for unsteady compressible flow in wall-flow diesel particulate filters. *Energy*, 36, 671–684.
- TRUESDELL, G. et ELGHOBASHI, S. (1994). On the twoway interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. II. particle dispersion. *Physics of Fluids*, 6, 1405.
- TSUSHIMA, S., NAKAMURA, I., SAKASHITA, S. et HIRAI, S. (2010). Lattice boltzmann simulation on particle transport and captured behaviors in a 3d-reconstructed micro porous DPF. *Training*, 2007, 05–07.

- VADEIKO, I. et DROLET, F. (2009). A fourth-order algorithm for solving the multi-dimensional kramers equation in Langevin form. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 42, 315002.
- VALENCIA, M., LÓPEZ, E., ANDRADE, S., IRIS, M. L., GUILLÉN HURTADO, N., RICO PÉREZ, V., GARCÍA GARCÍA, A., SALINAS MARTÍNEZ DE LECEA, C. et BUENO LÓPEZ, A. (2013). Evidences of the cerium oxide-catalysed DPF regeneration in a real diesel engine exhaust. *Topics in Catalysis*, 56, 452–456.
- VAN GULIJK, C., MARIJNISSEN, J. C. M., MAKKEE, M., MOULIJN, J. A. et SCHMIDT-OTT, A. (2004). Measuring diesel soot with a scanning mobility particle sizer and an electrical low-pressure impactor : performance assessment with a model for fractal-like agglomerates. *Journal of Aerosol Science*, 35, 633–655. 5.
- VANHAECKE, E., PHAM-HUU, C. et EDOUARD, D. (2012). Simulation and experimental measurement of dynamic behavior of solid foam filter for diesel exhaust gas. *Catalysis Today*, 189, 101–110. 1.
- VIDAL, D. (2008). *DÉVELOPPEMENT D'ALGORITHMES PARALLÈLES POUR LA SIMULATION D'ÉCOULEMENTS DE FLUIDES DANS LES MILIEUX POREUX*. Thèse de doctorat.
- VIDAL, D., RIDGWAY, C., PIANET, G., SCHOELKOPF, J., ROY, R. et BERTRAND, F. (2009). Effect of particle size distribution and packing compression on fluid permeability as predicted by lattice-Boltzmann simulations. *Computers & Chemical Engineering*, 33, 256–266.
- VIDAL, D., ROY, R. et BERTRAND, F. (2010). A parallel workload balanced and memory efficient lattice-Boltzmann algorithm with single unit BGK relaxation time for laminar Newtonian flows. *Computers & Fluids*, 39, 1411–1423.
- VLACHOS, N. D. et KONSTANDOPOULOS, A. G. (2006). Digital materials methods for DPF development. SAE International, SAE Technical Papers.

- WANG, J. et LI, Z. (2012). Negative thermophoresis of nanoparticles in the free molecular regime. *Physical Review E*, 86, 011201.
- WANG, L., MARCHISIO, D. L., VIGIL, R. D. et FOX, R. O. (2005a). CFD simulation of aggregation and breakage processes in laminar taylor-couette flow. *J Colloid Interface Sci*, 282, 380–96. 2.
- WANG, L., VIGIL, R. D. et FOX, R. O. (2005b). CFD simulation of shear-induced aggregation and breakage in turbulent taylor-couette flow. *J Colloid Interface Sci*, 285, 167–78. 1.
- WANG, Q., MAZE, B., TAFRESHI, H. V. et POURDEYHIMI, B. (2006). A case study of simulating submicron aerosol filtration via lightweight spun-bonded filter media. *Chemical Engineering Science*, 61, 4871–4883. 15.
- WANG, Q. et SQUIRES, K. D. (1996). Large eddy simulation of particle-laden turbulent channel flow. *Physics of Fluids*, 8, 1207.
- WANG-HANSEN, C., ERICSSON, P., LUNDBERG, B., SKOGLUNDH, M., CARLSSON, P.-A. et ANDERSSON, B. (2013). Characterization of particulate matter from direct injected gasoline engines. *Topics in Catalysis*, 56, 446–451. 1-8.
- WIROJSAKUNCHAI, E., SCHROEDER, E., KOLODZIEJ, C., FOSTER, D. E., SCHMIDT, N., ROOT, T., KAWAI, T., SUGA, T., NEVIUS, T. et KUSAKA, T. (2007). Detailed diesel exhaust particulate characterization and real-time DPF filtration efficiency measurements during PM filling process. Rapport technique, SAE Technical Paper.
- WU, G., KUZNETSOV, A. V. et JASPER, W. J. (2011). Distribution characteristics of exhaust gases and soot particles in a wall-flow ceramics filter. *Journal of Aerosol Science*, 42, 447–461.
- YAMAMOTO, K. et OHORI, S. (2012). Simulations on flow and soot deposition in diesel particulate filters. *International Journal of Engine Research*, 14, 333–340. 4.

- YAMAMOTO, K., SATAKE, S., YAMASHITA, H., TAKADA, N. et MISAWA, M. (2006). Lattice boltzmann simulation on porous structure and soot accumulation. *Mathematics and Computers in Simulation*, 72, 257–263. 2-6.
- YANG, J., STEWART, M., MAUPIN, G., HERLING, D. et ZELENYUK, A. (2009). Single wall diesel particulate filter (DPF) filtration efficiency studies using laboratory generated particles. *Chemical Engineering Science*, 64, 1625–1634. 8.
- YAZDCHI, K. et LUDING, S. (2013). Upscaling and microstructural analysis of the flow-structure relation perpendicular to random, parallel fiber arrays. *Chemical Engineering Science*, 98, 173–185.
- YAZDCHI, K., SRIVASTAVA, S. et LUDING, S. (2012). Micro–macro relations for flow through random arrays of cylinders. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 43, 2007–2020.
- YEONG, C. et TORQUATO, S. (1998a). Reconstructing random media. *Physical Review E*, 57, 495.
- YEONG, C. et TORQUATO, S. (1998b). Reconstructing random media. II. three-dimensional media from two-dimensional cuts. *Physical Review E*, 58, 224. 1.
- ZHENG, M. et BANERJEE, S. (2009). Diesel oxidation catalyst and particulate filter modeling in active – flow configurations. *Applied Thermal Engineering*, 29, 3021–3035. 14-15.
- ZHONG, D., HE, S., TANDON, P., MORENO, M. et BOGER, T. (2012). Measurement and prediction of filtration efficiency evolution of soot loaded diesel particulate filters.
- ZIARANI, A. S. et AGUILERA, R. (2011). Knudsen’s permeability correction for tight porous media. *Transport in Porous Media*, 91, 239–260. 1.