

Faculté De Technologie Département de Génie Mécanique

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES POUR L'OBTENTION DU DIPLOME DE MASTER EN GENIE MECANIQUE OPTION : GENIE ENERGETIQUE

Thème :

Etude de la combustion turbulente dans un moteur à gaz alimenté en CH_4

<u>Présenté Par :</u> M^{elle}MOSTEFAOUI Amina M^{elle}ALIAOUI Hassiba

Le 16 / 06 / 2015

Soutenu devant les membres de jury composé de :

Mr. C. SELADJI Mr. K. ALIANE Mm. H. SAIB Mr. H. BOUSBAA Président Examinateur Examinatrice Encadreur

ANNEE UNIVERSITAIRE : 2014-2015



Remerciement

Nous remercions d'abord DIEU qui nous a donné la santé, la force et la volonté pour réaliser beaucoup de choses au-delà de nos capacités normales.

Nous tenons évidemment à notre encadreur **Mr. H. BOUSBAA** qui a bien voulu superviser et suivre avec attention notre travail malgré les défis et pour sa grande patience et modeste qui donne de l'exemple.

Nos remerciements aussi à **Mr. C. SELADJI** d'avoir accepter de nous faire l'honneur de présider le jury de cette mémoire et de bien vouloir l'examiner.

Nous adressons aussi nos vifs remerciements à Mr. K. ALIANE et à Mm. H. SAIB d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Nos tous sincères remerciements vont également à tous les enseignants pédagogiques du département du génie mécanique de l'université de Tlemcen ont contribué à notre formation.

A tous ceux et celle qui de prés ou de loin ont apporté aide et encouragement, qu'ils trouvent ici l'expression de notre profonde gratitude.

> A.MOSTEFAOUI ET H.ALIAOUI

Résumé

La pollution atmosphérique et le réchauffement climatique provoqués par les émissions de gaz à effet de serre sont devenus une préoccupation et un enjeu majeur dans le monde entier. Un grand nombre de travaux des recherches ont été mené dans le but d'identifier des sources d'énergie de substitution plus écologiques que les produits pétroliers conventionnels. Le gaz naturel bénéficie d'un grand intérêt en tant que carburant alternatif propre. Son utilisation dans les moteurs et particulièrement ceux des véhicules est investigué.

Le gaz naturel, qui est principalement constitué de méthane, offre de nombreux avantages économiques et environnementaux. Le gaz naturel a des niveaux d'émission de polluants relativement bas comparés aux autres combustibles fossiles. En ce qui concerne le dioxyde de carbone, la combustion du gaz naturel engendre respectivement 30 à 40% moins que le pétrole et le charbon à quantité d'énergie consommée identique. Toutefois, les émissions de polluants dues à la combustion du gaz naturel peuvent être réduites.

Nous nous sommes, intéressés à la simulation numérique à l'aide du code CFD Converge pour étudier les phénomènes qui se manifestent dans le cylindre durant la phase de combustion notamment. L'approche RANS est utilisée. La combustion est décrite par le modèle SAGE, le spray par le modèle de KH-RT, la turbulence, l'allumage, la formation des NOx et des suies par les modèles RNG *k*- ε , Hiroyasu, et Zeldovich respectivement.

Les résultats numériques obtenus par le code de calcul CONVERGE qui tient compte des interactions entre la chimie et la turbulence seront comparés avec les résultats expérimentaux obtenus dans une chambre de combustion du gaz naturel.

Mots-clefs : Moteur à gaz naturel, combustion, CONVERGE V1.3, simulation numérique.

Abstract

Air pollution and global warming caused by greenhouse gases emissions have become a concern and a major challenge worldwide. Many research works have been conducted in order to identify sources of alternative energy more environmentally friendly than conventional petroleum products. Natural gas has a great interest as a clean alternative fuel. Its use in engines and particularly for vehicles is investigated.

Natural gas, which consists primarily of methane, offers many economic and environmental benefits. Natural gas emission levels of pollutants relatively low compared with other fossil fuels. As for carbon dioxide, the combustion of natural gas produces 30-40% respectively less than oil and coal to the same amount of energy consumed. However, pollutant emissions due to combustion of natural gas can be reduced.

We are interested to perform numerical simulations using the Converge for studying the phenomena that occur in the cylinder during the combustion phase. The RANS approach is used. To simulate the airflow field, the turbulence modeling was achieved by the rapid distortion RNG-($k.\varepsilon$) model. The atomization process was computed using the model based on KH-RT models. For combustion, the SAGE model associated with Shell ignition model was used. For *NOx* prediction, extended Zeldovich *NOx* model was adopted. Finally the Hiroyasu soot model was used for soot prediction. The numerical results obtained by the CONVERGE computer code that takes into account interactions between chemistry and turbulence will be compared with experimental results obtained in a combustion chamber of natural gas.

Keywords: Natural Gas Engine, combustion, CONVERGE V1.3, numerical investigation.

ملخص

لقد بات تلوث الهواء و ظاهرة انبعاث غازات الاحتباس الحراري مصدر قلق و تحد كبير في جميع أنحاء العالم. و قد أجريت أبحاث كثيرة تعمل من أجل تحديد مصادر طاقة بديلة ملائمة للبيئة أكثر من المنتجات النفطية التقليدية. الغاز الطبيعي لديه اهتمام كبير كوقود بديل نظيف. و يجري التحقيق ولاسيما استخدامه في المحركات و المركبات. الغاز الطبيعي، الذي يتكون أساسا من غاز الميثان، ويقدم العديد من الفوائد الاقتصادية والبيئية. مستويات انبعاث الغاز الطبيعي من الملوثات منخفضة نسبيا مقارنة مع أنواع الوقود الأحفوري الأخرى. أما بالنسبة لغاز ثاني أكسيد الكربون، واحتراق الغاز الطبيعي ينتج 30-40٪ على التوالي أقل من النفط والفحم إلى نفس كمية الطاقة المستهلكة. ومع ذلك، يمكن . أن تنخفض الانبعاثات الملوثة بسبب احتراق الغاز

ونحن مهتمون في المحاكاة العددية باستخدام رمز CFD لدراسة الظواهر التي تحدث في الاسطوانة أثناء مرحلة الاحتراق على وجه الخصوص. يتم استخدام نهج RANS . يوصف الاحتراق عن طريق نموذج SAGE ، حقن عن طريق نموذج KH-RT والاشتعال، وتشكيل الغازات الملوثة عن طريق نموذج Hiroyasu ، Shell ، RNG $k - \epsilon$ و Aldrence و Hiroyasu على التوالى.

تتم مقارنة النتائج العددية عن طريق البرنامج Converge حيت يأخذ بعين الاعتبار التفاعل بين الكيمياء والاضطراب للمقارنة مع النتائج التجريبية التي تم الحصول عليها في غرفة احتراق الغاز الطبيعي.

كلمات مفتاحية : محرك الغاز الطبيعي ، الاحتراق ، CONVERGE.

Sommaire

Résumé	
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Nomenclatures	
Introduction générale	01
Chapitre 1 : Description sur les Moteurs à gaz	
1.1. Introduction	06
1.2. Le gaz naturel en tant que carburant alternatif	06
1.3. Moteur à gaz naturel	07
1.3.1. Histoire	07
1.3.2. Propriétés physico-chimiques du gaz naturel	07
1.3.3. Le fonctionnement des moteurs au gaz naturel	08
1.3.3.1.L'électrovanne	09
1.3.3.2.Vaporisateur détenteur	10
1.3.3.3.Les injecteurs	10
1.4. Le Gaz de Pétrole Liquéfié (GPL)	12
1.4.1. Définition	12
1.4.2. La composition de GPL	12
1.4.3. Les données de combustion	13

1.5. Types de moteur au gaz naturel	13
1.5.1. Types de moteur au gaz naturel suivant le fonctionnement	13
1.5.2. Types de moteur au gaz naturel suivant le carburant	14
1.6. Utilisation de gaz naturel dans les moteurs	15
1.7. Caractéristiques générales du GPL	15
1.7.1. La liquéfaction de GPL	16
1.7.2. Les réservoirs GPL	17
1.8. Avantages et limitations du gaz naturel	18
1.8.1. Avantage	18
1.8.1.1.Réduction de la pollution et des gaz a effet de serre	18
1.8.1.2.Longévité du moteur	19
1.8.2. Problèmes et défis	19
1.8.2.1.Problèmes relatifs au fonctionnement du moteur	19
1.8.2.2.Coût initial élevé	19
1.9. L'installation GPL	20
1.10. Sécurité maximale pour véhicules GPL	23
1.10.1 Un réservoir GPL ultra résistant	23
1.10.2 Les accessoires de sécurité sur les véhicules GPL	23
1.11. Conversion d'un véhicule au gaz naturel	23
1.12. Les véhicule au gaz	24
1.13. Distribution du carburant méthane	24
1.14.Conclusion	25

Chapitre 2: Formulation mathématique

2.1. Introduction	27
2.2. Equations de l'aérothermochimie turbulente	27
2.2.1. Equation de continuité de l'espèce chimique m	28
2.2.2. Equation de conservation de la masse	28
2.2.3. Equation de Quantité de Mouvement	29
2.2.4. Equation de l'Energie	29
2.3. Approche de résolution RANS	30
2.3.1. Equation de continuité de l'espèce m	31
2.3.2. Equation de conservation de la masse totale	31
2.3.3. Equation de conservation de la quantité de mouvement	31
2.3.4. Equation de conservation de l'énergie interne	31
2.4. Les sous modèle physiques	31
2.4.1. Modèle de Turbulence	32
2.4.2. Le Modèle de Turbulence k- ε	32
2.4.3. Le Modèle de Turbulence RNG k-ε	33
2.4.4. Modélisation du spray	34
2.4.4.1.Formulation mathématique	34
2.4.4.2.Modèles d'atomisation	35

2.4.4.3. Collision	36
2.4.4.4. Evaporation	38
2.4.5. Modèle de dégagement de chaleur	40
2.4.6. Modèle de transfert thermique (Loi de paroi)	40
2.5. Les modèles chimiques	41
2.5.1. Modélisation de la combustion turbulente	41
2.5.1.1. Aperçu sur les modèles de combustion turbulente	41
2.5.2. Modèle d'Allumage	43
2.5.3. Modèle de formations des polluants	44
2.5.3.1.Le modèle de formation de NO_X	44
2.5.3.2.Modèle de formation des suies	47
2.6. Conclusion	48

Chapitre 3: Le code de calcul CFD CONVERGE

3.1. In	troduction	50
3.2. L'o	outil CFD	51
3.3. De	scription du code CFD converge	53
3.3.1	. Structure standard de Converge V1.3	53
	3.3.1.1.Génération de maillage	53

3.3.1.2.pre-processing	54
3.3.1.3.L'exécution du code	54
3.3.1.4.Post-processing	54
3.3.2. Les techniques de maillage	55
3.3.2.1. Raffinement du maillage de base	56
3.3.3. Les démarches numériques	56
3.4. Les fichiers de sortie et d'entrée dans converge	57
3.4.1. Descriptions des fichiers d'entrée	58
3.4.2. Descriptions des fichiers de sortie	59
3.4.2.1. Fichiers Echo (*.echo)	59
3.4.2.2. Fichiers out (*.out)	59
3.5. Présentation du banc d'essais moteur	61
3.5.1. Les spécifications du moteur	61
3.5.2. Spécifications d'injections	62
3.5.3. Distribution des valves	63
3.5.4. La bougie	64
3.6. Préparation des calculs par converge V1.3	65
Chapitre 4: Résultats des simulati	ons numériques
4.1. Introduction	67
4.2. Présentation de l'expérience	67
4.2.1. Les conditions initiales	68
4.2.2. Les conditions aux limites	69

4.3. Domaine du calcul	69
4.4. Chois des modèles de simulation	71
4.5. Discussion des résultats de simulation	71
4.5.1. Validation du code	71
4.5.2. Le taux de dégagement de chaleur et la température	72
4.5.3. L'évolution de la masse CH_4	74
4.5.4. L'évolution du OH	74
4.5.5. Emissions moyennes du cycle	75
4.5.5.1. Les émissions de monoxyde de carbone (CO)	75
4.5.5.2. Les émissions d'oxydes d'azote (NOx)	75
4.5.5.3. Les émissions d'hydrocarbures imbrûlés (HC)	76
4.6. Champs scalaires	77
4.6.1. Evolution de spray (CH_4)	77
4.6.2. Champs de température	81
4.6.3. Allumage	86
4.6.4. L'évolution des espaces NO_x , CO_2	87
4.6.4.1. L'évolution de <i>NOx</i>	87
4.6.4.2. L'évolution de CO_2	91
4.7. Conclusion	96
Conclusion Générale	98
Référence	100

Liste des figures

Fig.1.1: François Isaac	07
Fig.1.2: Moteur à gaz	07
Fig.1.3: Nikolaus Otto	07
Fig.1.4: Chaîne du moteur fonctionnent au gaz naturel	09
Fig.1.5: Schéma de l'électrovanne	09
Fig.1.6: Injecteur	10
Fig.1.7: La chambre de combustion d'un moteur	11
Fig.1.8: Structure chimique du butane et propane	12
Fig.1.9: Réservoir cylindrique	17
Fig.1.10: Réservoirs torique	17
Fig.1.11: Bus roulant au GPL	18
Fig.1.12: Schéma d'implantation d'un kit GPL	21
Fig.1.13: Schéma de principe d'un système d'alimentation GPL	22
Fig.1.14: système d'une voiture GPL	24
Fig.2.1: Schéma de principe du modèle KH-RT	37
Fig.2.2: Diagramme Φ -T de Pischinger	49
Fig.3.1: Représentation synthétique des liens entre la Réalité et les résultats de	
simulation	53
Fig.3.2: La structure standard de Converge	57

Fig.3.3: (a) Maillage initial, (b) Maillage raffiné	58
Fig.3.4: Schéma de fichiers d'entrée, des données et de sortie	59
Fig.3.5: Vue 3D du moteur	63
Fig.3.6: Vue 3D des valves	65
Fig.3.7: Vue 3D de la bougie d'allumage	66
Fig.4.1: Evolution de la pression expérimental	70
Fig.4.2: Configuration adoptée pour imposer les conditions aux limites a l'entrée des	
collecteurs d'admissions et a la sortie des collecteurs d'échappements	71
Fig.4.3: Maillage du domaine de calcul	72
Fig.4.4: Courbe de validation de la pression cylindre durant un cycle moteur	74
Fig.4.5: Taux de chaleur dégagé en fonction de l'angle de vilebrequin	75
Fig.4.6: L'évolution de la température en fonction de l'angle de vilebrequin	75
Fig.4.7: Evolution de la masse de CH_4 en fonction de l'angle de vilebrequin	76
Fig.4.8 : Prédiction des OH en fonction de l'angle de vilebrequin	76
Fig.4.9: prédiction des CO en fonction de l'angle de vilebrequin	77
Fig. 4.10: Prédiction des <i>NOx</i> en fonction de l'angle de vilebrequin	78
Fig.4.11: prédiction des <i>HC</i> en fonction de l'angle de vilebrequin	79
Fig.4.12: L'évolution de spray <i>CH</i> ₄	83
Fig.4.13: L'évolution de la température à différents angle de vilebrequin	83
Fig.4.14: les premières cellules d'allumage	83
Fig.4.15: L'évolution de <i>NOx</i>	86
Fig4.16: L'évolution de <i>CO</i> 2	88

Liste des tableaux

Tableau.1.1: Les principales constantes physiques 0)8
Tableau.1.2: Les pouvoirs calorifiques de GPL. 1	13
Tableau.2.1: Valeurs des constantes dans les modèles de turbulence k - ε , et RNG k - ε 3	33
Tableau.3.1: Code CFD 5	52
Tableau.3.2: Les fichiers d'entrées 5	59
Tableau.3.3: Les fichiers de sortie	50
Tableau.3.4: Description des caractéristiques géométriques du moteur étudié	52
Tableau.3.5: Description des caractéristiques du système d'injection du moteur étudié	52
Tableau.3.6: Les soupapes d'admissions et d'échappements ϵ	53
Tableau.3.7: Spécifications Système d'allumage ϵ	54
Tableau.4.1: Les conditions initiales	58
Tableau.4.2: Les conditions aux limites	59
Tableau .4.3: Choix des modèles	71

Nomenclature

- A Surface de contrôle
- *A_{fr}* Constante pré-exponentielle
- *a* Diffusivité thermique
- B_{fr} Nombre de transport de Spalding
- *b* Paramètre d'impact de collision
- *b_{cr}* Paramètre d'impact critique de collision
- a_m, b_m Coefficients steechiométriques intégrales pour la réaction
- *C_D* Coefficient de décharge
- *C_P* Chaleur spécifique du fluide
- *C_{pm}* Chaleur spécifique de l'espèce m
- $C_{\varepsilon 1}$ Constante des modèles k ε et RNG k ε
- $C_{\varepsilon 2}$ Constante des modèles k ε et RNG k ε
- D Coefficient de transport
- d_s Diamètre de suie
- E_a Energie d'activation
- E_c Energie cinétique
- F Vitesse de changement individuel d'une gouttelette
- *f* Fonction de distribution de probabilité des gouttelettes
- $\dot{f_{bu}}$ Terme source de destruction
- f_{coll} Terme source de collision
- f_w Taux de chaleur par unité de surface de la paroi
- g Force d'inertie
- Δh_f^0 Chaleur de formation de l'espèce m au zéro absolu
- h_m Enthalpie spécifique de l'espèce m

Ι	Matrice	unité
1	Maure	unite

- I Intensité de turbulence
- *E* Energie interne spécifique de l'espèce m
- J Vecteur du flux thermique
- *k* Energie cinétique
- K Coefficient de transport
- K_c^t Constante d'équilibre
- $K_{fr}.K_{br}$ Constante d'avancement
- L Chaleur latente
- L La Course du piston

 $M_{m,r}$ Masse molaire

- \dot{m}_a Taux d'entraînement de l'air
- m_f Masse du carburant dans la zone considérée
- m_{fg} Masse du carburant vaporisé
- m_a Masse d'air dans cette zone
- N Vitesse de rotation du moteur
- *n* Normale à la surface de la paroi
- P Pression du fluide
- P_a Pression à l'admission
- *P_e* Pression à l'échappement
- *P_{ch}* Pression dans la chambre
- *P_{ini}* Pression d'injection
- P_{ox} Pression partielle de l'oxygène
- \dot{Q}^{s} Interactions de vaporisation
- \dot{Q}^c Chaleur chimique dégagée par réaction chimique

R	Vitesse de la gouttelette
R_c	Nombre de Reynolds critique
R_0	Constante universelle des gaz
R^*	Radical
RH	Hydrocarbure
r	Rayon de gouttelette
S	Pénétration du jet
Т	Température du fluide
Τ̈́	Température de la gouttelette
t	Temps
Δt	Pas de temps
T _{cu}	Température de culasse
T_{cy}	Température du cylindre
T_p	Température des parois
T_a	Température d'admission
T_f	Température de carburant
u	Vitesse des gaz
u^*	Vitesse de cisaillement
u″	Fluctuation de vitesse turbulente
u _i	Vitesse d'injection du carburant
и, v, и	Composante de la vectrice vitesse
V	Volume de contrôle
W_m	Masse moléculaire de l'espèce m
w _{wall}	Vitesse des parois
Х	Vecteur de position

- x, y, z Coordonnées cartésiennes
- Ϋ́ Vitesse d'oscillation de la gouttelette
- \dot{Y} Vitesse de changement d'une gouttelette
- Y_m^* Valeur de la fraction à l'équilibre thermodynamique
- Y_m Fraction massique de l'espèce m

Notations Grecques

- $\alpha_0,\beta_0~$ Coefficient du le schéma Quick
- Γ_{d} Coefficient de diffusion
- σ Tenseur des contraintes visqueuses
- ε Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente
- λ Conductivité thermique.
- μ Viscosité dynamique
- μ_t Viscosité dynamique turbulente
- ν Viscosité cinématique
- v_t Viscosité cinématique turbulente

 $v'_{m,r}, v''_{m,r}$ Coefficients stechiométriques pour réactifs et produits

- ρ Masse volumique
- ρ_m Masse volumique de l'espèce
- ρ_s Masse volumique des suies
- τ_c Echelle de temps caractéristique de la réaction chimique
- τ_l Echelle de temps caractéristique laminaire

- τ_t Echelle de temps caractéristique de la turbulence
- w_r Taux de réaction
- Ø Scalaire
- $\widetilde{\emptyset}$ Moyenne de Favre.
- α_d Coefficient de tension superficielle de liquide
- ξ Nombre de Reynolds basé sur la vitesse des gaz relative à la paroi

 Ω_{kh} Taux d'accroissement

- $\dot{\rho}^{spray}$ Terme source du jet
- $\dot{\rho}^{chem}$ Terme source chimique

 $\Delta \theta$ Durée d'injection

Nombres sans dimension

- *We* Nombre de Weber
- *Z* Nombre d'Ohnesorge
- *Ta* Nombre de Taylor
- *We*_L Nombre de Weber liquide
- *Re_L* Nombre de Reynolds
- *Nu* Nombre de Nusselt
- Pr Nombre de Prandtl
- *Sc* Nombre de Schmidt
- *Sh* Nombre de Sherwood

Abréviations

AIE	Agence Internationale de l'Energie
AMR	Adaptive Mesh Refinement
CAO	Conception assistée par ordinateur
CFD	Computational Fluid Dynamics
CTC	Characteristic Time Combustion
GES	Gaz à Effet de Serre
GMV	General Mesh Viewer
GN	Gaz Naturel
GNC	Gaz naturel comprimé
GNV	Gaz Naturel pour Véhicule
GPL	Gaz de pétrole liquéfié
KH-RT	Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor
MCI	Moteur à combustion interne
PCI	Pouvoir calorifique inférieur
PCS	Pouvoir calorifique supérieur
PGS	Pressure Gradient Scaling
PISO	Pressure Implicit with Splitting of Operators
RANS	Reynolds averaged Navier-Stokes
RIF	Representative Interaction Flamelet
RNG	ReNormalization Group
TAB	Taylor Analogy Breakup

Introduction générale

1. Avant propos:

Depuis le 1er janvier 2006, la norme sur les émissions polluantes Euro4 est entrée en vigueur. Tous les véhicules neufs doivent respecter les niveaux d'émissions polluantes indiqués dans la norme européenne. De plus, les véhicules neufs émettant le plus de dioxyde de carbone sont taxés lors de leur immatriculation. Ces mesures législatives contraignent les constructeurs automobiles à développer des moteurs moins polluants et des systèmes de post-traitement de plus en plus complexes (le catalyseur trois voies ou le filtre à particules par exemple).

Dans le cadre de la réduction des émissions polluantes à la source, tous les types de moteurs sont étudiés: les moteurs à combustion interne1, les moteurs hybrides ou électriques et les piles à combustibles. Aujourd'hui encore les moteurs à combustion interne sont privilégiés par les constructeurs automobiles. Ils présentent d'abord l'avantage d'être nettement moins onéreux par rapport aux moteurs de technologie alternative, tout en assurant de meilleures prestations (performances, autonomie, agrément, fiabilité). De plus, ils sont capables de brûler de nombreux carburants moyennant de faibles adaptations (essence, gazole, GPL, gaz naturel, huiles végétales), ce qui assure partiellement l'après-pétrole. Enfin, de nombreuses voies d'amélioration connues restent encore à exploiter.

Actuellement, le développement des moteurs automobiles doit répondre à une volonté de réduction de la consommation du carburant et à des normes de plus en plus sévères concernant l'émission des gaz polluants. Les efforts pour diminuer la consommation spécifique des véhicules et la quantité de polluants qu'ils émettent s'orientent aujourd'hui dans trois directions principales:

- Amélioration de la combustion proprement dite par la conception de nouveaux moteurs plus performants, en utilisant les méthodes CFD combinées à des essais expérimentaux et des modèles de cinétique chimique (downsizing, système d'injection, nouveaux modes de combustion...);
- Amélioration des techniques de post-traitement des gaz émis à la sortie du moteur : pot catalytique, filtres à particules (La catalyse trois voies, la réduction catalytique sélective (SCR) et le piège à*NO_x*, filtre à particules);
- Utilisation des carburants alternatifs comme les moteurs à gaz naturel occupent une bonne position, due à la structure moléculaire du gaz naturel, les gaz d'échappement de ces moteurs contiennent de faibles quantités de suies, et environ 25% de moins de CO₂ en comparaison avec un moteur diesel du même rendement thermique. L'émission du NO_x et des hydrocarbures imbrûlés constitués principalement du méthane qui possède

une faible réactivité dans la formation de l'ozone, et de l'autre part un pouvoir de contribution à l'effet de serre assez grands, peut être réduit en utilisant les catalyseurs d'oxydation.

2. Situation du gaz naturel en Algérie:

L'Algérie est située dans une zone vulnérable aux effets néfastes des changements climatiques. Donc sensible aux déséquilibres environnementaux engendrés par le réchauffement climatique que subit la planète. Le secteur du transport, aujourd'hui est responsable d'un quart des émissions, il pourrait être à l'origine d'un tiers de celles-ci en 2030. De plus, elle va faire face à une croissance significative de sa demande en énergie primaire qui nécessitera un recours accru aux énergies fissiles. Pour pallier à ces deux problèmes, les énergies renouvelables sont la meilleure alternative durable. Parmi ces énergies, le gaz naturel (GN) et le gaz de pétrole liquéfier (GPL).

L'Algérie est le 1^{er} producteur africain de gaz (plus de 50 % de la production de gaz en Afrique) et classée le 10^{eme} producteur de gaz à l'échelle mondiale. Elle est le 2^{eme} fournisseur de gaz naturel de l'Europe, après la Russie.

Le gaz naturel, qui est principalement constitué de méthane, offre de nombreux avantages économiques et environnementaux. Le gaz naturel a des niveaux d'émission de polluants relativement bas comparés aux autres combustibles fossiles. En ce qui concerne le dioxyde de carbone, la combustion du gaz naturel engendre respectivement 30 et 40 % moins que le pétrole et le charbon à quantité d'énergie consommée identique. Toutefois, les émissions de polluants dues à la combustion du gaz naturel peuvent être réduites. Une alternative intéressante consiste à substituer l'hydrogène à une partie du gaz naturel, créant un combustible hybride moins polluant. Cette solution est une première étape vers une économie hydrogène afin d'adapter graduellement les infrastructures, les normes et réglementations ainsi qu'informer et préparer le public.

3. Organisation du travail:

Cette thèse est constituée de quatre chapitres. En premier lieu une description générale sur les moteurs à gaz naturels et les moteurs à gaz de pétrole liquéfié.

Puis le deuxième chapitre comportera une formulation mathématique. On y trouve les équations de l'aérothermochimie décrivant les écoulements réactifs. Puis, nous donnons les détails des modèles physiques et chimiques.

Dans le troisième chapitre nous avons présenté le code de simulation CONVERGE et la procédure numérique avec laquelle ce code de calcul traite les différents problèmes.

Dans le quatrième chapitre nous présentons les démarches numériques de calage. Enfin nous comparons les résultats obtenus aux résultats expérimentaux de la combustion du moteur à gaz. Les résultats seront analysés, interprétés et discutés dans ce dernier chapitre.

Une conclusion finale résumera tous les résultats atteints et donnera les perspectives futures de développement à la lumière du présent travail.

Chapitre 1 Description sur les moteurs à gaz

1.1 Introduction:

Le gaz naturel est reconnu comme un des principaux candidats pour remplacer dans l'avenir proche les carburants classiques comme l'essence et le gasoil que sont utilisés actuellement dans les moteurs à combustion interne. Le gaz naturel est préféré pour des raisons de réduction des émissions de gaz à effet de serre, pour son faible coût et son abondance. Pour utiliser le gaz naturel, les moteurs à combustion interne doivent être équipés avec des systèmes d'alimentation en gaz et des systèmes adaptés pour la combustion de ce carburant. Évidemment, pour utiliser pleinement les avantages du gaz naturel, les nouveaux moteurs devraient être conçus sur la base des dernières technologies. D'autre part, la conversion des moteurs existants grâce à des modifications et des calibrages appropriés doit assurer la substitution des combustibles classiques [1].

1.2 Le gaz naturel en tant que carburant alternatif:

Le gaz naturel a été utilisé comme carburant pour les moteurs à combustion interne depuis le début des années 1900. La majorité de ces applications ont été dans les moteurs stationnaires. L'utilisation du gaz naturel pour des applications automobiles a été en général limitée à des périodes de pénurie en essence. Au cours de la seconde guerre mondiale, les britanniques, les italiens et les allemands avaient des véhicules qui roulaient au «gaz de ville», un gaz synthétique produit a partir du charbon.

Lorsque l'essence était a nouveau disponible, l'utilisation du gaz naturel dans les véhicules a considérablement diminué et son application a été de nouveau reléguée aux moteurs stationnaires [2].

Plusieurs projets de recherche ont été entrepris partout dans le monde pour convertir les véhicules légers, les poids lourds et les autobus, ainsi que les moteurs de locomotive à l'utilisation du gaz naturel [3]. Beaucoup des véhicules diesel et essence sont convertis pour rouler avec ce carburant dans de nombreux pays.

1.3 Moteur à gaz naturel:

1.3.1 Histoire:

François Isaac de Rivaz construit les premiers moteurs à gaz utilisant du gaz de houille en 1804.

Quelques années plus tard Eugenio Barsanti décrit le principe d'un moteur à combustion interne et, associé à Felice Matteucci, construit un premier prototype opérationnel de moteur à gaz le moteur Barsanti-Matteucci fonctionnant au gaz d'éclairage ainsi que celui d'Etienne Lenoir en 1859 [4].



Hecht (1827)

Figure.1.1: François Isaac.



.



En 1867, le gaz d'éclairage est encore utilisé par Nikolaus Otto dans un moteur à gaz de quatre mètres de haut qui développe une puissance de 3 chevaux. Pour ce moteur, il reçoit la médaille d'or des moteurs à gaz à l'exposition universelle de 1867 à Paris [4].



Figure.1.3: Nikolaus Otto.

1.3.2 Propriétés physico-chimiques du gaz naturel:

Le méthane, l'éthane, le propane et le butane constituent les premiers quatre composants de la série homologue des hydrocarbures paraffines. A la température courante, ils sont des gaz incolores à une faible odeur d'essence pratiquement insolubles dans l'eau.

Dans le tableau (1.1) sont présentées les principales caractéristiques physiques de ces quatre hydrocarbures. Le méthane se liquéfie très difficilement (température d'ébullition à la pression atmosphérique est de -161.7 °C) ce qui a de sérieuses implications sur la possibilité de stockage dans le réservoir d'une voiture. L'une des possibilités d'assurer une autonomie adéquate au véhicule consiste en un stockage du méthane à l'état gazeux, comprimé jusqu'à une pression de l'ordre 25 *MPa*. L'utilisation des pressions élevées se heurte à des difficultés liées à la réalisation de l'installation d'alimentation, ainsi que celle du réseau de distribution. L'autre possibilité de stockage à l'état liquide dans des réservoirs cryogéniques est convenable du point de vue de la possibilité de réaliser un réservoir plus lège [1].

Le nom de la constante physique	Méthane	Ethane	Propane	Butane
	CH ₄	$C_2 H_6$	$C_3 H_8$	$C_{4}H_{10}$
Constante du gaz $J/Kg.K$	518.722	276.744	188.778	143.177
Température de fusion <i>K</i>	90.65	89.55	83.25	138.15
Chaleur de fusion kJ/kg	58.615	92.947	80.387	75.326
Température d'évaporation K	111.458	184.55	2.019	273.65
La chaleur de vaporisage kJ/kg	548.471	540.097	1.550	403.608
Température critique k	190.65	308.15	369.95	426.35
Pression critique MPa	4.6287	5.06	4.33	3.648
Masse volumique kg/m^3	0.7168	1.356	2.019	2.703
Densité relative à l'air	0.5554	1.0489	1.5617	2.0908
La chaleur spécifique à $(KJ/Kg.k)$	2.117	1.666	1.55	1.918
La viscosité dynamique $(N.S/m^2)$. 10^{-6}	10.35	8.55	7.5	6.8
Conductivité thermique W/m . K	0.03024	0.01826	0.01512	0.01349
Rapport des chaleurs spécifiques	1.30	1.22	1.14	1.11

Tableau.1.1: Les principales constantes [1].

1.3.3 Le fonctionnement des moteurs au gaz naturel:

Le moteur d'une voiture GNV est composé de nombreux éléments qui interviennent dans l'utilisation du gaz en tant que carburant. Le GNV est stocké à une pression de 200 bars dans les réservoirs. Le gaz est pressurisé afin d'être moins volumineux. Les réservoirs peuvent donc contenir plus de GNV que s'il était soumis à une pression normale. Lorsque le véhicule se met à

rouler, le GNV est libéré de façon contrôlée par un élément situé sur les bouteilles de gaz: l'électrovanne (également appelé électrovalve) [5].



Figure.1.4: Chaîne du moteur fonctionnent au gaz naturel [5].

1.3.3.1 L'électrovanne:

Le fonctionnement de l'électrovanne repose sur un système de pressions. Le gaz arrive d'un côté de l'électrovanne et une partie du gaz va s'infiltrer au-dessus de la membrane perforée. Deux pressions identiques vont ainsi s'opposer, créant Schéma d'une électrovanne

une sorte d'équilibre:

- une pression « P » qui tend à soulever la • membrane pour libérer le flux de gaz
- une pression « F » qui est exercée par la partie • de gaz située au-dessus de la membrane et qui poussera sur la membrane



Figure.1.5: Schéma de l'électrovanne

1.3.3.2 Vaporisateur détenteur:

Ce dispositif a pour but de rendre le GPL gazeux et de diminuer sa pression jusqu'à environ la pression atmosphérique, faisant passer le carburant de sa pression de stockage à sa pression d'utilisation.

Le gaz pénètre par la chambre d'entrée et sa pression de 200 bars est indiquée par un manomètre. La haute pression du gaz pousse un clapet ce qui régule son flux. Le clapet est en contact avec une membrane. La membrane s'appuie sur un ressort de réglage de pression qui est lui-même écrasé par une tige de réglage. Lorsque la tige comprime le ressort avec une pression relativement basse, la membrane pousse le clapet afin que le gaz atteigne la chambre de sortie. Le gaz ainsi relâché à une pression de 1 bar est dirigé vers un diffuseur-filtre qui permet de répartir équitablement le gaz dans les injecteurs.

1.3.3.3 Les injecteurs:

Les injecteurs permettent l'apport du gaz naturel vers la chambre de combustion avec un dosage précis. Ils remplacent le carburateur anciennement utilisé dans les moteurs car ils permettent d'optimiser le rendement du moteur. Le type d'injection utilisée dans les moteurs GNV est l'injection directe. A l'arrière de l'injecteur se trouve un filtre qui retient les impuretés. Ils sont la

plupart du temps contrôlés électriquement par un carburateur et ils laissent passer le gaz par petite quantité. Les injecteurs sont branchés à un collecteur d'admission. Cet élément, également appelé répartiteur d'air, a pour rôle de ramener l'air extérieur vers le moteur (l'aspiration). L'air est utilisé lors de la combustion du gaz. On obtient ainsi un mélange air-gaz



Figure1.6: Injecteur.

Le principe de combustion est le même que dans un moteur à essence, il existe deux types d'injections :

✓ Par carburation :

- L'aspiration: le piston descend et le mélange air-gaz entre dans la chambre de combustion puis il est aspiré par la soupape d'admission.
- La compression: le piston remonte ensuite, créant ainsi le processus de compression.

- La combustion: Le mélange est ainsi comprimé et juste avant que le piston atteigne le point mort haut (PMH), l'action de la bougie provoque l'inflammation du mélange. La combustion du gaz engendre une très forte augmentation de sa température qui atteint 2600°C. De plus sa pression est d'environ 120 bars. Ces deux facteurs repoussent le piston vers le bas (à une vitesse de 20m/s) ce qui crée un courant électrique.
- L'échappement: le gaz brûlé est évacué par la soupape d'échappement lorsque le piston remonte à nouveau.



Figure.1.7: La chambre de combustion d'un moteur [5].

✓ Par injection :

Dans les moteurs à injection directe d'essence, le mélange air/carburant est formé directement dans la chambre de combustion. Pendant la course d'admission, seul l'air de combustion est entrainé à travers la soupape d'admission ouverte. Le carburant est injecté à haute pression ans la chambre de combustion par des injecteurs spéciaux. Le degré de précision atteint lors du dosage, de la préparation et de la distribution de l'air d'admission et de carburant injecté à chaque course de combustion permet de réduire la consommation de carburant et les émissions.

1.4 Le Gaz de pétrole liquéfié (GPL) :

1.4.1 Définition:

Le gaz de pétrole liquéfié est un mélange d'hydrocarbures légers stocké à l'état liquide, et issu du raffinage du pétrole pour 40 % et du traitement du gaz naturel pour 60 %. Les hydrocarbures constituant le GPL, dans son appellation officielle, sont essentiellement le propane et butane, le mélange peut contenir jusqu'à 0,5 % d'autres hydrocarbures légers tels que le butadiène.

Le GPL était autrefois considéré comme un résidu de l'extraction du pétrole et directement brûlé au sommet de torchères. Il est dorénavant récupéré par distillation, les fractions les plus nobles et le reste servent généralement de carburant, mais pour des appareils différents. Le GPL est utilisé comme carburant pour les véhicules [6].

1.4.2 La composition de GPL:

Les GPL sont des hydrocarbures saturés dont les molécules sont composées d'atomes d'hydrogène et de carbone [6].



Figure.1.8: Structure chimique du butane et propane.

Les gaz de pétrole liquéfiés sont des hydrocarbures composés majoritairement de coupes en C_3 et C_4 , le butane et le propane étant les principaux composants. Ces produits, gazeux dans les conditions normales de température et de pression, peuvent être facilement liquéfiés, rendant aussi leur manipulation et leur transport très aisé.

1.4.3 Les données de combustion:

Les GPL ont un pouvoir calorifique élevé et constant. Le butane offre un pouvoir calorifique inférieur (PCI) de 12,66 kWh par Kg, le propane un PCI de 12,78 kWh par Kg. Si l'on considère leur pouvoir calorifique supérieur (PCS), le butane et le propane affichent respectivement 13,7 kWh et 13,8 kWh par Kg [6].

Pouvoir calorifique	BUTANE	PROPANE	
PCS (pouvoir calorifique supérieur)	13.7 KWh/Kg	13.8 KWh/Kg	
PCI (pouvoir calorifique inférieur)	12.66 KWh/Kg	12.78 KWh/Kg	

Tableau.1.2: Les pouvoirs calorifiques de GPL [6].

1.5 Types de moteur au gaz naturel:

1.5.1 Types de moteur au gaz naturel suivant le fonctionnement :

Il existe deux types de moteurs fonctionnant au gaz naturel : les moteurs à allumage par compression et les moteurs à allumage par étincelles [7].

> Les moteurs à allumage par compression:

Fonctionnant au gaz naturel, ils sont aussi efficaces que les moteurs diesel puisqu'ils utilisent le phénomène d'autoallumage par compression.

On obtient donc, à ce moment, le meilleur des deux mondes: la puissance et le rendement d'un moteur fonctionnant avec un haut taux de compression et une importante réduction des GES grâce à l'utilisation du gaz naturel.

Les moteurs à allumage par étincelles:

Ils fonctionnent de la même façon que les moteurs à essence actuels.

L'avantage de ce type de moteur est qu'il peut respecter les normes antipollution 2010 sans utilisation de filtre à particules ou de système fonctionnant à l'urée. Un simple convertisseur catalytique à trois voies suffit.

1.5.2 Types de moteur au gaz naturel suivant le carburant:

Le gaz naturel est l'un des carburants alternatifs les plus souples .il peut être utilisé dans les moteur a allumage commandé ou par compression du plus petit des motocyclettes aux plus grands de locomotives [9]. Les moteurs sont disponibles dans une variété de formats mais peuvent être généralement classés dans une des catégories [8] suivantes:

> Dédié, Mono-Fuel:

Dans un moteur dédié, le gaz naturel est l'unique carburant utilisé. Ce type de moteur a l'avantage d'être optimisé pour fonctionner au gaz naturel, permettant ainsi de meilleure performance et une amélioration des émissions [9]. Les véhicules dotés d'un tel moteur nécessitent un seul réservoir de carburant. Cette réduction de poids permet une augmentation du rendement du moteur. Certains véhicules dédiés sont également équipés d'un réservoir d'essence de secours en cas de panne en gaz. Cependant comme le véhicules est optimisé pour le gaz naturel, il ne devrait dans ce cas, être utilisé que pour de courts trajets seulement, et non pas d'une façon régulière.

> Bi-fuel ou Bivalent:

Les moteurs bi-fuels fonctionnent soit au gaz naturel ou a l'essence (ou un autre carburant pouvant être utilisé dans les moteurs a allumage commandé tel que l'éthanol). Ces moteurs sont obtenus soit par conversion ou initialement ainsi conçus [9]. Généralement les moteurs a allumage commandé peuvent facilement être convertis en moteurs bi- fuels par placement ultérieur d'un kit GNV. Un sélecteur de carburant permet à l'utilisateur de choisir le carburant voulu [10]. Cependant, les bi-fuels utilisent généralement l'essence pour le démarrage. Ainsi, au moins une petite quantité d'essence est toujours nécessaire pour un bon fonctionnement.

On peut ajouter à cette catégorie, les moteurs tri-fuels, un concept relativement récent, qui combine le «flex-fuel» et le GNV. Les véhicules «flex-fuel» utilisent l'essence et l'éthanol, séparément ou mélangé. Ainsi, un véhicule tri-fuel peut rouler à l'essence, l'éthanol(ou mélangés) ou au gaz naturel. Les véhicules tri-fuels sont apparus, pour la première fois sur le marché, en 2005 au brésil, où l'éthanol et le gaz naturel sont tous les deux largement utilisé dans le transport.

> Dual-fuel:

Un moteur dual-fuel au GNV utilise à la fois, un mélange de gaz naturel avec un autre carburant. Le mélange gaz-air est allumé par un combustible pilote. Celui-ci est injecté directement dans la chambre de combustion, tandis que le gaz est introduit dans le conduit d'admission par carburation ou par injection [11]. Une injection directe du gaz dans le cylindre est aussi utilisée dans certains moteurs.

Dans ce type de moteurs, le gaz est utilisé comme combustible principal, tandis que le gazole, combustible pilote, sert de source d'allumage dans un mode d'allumage par compression [12]. Les moteurs dual-fuel ont l'avantage de fournir la même puissance qu'un moteur diesel conventionnel, puisque il conserve le même taux élevé de compression et produit de plus faibles quantités concernant certaines émissions notamment les particules [9].

1.6 Utilisation de gaz naturel dans les moteurs:

Le gaz naturel est utilisé d'une façon générale soit pour être brûler et produire de l'énergie électrique ou thermique ou les deux soit comme matière première pour l'industrie.

Le gaz naturel est utilisé comme carburant par les véhicules routiers sous forme comprimée à200bars (GNC) ou liquéfiée à-163°C(GNL).

Le GPL est donc une source d'énergie idéale pour une population rurale, utilisé comme énergie unique ou en association avec des carburants renouvelables. Récemment, le GPL est utilisé avec la chaleur combinée et l'énergie électrique: c'est ce que l'on appelle la cogénération. Elle se base sur le fait que la production électrique dégage une grande quantité de chaleur à température moyenne, habituellement dissipée dans l'environnement. Cette technologie a permis au GPL d'être utilisé dans les zones rurales non seulement pour chauffer et cuisiner, mais également pour décentraliser la production d'électricité des maisons individuelles.

1.7 Caractéristiques générales du GPL:

Les GPL sont des gaz puissants, propres, économiques, facilement stockables et transportables, sans infrastructure particulière. Ils offrent d'excellents rendements énergétiques grâce à leur pouvoir calorifique élevé. Le butane se vaporise à partir de 0°C, il
est donc privilégié en usage intérieur. Le propane se vaporise à partir de -42°C, il est utilisé en usage extérieur. Quel que soit leur conditionnement, en bouteille ou en citerne, les GPL sont stockés à l'état liquide (soumis à une pression relativement faible).

Aux conditions normales de température et de pression, le GPL est un gaz plus lourd que l'air. Le butane commercial en phase vapeur est deux fois plus lourd que l'air par contre le propane commercial est une fois plus lourd.

Le GPL est non corrosif, il est incolore, que ce soit en phase liquide ou vapeur.

1.7.1 La liquéfaction de GPL [5]:

Issu d'une production par fermentation, le gaz naturel doit être épuré car il présente une trop faible concentration de méthane. Autrement, le rendement du gaz en tant que carburant serait trop faible et le fonctionnement du moteur endommagé. On cherche alors à obtenir du méthane pur. Pour cela, on utilise une solution que l'on appelle la chaîne GNL ou gaz naturel liquéfié. Cette chaîne implique la liquéfaction mais surtout l'épuration du gaz naturel. A la base, cette chaîne fut développée pour répondre à un problème de transport car le gaz liquéfié est 600 fois volumineux. Aujourd'hui, ce concept de liquéfaction permet de régler le problème de composition du gaz naturel obtenu après fermentation. La chaîne GNL présente 4 étapes dont les 3 premières consistent à obtenir un méthane pur. Ces 3 étapes sont:

- L'épuration: qui consiste à extraire les éléments soufrés (comme le sulfure d'hydrogène et le dioxyde de carbone.
- La déshydratation: qui consiste à éliminer l'eau (H₂O) et donc de prévenir de la formation d'hydrates de méthane. Cette étape permet également, une fois le gaz sec, d'extraire le mercure (Hg) du gaz naturel.
- Le pré refroidissement: où le gaz est refroidit à une température d'environ -30 °C pour anticiper la liquéfaction. Ensuite, le gaz subit une série de distillation dans des colonnes d'épuration où sont éliminés les hydrocarbures (comme l'éthane) et les GPL (comme le butane ou le propane) plus lourds.
- La 4^e étape est la liquéfaction. Elle consiste à atteindre la température d'ébullition du méthane qui est de -161°C. Cette température étant inférieure à -150°C, le méthane liquide est qualifié de cryogénique. Pour atteindre cette température le méthane est comprimé puis détendu à 2 ou 3 reprises. Il se refroidit à pression atmosphérique

constante selon ce principe de refroidissement également utilisé pour les réfrigérateurs.

1.7.2 Les réservoirs GPL :

Trois types de réservoirs sont utilisés actuellement:

Les réservoirs cylindriques sont les plus aisés à construire et les moins chers. Ils sont par contre, très encombrants et prennent donc beaucoup de place dans un coffre [13].



Figure.1.9: Réservoir cylindrique [13]

Les réservoirs toriques sont prévus pour se loger à la place de la roue de secours. Cette solution est actuellement préférée pour les véhicules de première monte (équipés en usine). L'autonomie offerte est en général inférieure à celle d'un réservoir cylindrique.



Figure.1.10: Réservoirs torique [13]

Les réservoirs multi corps présentent l'intérêt de pouvoir adapter sa forme aux exigences du véhicule. Cette technique est adoptée pour les bus (plusieurs réservoirs cylindriques sur le toit).



Figure.1.11: Bus roulant au GPL [13].

Ces réservoirs obéissent à un certain nombre de contraintes de sécurité (résistance à 80 bars,...). Le remplissage est limité à 80% du volume total. Ces réservoirs doivent être rétestés tous les 8 ans. L'autonomie offerte par un réservoir de 50 litres de GPL est voisine de 300 km (sur un véhicule familial de première monte). L'autonomie totale du véhicule (GPL+essence) est donc très élevée.

Le GPL est le carburant le moins polluant. Il ne libère pas de particules et limite les émissions de CO2, un des gaz responsables de l'effet de serre. Par conséquent les voitures GPL ne sont pas interdites de circulation en cas de forte pollution. L'autre avantage du GPL c'est le prix, aux environs des $0.60 \in$ le litre. La combustion du GPL est également propre, ce qui permet d'espacer les vidanges du moteur et d'augmenter sa durée de vie. Le moteur est enfin plus silencieux.

1.8 Avantages et limitations du gaz naturel:

1.8.1 Avantage:

Peu de carburants alternatifs offrent les avantages distincts et indéniables du gaz naturel. Il est largement disponible, uniformément répartit, renouvelable, permet de réduire les émissions de gaz a effet de serre et produit moins d'émissions polluantes comparé aux autres combustibles traditionnels et alternatifs [8]. L'utilisation du GNV permet aussi une diversité et une sécurité énergétique [9].

1.8.1.1 Réduction de la pollution et des gaz a effet de serre:

Les avantages environnementaux sont l'une des principales motivations pour lesquelles la plupart des gouvernements dans le monde veulent promouvoir l'utilisation du gaz naturel comme carburant.

Les émissions de CO_2 des moteurs au gaz naturel peuvent être réduites de plus de 20% comparées à celles des moteurs à essence, à puissance égale. Catania et al [14] ont montré que les émissions de moteur au gaz naturel ont moins d'effet sur le réchauffement global que les émissions de ceux a essence, et ce en tenant compte du potentiel de réchauffement global du méthane.

1.8.1.2 Longévité du moteur:

Kojima [15] a rapporté que l'utilisation du gaz naturel dans les autobus produit moins de bruits et de vibrations, comparé aux carburants conventionnels. Ceci permet une plus longue durée de vie et de moindres coûts d'entretien.

1.8.2 Problèmes et défis:

1.8.2.1 Problèmes relatifs au fonctionnement du moteur:

Quelques problèmes techniques doivent être résolus pour une meilleure utilisation du gaz naturel dans les moteurs:

Comme pour les moteurs a essence, les moteurs au gaz naturel nécessitent un système de dosage précis, afin de limiter les émissions [16].

L'injection ou l'induction du gaz naturel dans le collecteur d'admission affecte le rendement volumétrique en raison du remplacement de l'air par le gaz combustible. Le PCI massique inférieur de 2.2% et le dosage stœchiométrique supérieur de 17.2% pour le gaz naturel par rapport a l'essence affecte aussi la puissance du moteur. Globalement, la conjonction de ces trois facteurs induit une réduction de 10 à 15% de la puissance par rapport aux moteurs a essence de même taille. L'injection directe de gaz naturel dans le cylindre résout le problème du rendement volumétrique.

1.8.2.2 Coût initial élevé:

Le GNV est utilisé beaucoup plus pour les flottes de transport routier que pour les véhicules de particuliers a cause du coût initial élevé de conversion, ceci est du aux bas volumes de production [16].

1.9 l'installation GPL:

Le circuit d'alimentation d'un moteur fonctionnant au gaz liquide se compose d'un réservoir, d'un filtre, d'un régulateur de pression, d'un vaporisateur, d'un carburateur et des canalisations correspondantes.

Le prélèvement s'effectue au moyen d'une tubulure plongeant au fond du réservoir, où le gaz se trouve toujours à l'état liquide. La partie supérieure ne contient que des vapeurs qui ne permettraient pas au moteur de fonctionner aux hauts régimes.

Enfin, si l'on prélevait le GPL dans la partie supérieure du réservoir, la composition du gaz liquide restant s'enrichirait graduellement de butane, du fait de l'évaporation plus rapide du propane. On obtiendrait ainsi une diminution de pression dans le réservoir et une diminution du nombre d'octane du combustible. En puisant le GPL liquide au fond du réservoir, le mélange reste donc pratiquement constant. Le GPL traverse un premier filtre puis passe, toujours à l'état liquide, dans la partie à haute pression du régulateur (régulateur primaire) où la pression est ramenée à des valeurs variant entre 0,3 et 0,7 kg/cm2, contre 10 à 14 kg/cm2 dans le réservoir.

Il passe ensuite dans le «vaporisateur» (généralement incorporé au régulateur de pression) : il s'agit d'un serpentin immergé dans l'eau chaude provenant du moteur, dans lequel le GPL se transformera en gaz.

Ce gaz entre ensuite dans la partie à basse pression du régulateur (régulateur secondaire), qui ramène la pression à une valeur légèrement inférieure à la pression atmosphérique (5 mm environ d'eau) La régulation de cette dépression est fondamentale pour réaliser un dosage correct du combustible dans le carburateur. Le régulateur sera sensible aux variations de la pression atmosphérique et à la température agissant de façon telle que la pression finale soit toujours légèrement inférieure à la pression atmosphérique pour éviter que le gaz ne s'échappe librement dans l'atmosphère pendant le fonctionnement du moteur.

Du régulateur secondaire, le combustible passera dans le carburateur où s'effectuera le mélange avec l'air qui sera aspiré dans le conduit d'admission.



Figure.1.12: Schéma d'implantation d'un kit GPL [17].

* Principe de fonctionnement:

Le passage en mode GPL se fait par l'intermédiaire d'un interrupteur (4) situé sur le tableau de bord. Le témoin (3) rappelle au conducteur le mode de carburant utilisé. Le démarrage du moteur s'effectue en mode essence quelle que soit la position de l'interrupteur. La commutation en mode GPL s'effectue lorsque la température du moteur est supérieure ou égale à 15°C.

Le GPL liquide provenant du réservoir se vaporisé au travers du vaporisateur-détendeur (6), celui-ci est réchauffé par l'intermédiaire du circuit de refroidissement du moteur. Asservi à la pression de la tubulure d'admission, il module le débit de gaz envoyé au doseur distributeur (19).

Ainsi, le GPL à l'état gazeux est distribué aux injecteurs (17) par l'intermédiaire du doseur distribue (19).

Le calculateur (1) exploite les informations des différents capteurs et sondes (11-13-14-15-18) et pilote le doseur distributeur par l'intermédiaire d'un moteur «pas à pas» et ainsi module la quantité de gaz à injecter. L'injection s'effectue de façon simultanée sur tous les cylindres. Le calculateur GPL est équipé d'un autodiagnostic permettant de signaler et d'identifier les défauts [18].



- Voyant diagnostic inj/all
- 10: Dispositif de régulation de ralenti
- 18: Capteur de pression d'air admission gpl
- 19: Doseur distributeur gpl

Figure.1.13: Schéma de principe d'un système d'alimentation GPL [18].

1.10 Sécurité maximale pour les véhicules GPL :

En raison de rares très médiatisés par le passé, le GPL a longtemps souffert d'une mauvaise image en terme de sécurité. Pourtant, rouler au GPL est aussi sur que de rouler avec un véhicule essence. Aujourd'hui, les voitures GPL présentent des garanties de sécurité maximales.

1.10.1 Un réservoir GPL ultra résistant:

Conçu en acier, un réservoir GPL possède des parois 6 fois plus épaisses qu'un réservoir essence ou diesel. Entièrement étanche, un réservoir GPL résiste à des pressions supérieures à 30 bars, alors que la pression d'utilisation n'excède pas les 5 bars. Un réservoir GPL résistait aux flammes pendant plus d'une demi-heure là où un réservoir d'essence explosait après seulement 5 minutes.

1.10.2 Les accessoires de sécurité sur les véhicules GPL:

Depuis 2001, les équipements de GPL sont réglementés au niveau européen. Aussi, quelle que soit sa forme, un réservoir GPL doit obligatoirement être équipé de 5 accessoires de sécurité: un clapet anti-retour, un limiteur de remplissage à 80%, un limiteur de débit, une électrovanne et une soupape de sécurité.

1.11 Conversion d'un véhicule au gaz naturel:

Bien des véhicules peuvent être convertis de manière à pouvoir fonctionner à la fois avec des carburants liquides classiques et avec du gaz naturel. On peut ainsi convertir un véhicule alimenté à l'essence en un véhicule fonctionnant au gaz naturel ou à l'essence, et un véhicule alimenté au diesel en un véhicule fonctionnant au gaz naturel ou au diesel.

La conversion d'un véhicule à essence en un véhicule biocarburant nécessite l'installation de réservoirs de carburant. Ces réservoirs sont des cylindres qu'on installe habituellement sous le véhicule ou dans le coffre. Il faut aussi installer des conduits de carburant en acier inoxydable, un régulateur pour réduire la pression et un mélangeur air-carburant spécial. Dans le cas d'une conversion en un véhicule biocarburant, un interrupteur installé sur le tableau de bord permet au conducteur de passer facilement et en tout temps du GN ou du biogaz à l'essence ou au diesel et vice versa, alors que le véhicule roule, que le moteur





Figure. 1.14: Système d'une voiture GPL [18].

1.12 Les véhicules au gaz :

Le gaz méthane possède un très fort indice d'octane (120 à 130) ce qui permet de fonctionner avec un très bon rendement dans les moteurs à allumage commandé.

Les véhicules légers fonctionnant au gaz naturel ont des moteurs à essence équipés d'une injection de gaz. Afin que le fonctionnement soit possible avec les deux carburants, le rapport volumétrique est adapté à l'essence. Mais ceci ne permet pas d'exploiter le potentiel du gaz au niveau de son indice d'octane, la consommation pourrait être plus faible avec un moteur spécifique gaz.

1.13 Distribution du carburant méthane :

Une station service de gaz naturel est plus complexe que son homologue traditionnel car le gaz doit être comprimé.

Il y'a deux possibilités de station service :

La compression simple (200 bars). Le remplissage est alors assez lent (plusieurs heures). Il est donc nécessaire de créer des emplacements de parking dédies à la recharge.

La surcompression suivie d'un stockage à haute pression (250 bars) permettant un remplissage rapide sur des pistes dédiées. Cette solution est évidemment plus chère que la précédente.

1.14 Conclusion:

Les connaissances et la technologie permettent aujourd'hui de ravitailler les véhicules avec du gaz naturel ou du GPL. L'utilisation de ces carburants semble avantageuse sur le plan économique.

Le GNV est un carburant qui nécessite certaines conditions pour qu'un moteur puisse l'utiliser. Son prix est compétitif par rapport aux autres carburants et son impact écologique est moins important. Le GNV pourrait donc devenir le carburant de demain et remplacer l'essence.

On peut donc conclure notre travail en affirmant que le gaz naturel peut être une solution durable pour faire face à des problèmes actuels complexes. Il reste cependant nécessaire de reconvertir nos économies en les basant sur l'utilisation générale de ce carburant car ce n'est qu'à travers une utilisation à l'échelle mondiale ou du moins nationale que nous pourrons observer des changements environnementaux significatifs.

Chapitre 2

Formulation mathématique

2.1 Introduction:

La combustion dans les moteurs a combustion interne est un processus très complexe, mettant en cause l'interaction d'une multitude de phénomènes tels que: la turbulence, le transfert thermique et les réactions chimiques complexes qui agissent simultanément dans la chambre de combustion. De plus, les contraintes actuelles, tant écologiques qu'économiques, forcent les constructeurs automobiles à effectuer des travaux de recherche liés à la combustion turbulente. De ce fait, il est nécessaire de comprendre les processus physique et chimique prépondérants au sein d'une chambre de combustion qui permettent non seulement l'amélioration des systèmes actuels mais aussi le développement de nouvelles technologies.

Dans ce contexte, l'utilisation de l'outil numérique permet de réduire les coûts et les temps d'études. Il est très simple de modifier numériquement la géométrie ou les conditions d'utilisation (pression, température...). Les investigations réalisées avec les codes CFD (Computational Fluid Dynamics) par exemple: Converge, KIVA, Fluent... permettent alors de tester un grand nombre de solutions pour ne retenir que les plus pertinentes pour des tests expérimentaux.

Dans le cadre de la modélisation de la combustion turbulente, l'utilisation d'un code de calcul comme converge représente une bonne démarche de compréhension et de prédiction des phénomènes qui se manifestent à l'intérieur du cylindre d'un moteur à combustion interne alimenté par le méthane.

Nous avons utilisé, dans le cadre de ce travail et grâce à un programme de coopération, le code CFD ConvergeV1.3, qui a été développé à l'université deMiddleton, Wisconsin en 2008 [19].

2.2Equations de l'aérothermochimie turbulente:

La simulation numérique d'un problème de combustion vise la résolution des équations de l'aérothermochimie. Il s'agit du système composé des équations de conservation de la masse, de conservation de la quantité de mouvement, de conservation des espèces chimique et de conservation de l'énergie.

Dans ce qui suit on expose les équations gouvernantes de la phase fluide, suivies par les sousmodèles physiques. Ces sous modèles décrivent la turbulence, le spray et le dégagement de chaleur. Les sous-modèles chimiques décrivent la combustion, l'allumage et la formation de polluants.

Le système d'équations à résoudre peut s'écrire dans sa forme générale pour une variable φ contenant des termes dus à la convection, à la diffusion et des termes sources:

$$\delta(\rho\varphi)/\partial + \nabla(\rho \vec{u}\varphi) = \nabla(\Gamma_{\varphi} grad\varphi) + S_{\varphi}$$
(2.1)
Accumulation Convection Diffusion Source

 ρ Est la densité, \vec{u} est la vectrice vitesse, Γ_{ϕ} est le coefficient de diffusion, et S_{ϕ} est le terme source.

2.2.1 Equation de continuité de l'espèce chimique m:

La détermination de la fraction massique pour chaque espèce, m, s'obtient par la solution de l'équation de transport de la I^{eme} espèce, sous la forme [19, 20]:

Où ρ_m est la masse volumique de l'espèce *m*, ρ est la masse volumique du mélange, \vec{u} est la vitesse du mélange, *D* est le coefficient de diffusion (*loi de Fick*), $\dot{\rho}_m^c$ regroupe les termes sources d'origine chimique, $\dot{\rho}_n^s$ regroupe les termes sources provenant du spray.

On suppose que toutes les espèces ont des diffusivités égales, données par $D = \frac{\mu}{\rho S_c}$

μ est la viscosité dynamique et S_c est le nombre de Schmidt (le nombre de Schmidt compare les effets de la viscosité et de la diffusion du fluide), $S_c = \frac{\nu}{D}$

2.2.2 Equation de conservation de la masse:

Par sommation des équations (2.2) sur toutes les espèces, on obtient l'équation de la conservation de la masse totale du fluide.

2.2.3 Equation de Quantité de Mouvement:

Les équations moyennes de conservation de la quantité de mouvement découlent de la seconde loi fondamentale de la dynamique et donné par:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla (\rho . u . u) = -\frac{1}{\alpha^2} \nabla p - A_0 \left(\frac{2}{3} \rho k\right) + \nabla \sigma + F^s + \rho g \dots (2.4)$$

Où p est la pression du fluide. La quantité α est utilisée en conjonction avec la méthode de l'échelle de gradient de pression PGS (Pressure Gradient Scaling). Cette méthode parait efficace pour les faibles nombres de Mach.

Dans l'équation (2.4) la quantité A_0 est égale à zéro pour les écoulements laminaires et à l'unité si un modèle de turbulence est utilisé. Le tenseur des contraintes visqueuses est de forme newtonienne :

$$\sigma = \mu \left[\nabla u + (\nabla u)^T \right] + \lambda \nabla . u I$$
(2.5)

Les deux coefficients de viscosité μ et λ , seront définis dans ce qui suit. L'exposant T indique la transposée d'une matrice et I représente la matrice unité. F^s est le gain du taux de quantité de mouvement par unité de volume dû au spray. La force d'inertie g est considérée constante.

2.2.4 Equation de l'Energie:

L'équation de conservation de l'énergie interne (E) découle du premier principe de la thermodynamique et s'écrit toujours selon la convention d'Einstein comme suit:

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla . \left(\rho u E\right) = -p \nabla . u - \nabla J + (1 - A_0)\sigma : \nabla u + A_0 \rho \varepsilon + \dot{Q}^c + \dot{Q}^s \dots \dots \dots (2.6)$$

Le vecteur du flux thermique J est la somme des contributions dues à la conduction thermique et à la diffusion de l'enthalpie:

$$J = -K \nabla T - \rho D \sum_{m} h_{m} \nabla (\rho_{m} / \rho) \dots (2.7)$$

Où T est la température du fluide et h_m l'enthalpie spécifique de l'espèce m, Kest la conductivité thermique.

Deux termes sources surgissent dans l'équation (2.6): \dot{Q}^c due à la chimie et \dot{Q}^s due au spray.

2.3 Approche de résolution RANS

La méthode RANS constitue un outil performant et moins complexe dans l'étude des écoulements réactifs, particulièrement adaptées à l'étude du comportement instationnaire des écoulements turbulents. Cette méthode consiste à résoudre les équations de Navier Stockes moyennées statistiquement. Elle permet d'avoir accès uniquement aux grandeurs moyennes. Cet outil de simulation nécessite un plus grand effort de modélisation. Il est aujourd'hui l'outil le plus utilisé dans la recherche industrielle car son coût de mise en place est le plus faible. Nous considérons dans ce travail une approche 3D. RANS est une méthode statistique qui consiste à décomposer chaque variable de l'écoulement en la somme de sa moyenne d'ensemble (moyenne de Reynolds) et de sa fluctuation:[21,22]

$$\phi = \phi + \phi' \dots (2.8)$$

$$\overline{\phi} = \lim_{Ns \longrightarrow \infty} \sum_{m=1}^{Ns} \frac{\phi(m)}{Ns} \dots (2.9)$$

En appliquant cette opération de décomposition aux équations de conservation, un terme représentant la composante turbulente de l'écoulement apparait. Ce terme s'appelle le tenseur de cisaillement de Reynolds et n'est pas connu à priori. La fermeture du problème consiste à le modéliser.

Dans le cas des écoulements de fluide avec importante variation de la densité, Favre a proposé d'utiliser une moyenne pondérée par la masse:

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}}$$
(2.10)

Avec: $\phi = \tilde{\phi} + \phi'$, $\rho \tilde{\phi} = \rho \phi + \rho' \phi'$

La décomposition de Favre appliquée aux équations (2.2), (2.3), (2.4) et (2.6) donne un nouveau système d'équations. Semblable au système initial (avec la densité des espèces $\rho_i = \rho Y_i$).

Yi: est la fraction massique de l'espèce i.

2.3.1 Equation de continuité de l'espèce m:

2.3.2 Equation de conservation de la masse totale:

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla . (\overline{\rho} \, \widetilde{\vec{u}}) = \overline{\dot{\rho}_m^{\ s}}(2.12)$$

2.3.3 Equation de conservation de la quantité de mouvement:

$$\frac{\partial(\overline{\rho u})}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\overline{\rho u} \widetilde{\widetilde{u}} \widetilde{\widetilde{u}}\right) = \nabla \cdot \left(\overline{\overline{\sigma}} - \overline{\rho u}'' \overline{\widetilde{u}}''\right) - \nabla \widetilde{p} + \overline{F}^{s} + \overline{\rho} \widetilde{\widetilde{g}} + A_0 \nabla \left(2/3\rho k\right).....(2.13)$$

2.3.4 Equation de conservation de l'énergie interne:

Les équations pour les variables moyennes obtenues pour le régime turbulent sont différentes des équations pour les variables instantanées en régime laminaire à cause de l'apparition d'un nouveau terme lié à l'effet du champ fluctuant qui est le terme appelé «contrainte de Reynolds» ($-\overline{\rho \vec{u} \, " \vec{\phi} \, "}$), ce terme traduit l'effet de la turbulence sur le mouvement moyen.

2.4 Les sous modèles physiques:

Les termes qui apparaissent dans les équations moyennées présentent l'interaction du mouvement moyen et de l'agitation turbulente. Ce sont des termes supplémentaires qui posent un problème de fermeture du système d'équations. Le nombre d'inconnues devenant plus grand que le nombre d'équations, nous avons donc besoin de modèles de turbulence qui permettent d'estimer les contraintes de Reynolds afin de fermer le système d'équations à résoudre.

2.4.1 Modèle de Turbulence

Pour calculer les contraintes de Reynolds, deux possibilités sont envisageables. La première repose sur les corrélations doubles qui peuvent être calculées à partir des valeurs moyennes de l'écoulement en faisant appel au concept de viscosité turbulente. Cette première approche est chronologiquement la plus ancienne. La seconde approche consiste à décrire sous forme d'équation de transport des contraintes de Reynolds mais, dans ces nouvelles équations, interviennent des termes de corrélations qu'il faut à nouveau modéliser[19].

2.4.2 Le Modèle de Turbulence k-ɛ:

L'utilisation de ce modèle est très répandue dans les milieux industriels. L'approche consiste à représenter les propriétés de la turbulence à l'aide d'échelles de vitesse et de longueur caractéristiques des fluctuations. L'échelle de vitesse est obtenue par l'intermédiaire de l'énergie cinétique turbulente (k). L'échelle de longueur est, quant à elle, plus délicate à définir et l'on a recours à une nouvelle équation de transport portant sur le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente (ε). Ce taux de dissipation est relié, par l'intermédiaire de l'hypothèse de l'unicité de l'échelle des temps, à l'échelle de longueur l.

Quand ce modèle de turbulence est utilisé ($A_0 = 1$), deux équations de transport additionnelles sont résolues pour l'énergie cinétique k et son taux de dissipation ε .

Ce sont les équations k- ε standards avec quelques termes additionnels. Le terme source $(c_{\varepsilon_3} - \frac{2}{3}c_{\varepsilon_1})\nabla . \tilde{\vec{u}}$ dans l'équation (2.16) explique le changement de l'échelle des longueurs en présence d'une vitesse de dilatation. Le terme source $\overline{W^s}$ est dû à l'interaction avec la vapeur.

Les quantités sont constantes, leurs valeurs sont déterminées à partir des travaux expérimentaux et quelques considérations théoriques.

2.4.3 Le Modèle de Turbulence RNG k-ɛ:

Un nouveau modèle, fondé sur les méthodes utilisant le groupe de renormalisation est apparu. Appelé modèle *RNG k-* ε (*Yakhot et Orszag,* 1986) [23], il utilise une théorie différente des techniques statistiques classiques. La taille des échelles turbulentes est prise en compte pour déterminer la part de l'énergie qui sera transportée et celle qui sera dissipée. Les petites échelles de turbulence qui dissipent toute leur énergie sont modélisées alors que les grandes échelles de turbulence sont étudiées précisément. Cette modélisation aboutit à des équations très proches de celles du modèle k- ε standard. La principale différence vient des constantes qui ne sont plus déterminées expérimentalement mais calculées théoriquement [22].

$$\frac{\partial \overline{\rho}\varepsilon}{\partial t} + \nabla \left(\overline{\rho}\vec{u}\varepsilon\right) = -\left(\frac{2}{3}C_{\varepsilon_{2}} - C_{\varepsilon_{3}} - \frac{2}{3}C_{\mu}C_{\eta}\frac{k}{\varepsilon}\nabla\vec{u}\right)\overline{\rho}\varepsilon.\nabla\vec{u} + \nabla \left[\left(\frac{\mu_{eff}}{\mathrm{Pr}_{\varepsilon}}\right)\nabla\varepsilon\right] + \frac{\varepsilon}{k}\left[\left(C_{\varepsilon_{1}} - C_{\eta}\right)\overline{\sigma}:\nabla\vec{u} - C_{\varepsilon_{2}}\overline{\rho}\tilde{\varepsilon} + C_{s}\overline{W}^{s}\right]$$
(2.17)

Avec:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \dots (2.21)$$

Constant	c_{ε^1}	C _{ε2}	c_{ε^3}	C _s	C _{ps}	Pr _k	\Pr_{ε}	$\eta_{_0}$	β	C_{μ}
Standard k-ε	1.44	1.92	-1.0	1.5	0.16432	1.0	1.3	-	-	0.09
RNGk-E	1.42	1.68	-1.0	1.5	0.16432	0.71	0.719	4.38	0.012	0.0845

Tableau.2.1: Valeurs des constantes dans les modèles de turbulence k- ε , et RNG k- ε .

2.4.4 Modélisation du spray:

Dans les moteurs à combustion interne à injection directe, le carburant est introduit dans la chambre de combustion par l'injecteur. Le jet liquide issu de l'orifice de l'injecteur se pulvérise et doit ensuite être réduit-en de fines gouttelettes qui vont s'évaporer facilement et ainsi favoriser le mélange air/carburant et la combustion. Transformer le jet liquide en "spray" (nuage de gouttelettes) c'est l'atomiser. Cette transformation s'effectue en deux étapes. Le fractionnement primaire du jet produit des gouttes directement à partir de la colonne liquide. Le fractionnement secondaire divise ces gouttes issues du fractionnement primaire en gouttes encore plus petites. Les gouttelettes injectées dans le cylindre peuvent subir un ou plusieurs processus à savoir, l'atomisation, la collision et l'évaporation. Par conséquent, sont exigés des modèles qui décrivent ces processus (atomisation, collision, et évaporation).

2.4.4.1 Formulation Mathématique:

La formulation mathématique du jet est basée sur une technique discrète de Monte Carlo et se compose des fonctions de probabilité f des gouttelettes de distribution.

La fonction de probabilité f est fonction de dix variables indépendantes du temps:

- Les trois coordonnées spatiales x.
- Les trois composantes de vitesse *v*.
- Le rayon d'équilibre *r*.
- La température T_d .
- La déformation de la sphéricité y.
- Le taux temporel de changement d'une gouttelette $\dot{y} = \frac{dy}{dt}$.

La fonction de distribution des gouttelettes f est définie comme:

$$f(\vec{x}, \vec{v}, r, T_d, y, \dot{y}, t) \, d\vec{v} \, dr \, dT_d \, dy d\dot{y} \qquad (2.22)$$

L'évolution à travers le temps de f est obtenue par résolution d'une forme de l'équation du jet [22]:

Dans cette dernière équation, les quantités, F, R, T_d et y sont le taux temporel de changement individuel d'une gouttelette, de sa vitesse, de son rayon, de sa température, et de sa vitesse d'oscillation respectivement. Les termes f'_{coll} et f''_{bu} sont des termes sources dus aux collisions et au fractionnement de la gouttelette.

2.4.4.2 Modèles d'atomisation:

Au cours des années, plusieurs modèles d'atomisation primaire et secondaire ont été proposés. Dans les différentes versions du code CONVERGE il existe plusieurs modèles pour l'atomisation du jet. On cite:

Les modèles basés sur la croissance d'ondes de perturbation initiée en sortie d'injecteur (KH et RT) et ceux basés sur l'amplification de l'oscillation ou de la déformation d'une goutte (TAB), expliquées par les effets aérodynamiques. Même si ce modèle traite principalement le fractionnement secondaire des gouttes, il a été utilisé dans Converge pour l'atomisation primaire du jet. D'autre modèles comme KH-RT et LISA [19,24-28] ont été implémenté dans Converge. Ce modèle donne les conditions initiales d'un modèle d'atomisation prenant en compte les instabilités de Kelvin-Helmholtz (KH) et Rayleigh-Taylor (RT), figure (2.1). Le modèle LISA basé sur l'analyse de l'instabilité linéaire des nappes liquide libre, comme par exemple dans une ouverture de l'injecteur d'essence ou gazole vers l'extérieur.

Dans le cadre de notre étude, le modèle KH-RT est utilisé, à cause de grand nombre de Weber, de plus il offre la possibilité de simuler les deux processus de fractionnement indépendamment.

✤ Le modèle hybride KH-RT:

Le modèle KH-RT suggère que la perturbation du liquide est due à deux types d'instabilités: la première instabilité est de type Kelvin-Helmholtz (modèle Wave pour les grand nombre de Weber) et la seconde de type Rayleigh-Taylor. Ces deux instabilités sont mises en concurrence et celle qui donnera l'onde produisant la déstabilisation la plus rapide sera utilisée pour le fractionnement.



Figure.2.1: Schéma de principe du modèle KH-RT [28].

Le terme source de destruction f_{bu} prend la forme suivante:

2.4.4.3 Collision:

Dans le modèle standard de collision de la gouttelette [22] deux parties peuvent entrer en collision quand elles occupent la même cellule de calcul et la collision est basée sur une fonction de probabilité. Le modèle de la collision est un des modèles les plus faibles pour les sous modèles de spray [24].

Le terme source de collision f_{coll} est donné par la relation:

On distingue deux types de collisions:

 Pour donner une gouttelette simple. Dans ce cas-ci, la température et la vitesse de la nouvelle gouttelette sont calculées en utilisant un procédé faisant la moyenne de masse. La nouvelle taille de gouttelette peut être calculée à partir du volume de gouttelette. • Les deux gouttelettes peuvent entrer en collision, mais sans aucun transfert de masse et d'énergie entre les deux gouttelettes. Elles maintiennent leurs tailles et leurs températures, mais subissent des changements de vitesse.

Afin de décider quel type de collision, un paramètre d'impact de collision, b est comparé au paramètre critique d'impact, b_{cr} qui est donné par:

$$b_{cr} = \frac{1}{We} \left[\left(\frac{r_2}{r_1} \right)^3 - 2.4 \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^2 + 2.7 \left(\frac{r_2}{r_1} \right) \right] \dots (2.26)$$

Le nombre de Weber s'écrit de la manière suivante:

$$We = \frac{\rho_d |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| r_1}{\alpha_d (\overline{T}_d)} \dots$$
(2.27)

Avec

$$\overline{T}_{d} = \frac{r_{1}^{3}T_{d1} + r_{2}^{3}T_{d2}}{r_{1}^{3} + r_{2}^{3}} \dots (2.28)$$

Où ρ_d est la densité, α_d coefficient de tension superficielle de liquide.

Si $b < b_{cr}$, alors la collision existe. Ainsi, on peut obtenir une fonction de densité de probabilité de collision σ qui donne le nombre probable de gouttelettes résultant d'une collision entre la gouttelette 1 et 2.

$$\sigma = \frac{b_{crr}^{2}}{(r_{1}+r_{2})^{2}} \delta \left[r - (r_{1}^{3}+r_{2}^{3})^{\frac{1}{3}} \right] \delta \left[\vec{v} - \frac{r_{1}^{3}\vec{v}_{1}+r_{2}^{3}\vec{v}_{2}}{r_{1}^{3}+r_{2}^{3}} \right] \delta (T_{d} - \overline{T}_{d1}) \delta (y - y_{2}) \delta (\dot{y} - \dot{y}_{2})$$

$$+ \frac{2}{(r_{1}+r_{2})^{2}} \int_{b_{cr}}^{r_{1}+r_{2}} \delta (r - r_{1}) \delta (\vec{v} - \vec{v}_{1}) \delta (T_{d} - T_{d1}) \delta (y - y_{1}) \delta (\dot{y} - \dot{y}_{1})$$

$$+ \delta (r - r_{2}) \delta (\vec{v} - \vec{v}_{2}) \delta (T_{d} - T_{d1}) \delta (y - y_{2}) \delta (\dot{y} - \dot{y}_{2}) \left[b db \right]$$

$$(2.29)$$

Avec

$$\vec{\hat{v}}_{1} = \frac{r_{1}^{3}\vec{v}_{1} + r_{2}^{3}\vec{v}_{2} + r_{2}^{3}(\vec{v}_{1} - \vec{v}_{2})\frac{b - b_{cr}}{(r_{1} + r_{2} - b_{cr})}}{r_{1}^{3} + r_{2}^{3}} \dots (2.30)$$

$$\vec{\hat{v}}_{2} = \frac{r_{1}^{3}\vec{v}_{1} + r_{2}^{3}\vec{v}_{2} + r_{2}^{3}(\vec{v}_{2} - \vec{v}_{1})\frac{b - b_{cr}}{(r_{1} + r_{2} - b_{cr})}}{r_{1}^{3} + r_{2}^{3}} \dots (2.31)$$

2.4.4.4 Evaporation:

Comme on a pu le voir en introduction de la modélisation du jet, le combustible liquide injecté issu de l'orifice de l'injecteur doit ensuite être réduit-en de fines gouttelettes, qui vont s'évaporer facilement et ainsi favoriser la combustion. Le flux d'énergie sur la surface de la gouttelette avec la température de la gouttelette comme variable peut être écrit comme [19, 22]:

$$4\pi r^2 \dot{Q}_d = \rho_d \frac{4}{3}\pi r^3 C_{p,l} \dot{T}_d - \rho_d 4\pi r^2 RL(T_d)....(2.32)$$

 \dot{Q}_d : Le taux de conduction de la chaleur est donné par la corrélation de Ranz-Marshell

$$\dot{Q}_{d} = \frac{K_{air}(\hat{T})(T - T_{d})}{2r} Nu_{d} \dots (2.33)$$

Avec

$$\hat{T} = \frac{2}{3}T_d + \frac{1}{3}T$$
(2.34)

Le transfert convectif de la gouttelette est donné par le nombre de Nusselt:

$$Nu_{d} = \left(2 + 0.6 \operatorname{Re}_{d}^{1/2} \operatorname{Pr}_{d}^{1/3}\right) \frac{\ln(1 + B_{d})}{B_{d}}....(2.35)$$

Le nombre de Reynolds et le nombre de Prandtl sont calculés de la manière suivante:

$$\operatorname{Re}_{d} = \frac{2\rho |\vec{u} - \vec{u}'' - \vec{v}| r}{\mu_{air}(\hat{T})} \dots (2.36)$$

$$\mu_{air}(\hat{T}) = \frac{A_1 \hat{T}^{3/2}}{\hat{T} + A_2}.$$
(2.37)

 $A_1 = 1.457.10^{-5}$

 $A_2 = 110$

$$\Pr_{d} = \frac{\mu_{air}(\hat{T})Cp(\hat{T})}{K_{air}(\hat{T})}.$$
(2.38)

$$K_{air}(\hat{T}) = \frac{K_1 \hat{T}^{3/2}}{\hat{T} + K_2} \dots (2.39)$$

$$K_1 = 252$$
 , $K_2 = 200$

Et le nombre de transfert de Spalding est défini comme:

$$B_d = \frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*} \tag{2.40}$$

Le nombre de Spalding représente les gradients sur la surface de la gouttelette. Y_1 est la fraction de masse du carburant dans la phase gazeuse, Y_1^* la fraction de masse sur la surface. La chaleur latente *L* estdonnée par:

$$L(T_{d}) = E_{1}(T_{d}) + \frac{RT_{d}}{M_{1}} - E_{1}(T_{d}) - \frac{p_{v}(T_{d})}{\rho_{d}}.....$$
(2.41)

R: représente le taux du changement du rayon de la gouttelette et est défini par la corrélation de *Frossling*:

$$R = -\frac{(\rho D)_{air}(\hat{T})}{2\rho_d r} B_d Sh_d \dots (2.42)$$

$$Sh_{d} = \left(2 + 0.6 \operatorname{Re}_{d}^{1/2} Sc_{d}^{1/3}\right) \frac{\ln(1 + B_{d})}{B_{d}} \dots$$
(2.43)

Avec:

$$Sc_{d} = \frac{\mu_{air}(\hat{T})}{\rho D_{air}(\hat{T})}...(2.44)$$

2.4.5 Modèle de dégagement de chaleur:

Le dégagement de chaleur se produit généralement dans une zone très mince (les épaisseurs typiques des flammes sont de l'ordre du millimètre ou du dixième de millimètre), ce qui induit des gradients thermiques et massiques très élevés (le rapport des températures entre réactifs et produits de combustion est couramment de6 à 8) et de larges variations de la masse volumique sur des échelles très faibles.

Dans les écoulements réactifs, le dégagement de chaleur génère un bruit intense. On peut noter le claquement caractéristique des moteurs diesel provenant de l'auto inflammation du mélange carburant/air.

Un modèle de dégagement de chaleur décrit la vitesse de dégagement de chaleur à partir de la relation:

$$\frac{dQ_n}{dt} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} P \frac{dV}{dt} + \frac{1}{\gamma - 1} V \frac{dP}{dt} \dots$$
(2.45)

Avec

- Q_n : Le dégagement de chaleur.
- γ : Le rapport des chaleurs spécifiques $\gamma = \frac{C_p}{C_v}$ (ou rapport isentropique).
- *V* : Le volume de la chambre de combustion.
- *P* : Et la pression cylindre.

 γ : Rapport des chaleurs spécifiques, calculé par une corrélation relativement simple:

$$\gamma = 1.338 - 6.0 \times 10^{-5} T + 1.0 \times 10^{-8} T^2$$
(2.46)

2.4.6 Modèle de transfert thermique (Loi de paroi):

Une manière traditionnelle pour traiter le transfert de chaleur à travers la paroi est basée sur l'analogie de Reynolds. Une mise à jour a été implantée dans Converge, conforme étroitement à l'expression d'origine proposée par *Launder et Spalding*, est donnée dans la section suivante [19]:

$$Q_{w} = \frac{\rho v_{l} c_{p}}{\Pr_{l}} \frac{u^{*}}{y} \left(T - T_{w}\right)$$
(2.47)

Avec

$$u^{*} = \begin{cases} \frac{y^{*} \operatorname{Pr}_{l} * RPR}{1/k \ln y^{*} + B + 11.05(\operatorname{Pr}_{l} * RPR - 1)} & y^{*} > 11.2 \\ 1.0 & y^{*} < 11.2 \end{cases}$$

$$y^{*} = \frac{c_{\mu}^{1/4} K^{1/2} y}{V_{l}} \qquad (2.49)$$

Dans ces équations, v_l est la viscosité cinématique laminaire de l'air, Pr_l est le nombre Prandtl laminaire, K est la constante de Von Karman, RPR est le réciproque du nombre de Prandtl turbulent, T_w est la température de paroi, T est la température de gaz et k est l'énergie cinétique turbulente.

2.5 Les Modèles chimiques:

2.5.1 Modélisation de la combustion turbulente:

En turbulence classique, les équations pour les divers moments des variables dépendantes sont dérivées à partir des équations de conservation. On montre alors que ces équations ne peuvent être fermées à aucun niveau et que des hypothèses de fermeture, souvent empiriques, sont nécessaires. Ces hypothèses proposent de relier les moments d'ordre supérieur aux moments d'ordre inférieur par des relations universelles.

Les chercheurs se sont attachés alors à examiner la physique des phénomènes afin de pouvoir proposer des modèles de combustion turbulente.

2.5.1.1 Aperçu sur les Modèles de combustion turbulente:

Des modèles de combustion turbulente ont été proposés pour exprimer les taux de réaction moyens en fonction des variables connues, c'est-à-dire des valeurs moyennes elles-mêmes, et probablement aussi en fonction des caractéristiques de la turbulence, puisque celle-ci joue un rôle important pour les modèles basés sur la solution de l'équation de transport des fractions massiques des espèces, donc il ne peut pas prendre en compte les effets de la turbulence. Les termes sources qui apparaissent dans les équations de transport des espèces sont calculés d'après l'expression du taux d'Arrhenius pour les combustions non pré-mélangées et pré-mélangées. Les mécanismes des réactions chimiques seront prédéfinis.

Pour la modélisation des écoulements réactifs, Converge V1.3 propose divers modèles, parmi lesquels on distingue [19, 20]:

- ✤ Le modèle du temps caractéristique de la combustion (taux de progression CTC).
- Le modèle d'équilibre chimique (Chemical Equilibrium-CEQ).
- Modèle de chimie cinétique détaillée (Detailed Chemical Kinetics Model-SAGE).
- Modèle G-équation (Version Converge1.4.1).
- ♦ ECFM Extended Coherent Flame Model (Version Converge 2.2.0).
- ♦ ECFM3Z : Extended Coherent Flame Model 3 Zones (Version Converge 2.2.0).
- Modèle de flammelete RIF (La version Converge 2.2.0).[29]

Des quatre modèles citées ci-dessus, le premier (CTC) est le plus adapté par rapport aux autres modèles au contexte de la combustion du gazole et des biocarburants.

✤ Le modèle SAGE [20]:

Afin de comprendre les effets de la chimie détaillée dans les applications de combustion, le modèle SAGE (Senecal et al. 2003) [30] a été implémenté dans CONVERGE. Cette approche permet à l'utilisateur d'introduire un mécanisme de cinétique chimique dans la simulation avec un ensemble de fichiers d'entrée CHEMKIN qui sont devenus la norme pour les mécanismes chimiques.

Comme le montre Turns (1996) [31], et peut être écrit dans un mécanisme de réaction chimique en plusieurs étapes sous la forme de:

$$\sum_{m=1}^{M} \nu'_{m,r} x_m \Leftrightarrow \sum_{m=1}^{M} \nu''_{m,r} x_m \text{ for } r = 1, 2, \dots, R.$$
(2.50)

Avec $v'_{m,r}$ et $v'_{m,r}$ sont les coefficients stœchiométriques des réactifs et des produits, pour les espèces *m* et réaction *r*, et x_m représente le symbole chimique pour les espèces m.Le taux de production des espèces *m* est donnée par:

$$\dot{\omega}_m = \sum_{r=1}^R v_{m,r} q_r \text{for} m = 1, 2, \dots, M.$$
 (2.51)

Avec

$$v_{m,r} = v_{m,r}^{''} - v_{m,r}^{'}$$
 (2.52)

Et le variable du taux de progrès q_r est:

 $[X_m]$ Est la concentration molaire de l'espèce m, et K_{fr} , K_{rr} sont l'avant et l'arrière coefficient de vitesse de réaction *r*. Dans SAGE, le coefficient de taux à terme est exprimée par la forme:

$$K_{fr} = A_r T^{b_r} e^{(-E_r/R_u T)}.$$
(2.54)

Avec A_r c'est le facteur pré-exponentiel, b_r l'exposant de température , E_r l'énergie d'activation, R_u est la constante de gaz universelle. En outre, le coefficient de vitesse inverse peut être soit spécifié d'une manière analogue à celle de l'équation (2.53), ou calculée à partir du coefficient d'équilibre K_{cr} .

 $K_{rr} = K_{fr}/K_{cr}.$

2.5.2 Modèle d'Allumage:

La cinétique de l'allumage est un processus à basse température de réactions en chaîne. Nous avons choisi un modèle global, le modèle Shell, puisque ce modèle représente bien les étapes de base du phénomène d'allumage. Le modèle d'allumage Shell a été développé par *Halstead* [32]. C'est un modèle thermocinétique basé sur un mécanisme réduit pour l'oxydation d'un hydrocarbure. Il a été testé qualitativement en confrontation à des résultats expérimentaux pour des flammes froides et un allumage à deux étapes obtenu dans une bombe fermée. Ce modèle est basé sur un schéma général à huit étapes.

Cependant il est à noter qu'il existe un facteur influent sur la valeur de l'énergie d'activation de l'inflammation c'est l'indice d'octane. Dans la littérature on trouve plusieurs suggestions estimant l'influence de ce dernier. *Heywood* [33] par exemple suggère la relation suivante:

$$E_A = \frac{618840}{CN + 25} \dots (2.56)$$

2.5.3 Modèle de formations des polluants:

2.5.3.1 Le modèle de formation de NOx:

Les oxydes d'azote (typiquement rassemblés sous le sigle NOx, qui représentent l'ensemble des molécules NO, NO2 et N2O, sont produits lors de la combustion dans le moteur. Ces molécules ont des origines diverses :

- le NO précoce, qui est formé à l'aide de radicaux hydrocarbures,
- et le *NO* thermique, qui représente le mécanisme de formation de *NO* le plus important dans les moteurs.

Le mécanisme de formation du *NO* a été étudié par de nombreux chercheurs. *Zelzdovitch et al* [19, 34, 35] ont cependant montré le rôle particulier des réactions suivantes dans la formation de *NO* thermique:

$$N + NO \qquad \underbrace{\overset{K_1}{\longrightarrow} 2} + O.....(2.57a)$$

$$O + NO \qquad \underbrace{\overset{K_2}{\longrightarrow} 2} + N....(2.57b)$$

$$N + OH \qquad \underbrace{\overset{K_3}{\longrightarrow} H....(2.57c)}$$

Les valeurs des constantes k_1 , k_2 et k_3 sont données par les relations:

$k_{1f} = 7.6 * 10^{13} \exp\left[-38000/T\right]$	(2.58a1)
$k_{1b} = 1.6 * 10^{13}$	
$k_{2f} = 6.4 * 10^9 T * \exp[-3150/T]$	(2.58b1)
$k_{2b} = 1.5 * 10^9 T * \exp[-19500/T]$	(2.58b2)
$k_{3f} = 4.1 \times 10^{13}$	(2.58c1)
$k_{3b} = 2.0 * 10^{14} * \exp[-23650/T]$	(2.58c2)

En considérant que les propriétés thermochimiques des gaz et que la chaleur dégagée par les réactions chimiques n'est pas modifiée par la formation des oxydes d'azote en raison de leur faible concentration, le champ de température dans la chambre de combustion est supposé indépendant de la formation du *NO*. En considérant, par ailleurs, que les radicaux participant aux réactions de formation du *NO* par ce mécanisme sont à l'état d'équilibre partiel par rapport aux espèces majoritaires telles que *N2* et *O2*, la concentration en *NO* est calculée de manière découplée par rapport au phénomène de combustion, c'est à dire par une procédure de post-traitement, par la relation (2.59), établie à partir des réactions réversibles du mécanisme de *Zeldovich*:

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{2R\left\{1 - \left([NO]/[NO]_e\right)^2\right\}}{1 + \left([NO]/[NO]_e\right)R_1/(R_2 + R_3)} \dots (2.59)$$

Où les notations suivantes ont été introduites, en désignant parles concentrations à l'équilibre:

$$R_{1} = K_{1}^{f} [O]_{e} [N_{2}]_{e} = K_{1}^{r} [NO]_{e} [N]_{e}(2.60a)$$

$$R_{2} = K_{2}^{f} [N]_{e} [O_{2}]_{e} = K_{2}^{r} [NO]_{e} [O]_{e}(2.60b)$$

$$R_{2} = K_{2}^{f} [NO] [H] = K_{2}^{r} [OH] [N]$$

$$(2.60c)$$

$$R_3 = R_3 [100]_e [11]_e = R_3 [011]_e [10]_e(2.000)$$

La concentration de *NO* dans l'équation (2.59) peut être convertie en fraction massique comme:

$$\frac{dX_{NO}}{dt} = \frac{2(M_{NO}/\rho_{C.V.})R_1\{1-([NO]/[NO]_e)^2\}}{1+([NO]/[NO]_e)R_1/(R_1+R_3)}$$
....(2.61)

Où X_{NO} est la fraction de masse de NO, M_{NO} est la masse moléculaire de NO, et $\rho_{C.V.}$ est la masse du volume de contrôle.

En conséquence, la fraction de masse de *NO* de chaque zone ne peut pas être calculée en sollicitant le mécanisme de *Zeldovich* étendu simplement, équation (2.61). L'effet d'entraînement de l'air devrait être considéré. La dérivée de la fraction de masse du *NO* dans une zone par apport au temps est:

D'après le principe de conservation de la quantité de mouvement du début et fin d'injection, on obtient l'égalité suivante:

$$m_f u_i = \left(m_f + m_a\right) \frac{dS}{dt} \dots (2.63)$$

 m_f : Masse du carburant dans la zone considérée

 m_a : Masse d'air dans cette zone.

S: Pénétration du jet.

 u_i : Vitesse d'injection du carburant.

En réarrangeant l'équation (2.63) on obtient la relation reliant la masse de l'air d'entraînement à celle du carburant comme suit:

$$m_a = m_f \left(u_i \ \frac{dt}{dS} - 1 \right) \dots (2.64)$$

Par dérivation de l'équation (2.64) on aboutit à la relation du taux d'entraînement de l'air (débit d'air).

$$\dot{m}_{a} = -\frac{m_{f} \cdot u_{i} \cdot d^{2}S}{(dS/dt)^{2} \cdot dt^{2}} \dots$$
(2.65)

La masse totale d'une zone change seulement par l'entraînement de l'air (\dot{m}_a) , donc:

Le taux de l'entraînement de l'air \dot{m}_a donné dans l'équation (2.66) est le même que le dernier terme de l'équation (2.65) tel que:

Ce qui implique que l'équation (2.62) devient:

$$\frac{DX_{NO}}{Dt} = \frac{dX_{NO}}{dt} - \frac{\dot{m}_a}{m_{tot}} X_{NO} \dots$$
(2.67)

Et en substituant l'équation (2.61) dans l'équation (2.67), la dérivée de la fraction de massique de *NO* par apport au temps dans le système ouvert est obtenue:

2.5.3.2 Modèle de formation des suies [19]:

Le mode de combustion par diffusion utilisé dans les moteurs Diesel est naturellement générateur de suies. Si le mélange carburant/air n'étant pas homogène, il existe des zones plus riches en carburant. Ces zones sont plus favorables à la formation des suies. En revanche, comme nous l'avons rappelé dans le paragraphe précédent, la formation des *NOx*est favorisée par une élévation de la température dans les zones où c'est l'excès d'air qui est plus important. Il en résulte donc un compromis *NOx*particules qui sont illustrées par le diagramme de *Pischinger* [36], figure (2.2). Ce diagramme décrit les zones paramétriques de formation des *NOx*et des particules de suies en termes de température et de richesse locale.



Figure.2.2: Diagramme Φ-T de Pischinger [35].

La concentration des suies à l'échappement est gouvernée par la quantité des suies formées et celles oxydées, comme le montre la formule suivante:

Les indices s, sf, so, dénotent les suies émises, formées, et oxydées respectivement. La détermination des taux de formation des deux derniers types des suies a été l'objet de

plusieurs modélisations. Le modèle de *Hiroyasu* [37, 38] est utilisé dans plusieurs modèles multizones, il exprime les deux taux précités sous la forme:

$$\frac{dm_{sf}}{dt} = A_f m_{fg} P^{0.5} \exp\left(\frac{-E_{sf}}{\overline{R}T}\right).$$

$$\frac{dm_{so}}{dt} = A_o m_s \frac{P_{ox}}{p} p^{1.8} \exp\left(\frac{-E_{so}}{\overline{R}T}\right).$$
(2.70)
(2.71)

 $E_{sf} = 1.25 \times 10^4 \text{ Kcal} / \text{Kmol}$, $E_{so} = 1.40 \times 10^4 \text{ Kcal} / \text{Kmol}$, sont des énergies d'activation.

Avec: A_f et A_0 des constantes déterminées par l'expérience, m_{fg} et m_s représentent respectivement la masse du carburant vaporisé et les suies émises à l'échappement.

2.6 Conclusion:

La combustion turbulente est un domaine très vaste, d'une grande complexité à cause des couplages des différents phénomènes et de la forme non-linéaire des équations régissantes.

La turbulence est un problème cinétique, où il faudrait relever la fermeture par l'un des modèles de la turbulence (*RNG k-\varepsilon,...*). La combustion est aujourd'hui un des principaux moyens de conversion de l'énergie. Il faut donc choisir un modèle pour représenter le phénomène.

Dans ce chapitre on a exposé les différents modèles physiques et chimiques proposés dans la littérature pour la résolution numérique des équations de conservation. Afin de simplifié le problème on a commencé par les équations l'aérothermochimie turbulente, ensuite l'approche de résolution RANS, la modélisation des termes du à la combustion et les émissions polluantes.

Chapitre 3 Le code de calcul CFD CONVERGE

3.1 Introduction:

Les équations décrites au deuxième chapitre sont des équations différentielles aux dérivées partielles non linéaires, elliptiques et couplées. En raison de leur complexité, ces équations sont résolues à l'aide d'une méthode numérique. Plusieurs méthodes numériques sont disponibles dans la littérature. On peut distinguer les méthodes suivantes:

- Méthodes des différences finies (MDF).
- Méthodes des éléments finis (MEF).
- Méthodes des volumes finis (MVF).

La méthode des volumes finis consiste à intégrer les équations aux dérivées partielles sur des volumes entourant chaque point du maillage. Cette méthode, même si elle ne fournit qu'une précision du premier ordre, possède des qualités qui en font l'une des plus adaptées à l'étude des écoulements turbulents. En effet, celle-ci est très robuste et permet de traiter des équations comportant des termes sources complexes et non-linéaires. De plus, elle a l'avantage de satisfaire la conservation de la masse sur chaque volume de contrôle. Enfin, elle peut être utilisée avec des maillages relativement grossiers, ce qui permet la mise en œuvre de code pour un coût raisonnable.

La simulation numérique des fluides ou CFD (Computational Fluid Dynamics) est un outil puissant qui permet de réduire le nombre d'essais nécessaires à l'élaboration d'un nouveau procédé. Ceci est particulièrement intéressant pour les moteurs à combustion interne, pour lesquels les essais au banc coûtent chers. La CFD est simplement le calcul numérique appliqué à la mécanique des fluides. Cela consiste à résoudre dans une géométrie donnée les équations fondamentales de la mécanique des fluides, que l'on peut éventuellement coupler aux équations de transfert thermique ou de réaction chimique.

En effet, son faible coût par rapport à celui des mesures expérimentales, permet de multiplier les essais numériques. Cela constitue généralement une première étape dans l'élaboration d'un nouveau procédé de fonctionnement des moteurs automobiles ou l'utilisation de nouveaux carburants qui pose de nombreux problèmes physiques nécessitant une modélisation.

3.2 L'outil CFD:

CFD est l'acronyme anglais de «Computational Fluid Dynamics». Il désigne conventionnellement le large domaine des outils numériques, résolvant les équations décrivant le mouvement d'un fluide (équations de Navier-Stokes, de continuité ainsi que de toutes les autres équations de conservation).

La CFD pour "Computational Fluid Dynamics" est l'application particulière de l'outil numérique à l'étude de la dynamique des fluides, qu'ils soient liquides ou gazeux, ou bien même les deux conjugués. Le champ d'investigation est ainsi au moins aussi vaste que celui de la mécanique des fluides elle-même. La manœuvre consiste à trouver une solution discrète approchée aux équations de Navier-Stokes, avec éventuellement et même très certainement des hypothèses simplificatrices. En effet, l'outil mathématique n'est pas aujourd'hui en mesure de nous donner une solution analytique excepté des cas spéciaux et simplistes, les choses auraient été bien trop simples Autant la précision des données de mesures issues de l'expérience dépend de la qualité et de la technicité des outils utilisés, autant la précision d'une solution numérique dépend fortement de la qualité de la discrétisation, autrement dit de la qualité des schémas et méthodologies numériques utilisés dans le sens mathématique du terme [39].

La figure 3.1, donne le cadre conceptuel dans lequel s'inscrit la simulation numérique:



Figure.3.1: Représentation synthétique des liens entre la Réalité et les résultats de simulation [39].
La CFD (Computational Fluid Dynamics) est simplement le calcul numérique appliqué à la mécanique des fluides. Cela consiste à résoudre dans une géométrie donnée les équations fondamentales de la mécanique des fluides, que l'on peut éventuellement coupler aux équations de transfert thermique ou de réaction chimique. Historiquement, la CFD a commencé à se développer en génie mécanique, pour étudier les écoulements autour d'un objet afin de mieux le profiler (ailes d'avions, automobiles) [40]. Dans la simulation des moteurs diesel, les problèmes sont, en général, beaucoup plus complexes de part, en particulier, le caractère multiphasique des écoulements, les réactions chimiques et le comportement turbulent des fluides.

Le fonctionnement des moteurs automobiles actuels pose de nombreux problèmes physiques nécessitant une modélisation. Parmi ceux-ci, on peut citer:

- ➢ L'injection directe du carburant dans la chambre de combustion.
- L'utilisation des gaz résiduels dans les nouveaux modes de combustion. Ces gaz conduisent à une stratification de composition et de température qu'il faut prendre en compte.
- Les émissions de polluants. Bien que les moteurs soient de plus en plus propres, les normes ne cessent de devenir de plus en plus strictes, ce qui constitue un vrai challenge pour les constructeurs.
- L'utilisation de nouveaux carburants (gaz naturel et GPL, hydrogène). En effet, ces derniers ont des caractéristiques différentes des carburants classiques, ce qui influence considérablement la formation du mélange et la combustion par la suite.

Nom de code	Origine	Туре	Méthode
FIRE	AVI, Allemagne	Code commercial	Volume finis
FLOW-3D	Harwell, Royaume-Uni	Code commercial	Volume finis
FLUENT	Fluent INC, Etats-Unis	Code commercial	Volume finis
CONVERGE	KIVA, Etats-Unis	Code commercial	Volume finis

Tableau.3.1: Le code CFD [41].

3.3 Description du code CFD converge:

Le laboratoire CONVERGENT science basé à Middleton, Wisconsin a développé un code de simulation 3D appelé «CONVERGE». En effet, ce code est bien connu par le monde industriel et universitaire aux USA. Il est structuré en modules permettant une prise en main rapide.

Bien qu'il soit spécifiquement conçu pour exécuter des calculs sur des moteurs à combustion interne, la modularité du code permet des modifications faciles pour résoudre une variété de problèmes hydrodynamiques impliquant des réactions chimiques.

Les équations de conservation de masse, d'espèces chimiques, de quantité de mouvement, d'énergie interne spécifique, d'énergie cinétique turbulente et du taux de dissipation sont résolues par l'approche des volumes finis. Pour plus d'informations sur le code converge, le lecteur peut consulter les références originales de *Richards, K. J. et al* [19].

3.3.1 Structure standard de Converge V1.3:

Converge V1.3 simule des écoulements très variés avec des configurations plus ou moins complexes. Il est composé, comme tout code de type CFD, de trois modules qui sont: le préprocesseur « pré-processing », le solveur "Converge" et le post-processeur "post-processing".

3.3.1.1 Génération de maillage:

Converge UI est un logiciel de construction de modèle physique et de maillage. Il permet de créer la géométrie ou de l'importer à partir d'un autre logiciel de CAO (Solid Works, Solid Concept, etc...) sous format de fichier "STL". Il dispose d'une boîte à outils complète pour réaliser ou importer une géométrie, effectuer des modifications géométriques, générer des maillages plus ou moins complexes conformément à la géométrie, de contrôler leur qualité ainsi que définir les conditions aux limites du domaine de calcul. Ensuite, converge UI importe un fichier sous format '.Dat' noté (surface.dat). Ce dernier s'exporté vers le code de calcul afin d'effectuer les simulations numériques.

3.3.1.2 pre-processing:

L'étape de prétraitement consiste à préparer une surface triangulée qui est fait dans le préprocesseur GUI. Cette étape commence généralement par la lecture d'un fichier STL qui était sortie d'un logiciel de CAO, suivie par des trous de fixation, orienter les triangles, fixant connectivité inadéquate, et la réparation d'autres problèmes avec la surface. Selon la qualité du fichier STL, ce qui peut soit prendre quelques minutes ou quelques heures.

Une fois que la surface est propre, les limites sont ensuite affectés numéros d'identification qui correspondent à des entrées dans le fichier de spécification de limite. Après l'attribution de numéros aux limites, le fichier est écrit et sera une entrée vers l'exécutable converge. Prétraitement implique également la création les autres fichiers d'entrée nécessaires pour l'exécution du code. Ces fichiers d'entrée sont tous en format texte ASCII pour modifier facilement par l'utilisateur. La plupart de ce manuel traite de la préparation des fichiers d'entrée pour exécuter une simulation.

3.3.1.3 L'exécution du code:

Converge peut être exécuté en série (un processeur) ou en parallèle (plus d'un processeur). Procédé d'exécution dépend du fait que la tâche est en série ou en parallèle.

3.3.1.4 Post-processing:

Ce module produit les fichiers des résultats. Le Post-processeur permet de visualiser les différents résultats des champs dynamiques (Champs de vitesse, lignes de courant, champs de turbulence, contours de la surface, etc...) et scalaires (contours de température, contours des concentrations d'espèces chimiques, etc...). De même, ce module permet d'exporter les résultats sous différentes formes (GMV, Tecplot...), pour représenter des graphes par d'autres logiciels.



Figure.3.2: La structure standard de Converge [19].

3.3.2 Les techniques de maillage [19, 20]:

Les techniques de génération de maillages sont employées de manière intensive dans de nombreux domaines. Des nombreuses études ont montré que les techniques utilisant les maillages offrent de bonnes performances ainsi que des fonctionnalités intéressantes.

ConvergeV1.3 [19], et ConvergeV1.4 [20] offrent la possibilité de réaliser un maillage structuré, d'ajouter des soupapes verticales, piston sans ou avec bowl ω et d'autres formes. De plus, différentes techniques de raffinement du maillage ont été implémentées dans le code Converge parmi lesquelles: Le raffinement de base.

3.3.2.1 Raffinement du maillage de base:

Dans la simulation numérique, le temps de calcul et la qualité de la solution dépendent très fortement du maillage. C'est pourquoi il faut toujours rechercher le maillage optimal.

C'est une opération très importante et elle consiste à diviser le maillage de base dans tout le domaine de calcul en une série de sous mailles. Donc, il est très important d'évaluer la dépendance des résultats sur le maillage utilisé en répétant le même calcul sur des maillages différents, figure (3.3) et en comparant les résultats en termes de temps de calcul et de précision.



Figure.3.3: (a) Maillage initial, (b) Maillage raffiné

3.3.3 Les démarches numériques [19]:

Pour résoudre les équations aux dérivées partielles non-linéaires et fortement couplées qui régissent l'écoulement du fluide dans les MCI, nous adoptons la méthode RANS, avec l'algorithme PISO pour le traitement du couplage pression-vitesse dans les équations moyennées de Naviers-Stockes.

Le couplage Pression-Vitesse est traité en résolvant les équations de la quantité du mouvement et une équation pour la pression dérivée d'une combinaison de l'équation de continuité et celle de la quantité du mouvement. ConvergeV1.3 utilise l'algorithme de couplage PISO qui sera brièvement décrit ci-dessus [19].

L'algorithme PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators) a été mis au point par Issa en 1984 cité dans la référence [42]. C'est une extension de l'algorithme SIMPLE ayant une étape de correction de plus. Il est basé sur une relation de degré élevé entre la correction de la vitesse et la correction de la pression. La méthode de résolution est la même que celle utilisée par l'algorithme SIMPLE qui a été mise en place et développée par *Patankar et Spalding* en 1972 [43]. Afin d'éviter les oscillations du champ de pression dans l'équation de quantité du mouvement, la technique d'interpolation de *Rhie et Chow* [44] est utilisée.

3.4 Les fichiers de sortie et d'entrée dans converge [45]:

Les fichiers d'entrée (*.in) contiennent des données géométriques, de conditions limites, et tandis que les entrées numériques des fichiers de données (*.dat) contiennent des propriétés thermodynamiques et des données de réaction chimique. Au début de la simulation, le (*.in) et (*.dat) sont lus par converge. Pendant la simulation, output, post, et les fichiers de restart sont présents. Un schéma du fichier interaction avec converge est montré dans la figure 3.6 Ci-dessous.



Figure .3.4: Schéma de fichiers d'entrée, de données et de sortie (Schematic of input, data, and output files) [45].

3.4.1 Descriptions des fichiers d'entrée:

Converge est conçu pour être exécuté à partir de la ligne de commande. Toutes les entrées sont alimentées à l'aide du code par une série de fichiers d'entrée qui sont toutes au format texte ASCII lisible par l'utilisateur. Les fichiers d'entrée peuvent être créés ou modifiés par ne importe quel éditeur de texte simple.

Il existe deux types différents de fichiers d'entrée nécessaires qui se différencient par leur suffixe: * .in et * .dat.

Tous les fichiers d'entrée doivent résider dans le répertoire à partir duquel Converge est exécuté. Si tous les fichiers nécessaires ne sont pas trouvés, le code sera annulé. Un résumé des fichiers d'entrée peut être trouvé dans le tableau 3.2 ci-dessous. Notez que seule l'entrée des fichiers inputs.in, boundary.in, surface.dat, initialize.in, mech.dat et therm.dat sont nécessaires pour une simulation, les fichiers d'entrée restants ne sont requis que quand un modèle ou caractéristique particulière est activé.

Nom du fichier	Descriptions
	Commande numérique et simulation, par exemple, les critères de
	convergence, et les facteurs détendre, contrôler le pas de temps,
inputs.in	après avoir tapé la fréquence, etc. Ce fichier contient les médias
	pour allumer et éteindre sous-modèles comme spray, la
	combustion, la turbulence
Conditions aux limites, conformément aux limites identif	
boundary.in	utilisés dans surface.dat
initialize.in	Spécification des conditions initiales.
embedded.in	Informations sur où, quand, et comment l'intégration est à
	ajouter à la grille.
combust.in	Modèle de combustion et des émissions
	Sélection de quel modèle de turbulence à exécuter ainsi que les
turbulence.in	paramètres du modèle et les modèles muraux.
surface.dat	Spécification de surface triangulée et l'affectation limite.

events.in	Informations sur la connexion et la déconnexion régions.
engine.in	Entrées spécifiques à une simulation de moteur.
source.in	Entrées pour les sources.(pour déterminer le temps d'allumage).
amr.in	Entrées de contrôle de raffinement adaptatif de maillage.
	Le fichier post.in contient les noms des variables qui seront
post.in	écrites sur les fichiers de poste. Les fichiers de poste peuvent
1	ensuite être convertis en GMV, ou le format de la colonne du
	texte.
.1 1.	NASA données formatées pour le calcul des propriétés
therm.dat	thermodynamiques de l'espèce dans la simulation.
	Eléments, espèces, et de réactions données pour la simulation.
mech.dat	
	Propriétés pour le gaz qui ne peut être calculé qu'à partir des
gas.dat	données dans therm.dat.

Tableau.3.2: Les fichiers d'entrées [46].

3.4.2 Descriptions des fichiers de sortie:

3.4.2.1 fichiers Echo (*.echo):

Les fichiers (*.echo) sont placés dans le répertoire à partir duquel converge est exécuté. Autorisation d'écriture pour le répertoire doivent être fixé de telle sorte que ces fichiers peuvent être crées. Lorsque converge est ré exécuté dans le même répertoire, les fichiers (*.echo) seront écrasés sans demander à l'utilisateur.

3.4.2.2 fichiers out (*.out):

Les fichiers (* .out) sont placés dans le même répertoire que l'entrée et les fichiers d'écho à partir de l'exécution de converge. Il est important de noter que lorsque converge est ré exécuté, les fichiers (* .out) seront écrasés les fichiers existants (* .out) dans le même

répertoire sans demander à l'utilisateur. Un résumé des différents types des fichiers de sortie est indiqué au tableau.3.3 ci-dessous.

Nom du fichier	Descriptions
thermo.out	Données thermodynamiques et de dégagement de chaleur.
emissions.out	Information sur les émissions pour la simulation.
spray.out	L'évolution du jet.
species.out	Somme de la masse des espèces dans le domaine.
temperature.out	Informations sur fraction de la masse des températures supérieures fixes.
turbulence.out	La moyenne et l'écart type de la quantité de turbulence dans le domaine.
mass_avg_flow.out	Débit massique et débit massique pondérés données thermiques moyennes dans les limites des entrées et de sorties.
area_avg_flow.out	Débit massique et surface pondérés données thermiques moyennes dans les limites des entrées et de sortie.

Tableau.3.3: Les fichiers de sortie [46].

3.5 Présentation du banc d'essais moteur:

3.5.1 Les spécifications du moteur:

On a choisi le moteur «DS 18 » qui est un moteur expérimental ce qui nous permet de valider les résultats de notre étude numérique.



Figure.3.5: Vue 3D du moteur.

Les spécifications de fonctionnement du moteur utilisé sont présentées ci-dessous dans le tableau (3.4).

Géométrie de base		
Alésage de moteur	0.1016 mètres	
Course du moteur	0.1 mètres	
longueur de la bielle	0.18 mètre	
Squish	0.0076 mètres	
Nombre des valves	4V	
La vitesse de rotation	3000 tr/min	

Tableau.3.4: Description des caractéristiques géométriques du moteur étudié [46].

3.5.2 Spécifications d'injections:

Système d'injection du carburant		
Carburant	CH4	
Mode d'injection	Injection par carburation	
Température du fuel	353 K	
Début de carburation	-179 deg	
Durée de carburation	100 deg	

Tableau.3.5: Description des caractéristiques du système d'injectiondu moteur étudié [46].

3.5.3 Distribution des valves:

Une valve est un organe mécanique de la distribution des moteurs thermiques à quatre temps permettant l'admission des gaz frais et l'évacuation des gaz brûlés. De manière générale, une soupape d'admission sépare le conduit d'admission de la chambre de combustion et une soupape d'échappement sépare celle-ci du conduit d'échappement.



Figure.3.6: Vue 3D des valves.

	soupape d'Admission	soupape d'échappement
Ouverture	-365 [Deg]	157 [Deg]
Fermeture	-61 [Deg]	367 [Deg]

Tableau.3.6: Les soupapes d'admissions et d'échappements.

3.5.4 La bougie:

La bougie d'allumage est un dispositif électrique, présent sur les moteurs à allumage commandé, qui provoque l'inflammation du mélange gazeux dans la chambre de combustion. Pour cela, elle doit pouvoir générer des milliers d'arcs électriques par minute tout en résistant à la chaleur et à la pression engendrée par les explosions à l'intérieur du cylindre.

Le tableau (3.7) représente le système d'allumage du moteur étudié.



Figure.3.7: Vue 3D de la bougie d'étincelle.

Système d'allumage		
Mode d'allumage	allumage par <i>étincelle</i>	
Angle d'étincelle	-18 degrés	
La durée d'étincelle	10 degrés	
L'énergie d'étincelle	20 mJ	

Tableau.3.7: Spécifications Système d'allumage.

3.6 Préparation des calcules par converge V 1.3:

La simulation numérique par le code CONVERGE V 1.3 nécessite que toutes les variables soient initialisées avant le démarrage du calcul.

- > Les conditions d'affichage dans le fichier input.in.
- > Spécifications de moteur (diamètre, course, Squish, vitesse,...).
- Les conditions aux limites (température).
- Les conditions initiales (pression, température, fraction massique de gaz).
- Spécification de carburant (type, quantité, temps d'injection, durée d'injection...).

Donc on doit définir sur le fichier input.in tous les paramètres nécessaires. Le fichier spray.in, qui définit le carburant et système d'injection, surface.dat, le fichier du maillage, et ensuite l'exécution du programme (voir la structure standard de converge). Dans cette dernière étape l'ensemble des équations sont discrétisées et résolues. La dernière étape c'est le post-processeur qui permet de visualiser les différents résultats (champs de vitesse, lignes de courant, contours de la surface...).

Finalement, le but de cette partie est de donner un aperçu sur la génération des géométries 3D, et de mettre en évidence les paramètres nécessaires pour de bons résultats; par la mise en application du code de calcul converge V1.3.

Chapitre 4 Résultats des simulations numériques

4.1 Introduction:

L'objectif des méthodes numériques est de fournir une solution approche de comportement réel des phénomènes physiques. La physique possède des caractères très dimensionnels, temporelles et non linéaire c'est à dire très complexe. Le rôle de modélisateur est de simplifié suffisamment le problème tout en conservant l'originalité du phénomène physique étudié.



« Boucle de modélisation »

 ΔE : représente l'erreur quand on passe de l'état à l'autre.

Donc les écoulements des fluides, que ce soit on régime laminaire ou turbulent, sont décrits par le système d'équation aux dérivée partielle (E.D.P). Ainsi, tous les phénomènes physiques sont régis par ce système formé par les équations de continuité, de quantité de mouvement et d'énergie qu'il convient de résoudre pour les caractéristiques du champ d'écoulement et du champ thermique.

Les résultats de n'importe quelle simulation de la combustion dans un moteur à combustion interne seront d'autant précis que si les modèles utilisés peuvent effectivement décrire les différents phénomènes qui auront lieu dans le processus de combustion.

Dans le présent chapitre, on expose une série des résultats issus de la simulation numérique de la combustion dans un moteur au gaz naturel, effectuée à l'aide du code de calcul converge V1.3.

Pour valider les résultats numériques on se réfère au calage de la courbe de pression cylindre, tout en considèrent le moteur à moyenne charge. Enfin, on exposera les résultats numériques accompagnés des commentaires et des explications. Les résultats seront comparés avec les données expérimentales.

4.2 Présentation de l'expérience:

Pour les raisons de validation, nous avons exploité la courbe expérimentale de la pression cylindre mesurée. Les conditions initiales de l'expérimental sont prises en compte dans les

calculs numériques. En utilisant le code converge V1.3. La figure (4.1) présente la pression cylindre mesurée dans le moteur à gaz DS18 [46].



Figure.4.1:Evolution dela pression expérimental.

4.2.1 Les conditions initiales:

Quant aux conditions initiales nous avons introduit la pression «pres_init», la température de chambre «temp_init», l'énergie cinétique «tke_init», et le taux de dissipation «eps_init». Les données sont montrées dans le tableau (4.1):

pres_init [MPa]	1.31544
temp_init [K]	800.0
tke_init $[m^2/s^2]$	62.02710
eps_init $[m^2/s^3]$	17183.40

Tableau.4.1:Les conditions initiales.

4.2.2 Les conditions aux limites:

Les conditions aux limites sont données par les températures de culasse (T_{cu}) , du cylindre (T_{cy}) et du fond de piston (T_P) . Les données sont montrées dans le tableau (4.2):

La température de la culasse <i>T_{cu}</i> [K]	450
La température du cylindre T_{cy} [K]	450
La température du piston $T_P[K]$	450



Figure.4.2: Configuration adoptée pour imposer les conditions aux limites a l'entrée des collecteurs d'admissions et a la sortie des collecteurs d'échappements.

4.3Domaine du calcul:

La génération du maillage est une phase très importante dans une analyse CFD, vu son influence sur la solution calculée, en terme de précision et de temps de calcul.

La figure (4.3) contient un maillage structuré créé par le préprocesseur de converge, il contient environ 28608 cellules a 120°V pour le moteur sous trois plans de coupe particuliers avec une vue perspective.



Figure.4.3: Maillage du domaine de calcul.

4.4 Chois des modèles de simulation:

Dans ce travail, nous nous sommes basés sur les modèles présentés dans le tableau (4.3) afin de simuler la combustion au sein de la chambre de combustion d'un moteur à gaz DS18[46].

Processus	Modèle
Combustion (chimie détaillé)	SAGE(53 espaces et 250 réactions, GRI.Mech.03V [47])
Turbulence	RNG $K - \varepsilon$
Transfert de la chaleur	Loi de paroi
NOx	Zeldovich

Tableau .4.3: Choix des modèles.

4.5 Discussion des résultats de simulation:

4.5.1 Validation du code:

Pour valider les résultats numériques on se réfère tout d'abord au calage de la courbe de pression cylindre calculée avec celle mesurée sur banc d'essai moteur.



Figure.4.4: Courbe de validation de la pression cylindre durant un cycle moteur.

La figure (4.4) représente une comparaison entre la pression cylindre mesurée (expérimental) et celle obtenue par calcul numérique. On note une bonne concordance entre les valeurs mesurées et celles calculées. L'erreur maximale ne dépasse pas les 10% dans la zone de combustion qui est une valeur acceptable en vu de la littérature spécialisée.

La comparaison de la pression calculée et mesurée montre bien que le modèle SAGE est fort capable de prédire le phénomène de combustion au sein de la chambre de combustion d'un moteur à gaz alimenté par le CH_4 .

4.5.2 Le taux de dégagement de chaleur et la température:

La figure (4.5 et 4.6) représente l'évolution du taux de chaleur dégagée et de température en fonction du degré de vilebrequin pendant un cycle moteur. L'augmentation très rapide de taux de chaleur et de température signifie le début de combustion. La valeur maximale atteint 55J/Deg pour la chaleur dégagée et pour la température 1850K.



Figure.4.5: Taux de chaleur dégagée en fonction de l'angle de vilebrequin.



Figure.4.6: L'évolution de la température en fonction de l'angle de vilebrequin.

4.5.3 L'évolution de la masse CH₄:

La figure (4.7) représente le résultat de l'évolution du fuel (CH_4) dans la chambre de combustion estimée par la simulation obtenu par « CONVERGE V3.1» sous forme de profil.



Figure.4.7: Evolution de la masse de CH_4 en fonction de l'angle de vilebrequin.

4.5.4 L'évolution du OH :



Figure.4.8 : Prédiction des OH en fonction de l'angle de vilebrequin.

4.5.5 Emissions moyennes du cycle:

Parmi les différents produits polluants qui peuvent être élaborés par la combustion, les oxydes de carbone, les hydrocarbures imbrûlés ou partiellement oxydés et les oxydes d'azotes sont considérés comme les principaux polluants produits par un moteur à gaz.

4.5.5.1 Les émissions de monoxyde de carbone (CO)

Les émissions de CO sont formées au cœur de la flamme avec d'autres produits intermédiaires de la combustion. La plupart de ces produits sont ensuite convertis en CO2, si bien que la présence de CO à l'ouverture des soupapes d'échappement démontre l'existence d'un processus d'oxydation incomplet. La variation de*CO* pour la combustion est présentée sur la figure (4.9).



Figure.4.9 : prédiction des CO en fonction de l'angle de vilebrequin.

4.5.5.2 Les émissions d'oxydes d'azote (NOx):

L'oxyde nitrique NO, le dioxyde d'azote NO_2 sont traditionnellement regroupés sous le terme*NOx*. Dans un moteur, le NO est cependant le plus susceptible de se former aux

températures rencontrées durant la phase de combustion. Sa formation est contrôlée par trois mécanismes différents décrits dans la littérature:

- Le NO thermique correspond à une oxydation de l'azote atmosphérique décrite par le mécanisme de Zeldovitch. Ce mécanisme représente la voie prédominante de formation des NO pendant la combustion.
- Le fuel-NO est lié à la décomposition du combustible qui peut libérer des composés NOx. La teneur en azote des carburants est aujourd'hui si infime que cette voie de formation des NO peut être négligée.



Figure.4.10 : Prédiction des *NOx* en fonction de l'angle de vilebrequin.

4.5.5.3 Les émissions d'hydrocarbures imbrûlés (HC):

Les variations des espèces de HC pour la combustion du CH_4 sont représentées sur les figures (4.11).



Figure.4.11 : Prédiction des *HC* en fonction de l'angle de vilebrequin.

4.6 champs scalaires:

Pour bien comprendre les résultats obtenus par la simulation numérique, on présente ici des images en séquence (contours) de la chambre de combustion, pour caractériser le comportement de jet au cours du cycle et pour voir de prés ce qui ce passe dans la chambre.

4.6.1 Evolution de spray (CH_4) :

La figure (4.12) montre l'évolution temporelle de la masse (CH4) sous forme des contours à différentes angles du vilebrequin.









Cutplane CH4 [Kg]

Cutplane CH4 [Kg]

Temps : - $3.704754^{e}+00$





Temps : 1.259950^e-01



Cutplane CH4 [Kg]

Temps : 6.498196^e+00

















Temps : 2.126752^e+01



Figure.4.12: L'évolution de spray CH_4

4.6.2 Champs de température:

Les champs de température à différentes angles du vilebrequin sont présentés sur la figure (4.13). L'évolution de la température dans la chambre de combustion augmente de façon régulière, jusqu'à sa valeur maximale. Les champs de température présentés ci-dessous montrent que la température maximale atteint une valeur de 2700K environ.







Temps : - 1.985038^e+01









Cutplane Temp [K]













Cutplane Temp [K]

Cutplane Temp [K]



Temps : 3.132150^e+01





84







Cutplane Temp [K]













Figure.4.13: L'évolution de la température à différents angle de vilebrequin.

4.6.3 Allumage:

La simulation peut nous préciser le moment de l'allumage, ceci est possible grâce à la poursuite des premières traces des produits de combustion. Dans cette section nous présentons des résultats concernant l'allumage. Il faut noter que la capture du délai d'inflammation est très délicate. Ce délai d'allumage peut être détecté grossièrement par l'analyse des courbes de pression ou du taux de chaleur. La figure (4.14) montre l'emplacement des premières cellules d'allumage environ -18°V.





Figure.4.14: Les premières cellules d'allumage.

4.6.4 L'évolution des espaces NO_x , CO_2 :

4.6.4.1 L'évolution de NO_X :

La figure (4.16) représente le contour des NOx à différents angles du vilebrequin pour la combustion de CH4.Les régions de formations de NOx dépendent principalement de la température locale de la flamme et du carburant. Nous remarquons que pour les carburants testés la formation des NOx augmente avec l'augmentation de la température moyenne dans le cylindre. Ces résultats confirment clairement l'évolution des NOx représentée sur les figures (4.6, 4.9 et 4.13).





Temps :- 3.704754 ^e+00




Cutplane NOx [Kg]





Cutplane NOx [Kg]







Cutplane NOx [Kg]

Cutplane NOx [Kg]





Temps : 3.132150^e+01







Cutplane NOx [Kg]





Cutplane NOx [Kg]







Figure.4.15: L'évolution de *NOx*.

4.6.4.2 L'évolution de CO_2 :

Les figures (4.17) représentent le contour de CO_2 à différent angle du vilebrequin. Nous remarquons que la formation des CO_2 augmente avec l'augmentation de la température moyenne dans le cylindre. Ce résultat confirme clairement l'évolution de CO2 représentée sur figure la (4.8).

Notez que son faible contenu en carbone permet des réductions d'émissions de gaz à effet de serre supérieures à 20 % par rapport à l'essence [48]. De même, sur un moteur optimisé au gaz naturel, une réduction des émissions de CO2 de 5 à 10 % par rapport au moteur Diesel est possible [48].





Cutplane CO2 [Kg]













Cutplane CO2 [Kg]



Temps : 1.127842^e+01



Cutplane CO2 [Kg]









Cutplane CO2 [Kg]





Cutplane CO2 [Kg]

Temps : 8.133543^e+01





Figure4.16: L'évolution de *CO*2.

Donc, ces contours montrent que la zone de réaction est au centre de la chambre de combustion où la concentration des espèces résultant de la combustion est faible, et ces évolutions expliquent bien la morphologie globale de la flamme au sein de la chambre de combustion.

4.7 Conclusion:

L'objectif majeur de ce chapitre est de caler et de valider les résultats numériques de la combustion dans un moteur à gaz naturel; en utilisant une version de converge 1.3V, les résultats étaient en bon accord avec les données expérimentales, l'investigation a abouti aux résultats suivants:

- Sur le plan numérique les modèles utilisés dans ce travail pour représenter les phénomènes à l'intérieur de la chambre de combustion (dégagement de chaleur, Température, Allumage, Combustion, ...) donnent des bons résultats.
- Le modèle SAGE est fort capable de prédire le phénomène de combustion au sein de la chambre de combustion. Cette approche permet à l'utilisateur d'introduire un mécanisme de cinétique chimique dans la simulation avec un ensemble des fichiers crée par CHEMKIN.
- Le présent travail constitue un outil supplémentaire à l'effet de comprendre le processus de combustion dans un moteur à gaz naturel.
- Le gaz naturel GNV est un composé quasiment pur, son usage permet des émissions moindres de polluants et son usage présente ainsi des avantages environnementaux certains, en particulier en site urbain (CO, HC, NOx, bruit) [48].
- Les gaz naturels et les GNV (CH4) peuvent être considérés comme des carburants alternatifs pour les moteurs à combustions internes. L'utilisation de ces carburants permet de réduire les émissions polluantes.

Conclusion générale

Conclusion générale

La pollution atmosphérique et le réchauffement climatique provoqué par les émissions de gaz à effet de serre sont devenus un des sujets de première importance dans le monde entier. La contribution des moteurs à ce fléau est importante. Un grand nombre de travaux de recherches ont été mené dans le but d'identifier des sources d'énergie de substitution plus écologiques que les produits pétroliers conventionnels. Le gaz naturel bénéficie d'un grand intérêt en tant que carburant alternatif propre. Le GNV peut être utilisé, moyennant des adaptations légères, dans des moteurs à essence ou Diesel. Le présent travail est consacré à l'étude de la combustion turbulente du méthane dans une chambre de combustion cylindrique utilisant le gaz naturel. L'étude est basée sur l'approche de simulation numérique cet étude émane de la nécessite de comprendre et de maîtriser le code de calcul puissant «converge» utilisé surtout pour la simulation de combustion des moteurs. Tous d'abord on premier temps on a installé le code de «Converge V1.3». Ensuite, la maîtrise du code à travers les trois volets préprocessing, processing et post-processing. De plus, des logiciels sont utilisés pour le posttraitement des résultats, tels que: Origine et GMV-plot pour les illustrations 2D et 3D.

La connaissance des conditions de fonctionnement du moteur ainsi que les modèles physiques et chimiques utilisés sont nécessaires pour la prédiction du cycle moteur. La masse du carburant, le type du carburant, les propriétés du carburant,...etc. Influent beaucoup sur les résultats de simulation aux niveaux de combustion et les performances du moteur à gaz.

Les mesures expérimentales souvent utilisées pour analyser les écoulements turbulents sont coûteuse alors que La simulation de la combustion dans les moteurs est un outil très important qui est la résolution numérique des équations de la dynamique des fluides (CFD), nous permet de visualiser les résultats d'un écoulement sur un simple écran d'ordinateur, en relevant des variables telles que la vitesse, la pression et la température et bien d'autres. L'énorme progrès apporté aux outils de simulation et le développement de modèles récents de combustion rend l'association entre l'approche numérique et le travail expérimental de plus en plus indispensable.

Concernant les travaux numériques, les codes de simulation comme CONVERGE deviennent un outil indispensable pour l'étude des phénomènes physiques très complexes dont les écoulements chimiquement réactifs pour la validation des résultats expérimentaux et faire des améliorations et des développements. Une simulation numérique réussie de la combustion à gaz naturel exige la modélisation des divers processus, tels que le comportement du jet de carburant, l'étincelle, la chimie, la turbulence, etc....

Dans la première partie de ce travail, on a présenté, de façon générale, la combustion turbulence dans un moteur alimenté en gaz naturel. Ensuite, le second chapitre est consacré aux détails des modèles physiques et chimiques. Ce dernier permet de décrire de façon complète les équations de conservation.

Dans le troisième chapitre on a présenté le code et la méthode numérique. On a traité brièvement l'historique du code de calcul converge afin de simuler la combustion au sein de la chambre de combustion du moteur étudié.

Enfin, dans le dernier chapitre, un exposé de l'application et des résultats sont présentés. Tout d'abord, une validation avec des données expérimentales et la présentation des résultats. La validation du CFD se base sur une comparaison entre les résultats expérimentaux et ceux issus de la simulation numérique à l'aide de la pression cylindre. Les résultats numériques étaient en bon accord avec ceux d'expérimentale. Après la validation des résultats de simulation numérique montrent à la fois une simplicité pour étudier et comprendre le processus de combustion dans les moteurs à gaz naturel.

REFERENCES

- [1]. Mohand Said LOUNICI, Mohand TAZEROUT, Dan Catalin NICULESCU, Radu CHIRIAC ; Etude expérimentale du fonctionnement au cliquetis d'un moteur Diesel Dual-Fuel, TERMOTEHNICA, 2010.
- [2]. R. L. Hoekstra, K. collier, N. Mulligan, L. Chew. Experimental study of a clean burning vehicle fuel. Ht. J. Hydrogen Energy, Vol. 20, No.9, p.731-754, 1995.
- [3]. H. M. Cho, B. Q. He. Spark ignition natural gas engines a review. Energy conversion and Management, Vol.48, p. 608-618, 2007.
- [4]. Moteur à gaz, http://fr.wikipedia.org/wiki/Moteur_gaz
- [5]. Baptiste JACQUES, Clément NOURISSAT, Quentin ROBERTSON et Théo VINCENT ; De la biomasse au carburant 2014-2015 http://delabiomasseaucarburant.jimdo.com/gestion-du-gaz-naturel.
- [6]. Joël PEDESSAC; le Comité Français du Butane et du Propane intitulé aussi CFBP, 2003.
- [7]. Martin Blanchet, Le transport lourd au gaz naturel (Une alternative accessible, économique et propre), Gaz Métro Solution Transport.
- [8]. Lounici Mohand Said ; Contribution a la réduction de la pollution urbaine en Algérie par recours à l'utilisation de carburants alternative, thèse de doctorat, EMP Alger, 2011.
- [9]. Sustainable transport: NGV Sourcebook for policy-makers in Developing Cities, Report GTZ Division 44, 2008, http://www.iangv.org
- [10]. W. L Wong. Compressed natural gas as an alternative fuel in diesel engines. Report, university of Southern Queensland, 2005.
- [11]. A. Bilcan. Contribution à l'étude du cycle thermodynamique de moteurs fonctionnant en dual-fuel. Thèse de doctorat, ENSTIM de Nantes, 2003.
- [12]. A. Ibrahim, S. Bari, Optimization of a natural gas SI engine employing EGR strategy using a two-zone combustion model, fuel, Vol. 87, p. 1824-1834, 2008.
- [13]. Sylvain Laurent, Thibaut Perrin et Xavier Geffrier; Moteurs automobiles-écologie, 2012.
- [14]. AE. Catania, S. D'Ambrosio, A. Mittica, E. Spessa. Experimental investigation of fuel consumption and exhaust emissions of a 16V pent-roof engine fueled by gasoline and CNG. Society of Automotive Engineers, SAE paper no. 01-1191, 2001.
- [15]. M. Kojima, Breathing Clean: Considering the switch to natural gas buses, world bank technical paper no. 516, p. 1-15, 2001.
- [16]. P. Lino, B. Maione, C. Amorese. Modelling and predictive control of a new injection system for compressed natural gas engines. Engineering practice, Vol. 16, 2008.

- [17]. bobmarleyponge.free.fr image.
- [18]. E.NAUDIN, Document Renault (ETUDE DU SYSTÈME), GPL 2 étude-du système.
- [19]. K.J. Richards, P.K. Senecal, and E. Pomraning, A Three-Dimensional Computational Fluid Dynamics Program for Transient or Steady State Flows with Complex Geometries, CONVERGE (Version 1.3), Convergent Science, Inc., Middleton, WI. 2008.
- [20]. K.J. Richards, P.K. Senecal, and E. Pomraning, A Three-Dimensional Computational Fluid Dynamics Program for Transient or Steady State Flow with Complex Geometries, CONVERGE (Version 1.4.1), Convergent Science, Inc., Middleton, WI. (2012).
- [21]. M. J. Holst, Notes on the kiva-II software and chemically reactive fluid mechanics, Numerical Mathematics Group Computing & Mathematics Research Division Lawrence Livermore National Laboratory, California, 1992.
- [22]. R. Aglave, CFD Simulation of Combustion Using Automatically Reduced Reaction Mechanisms: A Case for Diesel Engine., thèse de doctorat, University of Heidelberg 2007.
- [23]. Yakhot, V., and Orszag, S.A., Renormalization Group Analysis of Turbulence. I. Basic Theory, J. Sci. Comput., vol. 1, pp. 3-51, 1986.
- [24]. B. Zuo, A.M. Gomes and C.J. Rutland, Studies of Superheated Fuel Spray Structures and Vaporization in GDI engines, 11th International Multidimensional engine Modeling User's Group Meeting, Http://www.erc.wisc.edu, 2001.
- [25]. P. Soltic, D. Edenhauser, T. Thurnheer, D. Schreiber, A. Sankowski, Experimental investigation of mineral diesel fuel, GTL fuel, RME and neat soybean and rapeseed oil combustion in a heavy duty on-road engine with exhaust gas after treatment, Fuel 88, pp.1–8, 2009.
- [26]. O. Armas, J. J. Hernández, M. D. Cárdenas, Reduction of diesel smoke opacity from vegetable oil methyl esters during transient operation, Fuel 85, pp.2427–2438, 2006.
- [27]. V. Pradeep, R.P. Sharma, Use of HOT EGR for NOx control in a compression ignition engine fuelled with bio-diesel from Jatropha oil, Renewable Energy 32, pp.1136–1154, 2007.
- [28]. C. Baumgarten, Mixture Formation in Internal Combustion Engines, Springer- Verlag Berlin Heidelberg, New York, 2006.
- [29]. K.J. Richards, P.K. Senecal, and E. Pomraning, A Three-Dimensional Computational Fluid Dynamics Program for Transient or Steady State Flows with Complex Geometries, CONVERGE (Version 2.2.0), Convergent Science, Inc., Middleton, WI. (2008).

- [30]. Senecal, P. K., Pomraning, E., and Richards, K. J., "Multi-Dimensional Modeling of Direct- Injection Diesel Spray Liquid Length and Flame Lift-off Length using CFD and Parallel Detailed Chemistry," SAE Paper No. 2003-01-1043, 2003.
- [31]. Turns, S. R., An Introduction to Combustion, McGraw-Hill, Inc., 1996.
- [32]. P. Belardini1 and C. Bertoli, Multi-Dimensional Modeling of Combustion and Pollutants Formation of New Technology Light Duty Diesel Engines, Oil & Gas Science and Technology- Rev. IFP, Vol. 54, No. 2, pp. 251-257, 1999.
- [33]. J.B. Heywood, «Internal combustion engine fundamentals», Ed: Mc Graw Hill, 1988, 930 p.
- [34]. D. Jung and D. N. Assanis, Multi-Zone DI Diesel Spray Combustion Model for Cycle Simulation Studies of Engine Performance and Emissions, SAE Paper No 2001-01-1246, 2001.
- [35]. F. Pischinger, H. Schutle, J. Hansen, the Diesel engine's future, VDI-Congress, Wolfsburg, 1988.
- [36]. F. Pischinger, H. Schutle, J. Hansen, the Diesel engine's future, VDI-Congress, Wolfsburg, 1988.
- [37]. H. Hiroyasu, Diesel Engine Combustion and Its Modeling, International Symposium Comodia 94, Japan 1994.
- [38]. V. Karel, M. Jan, B. Konstantinos, Simulation of combustion in a heavy duty diesel engine with focus on soot formation,www3.fs.cvut.cz/web/fileadmin/documents/12241-BOZEK/publikace/2002/F02V165.pdf
- [39]. N. L. Johnson. The Legacy and Future of CFD at Los Alamos, proceedings of the 1996 Canadian CFD Conference Invited talk. Ottawa, Canada June 3-4, 1996
- [40]. A. Amsden, T. D. Butler, P. J. O'Rourke, J. D. Ramshaw. KIVA-A comprehensive model for 2-D and 3-D engine simulations, S4E Paper 850554, 1985.
- [41]. A. A. Amsden, T. D. Butler, P. J. O'Rourke, J. D. Ramshaw. KIVA-A comprehensive model for 2-D and 3-D engine simulations, S4E Paper 850554, 1985
- [42]. Kong. Kiva note_part3: the computer program, 1999.
- [43]. Issa, R. I., "Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operatorsplitting,"Journal of computational physics, vol. 62, 1985.
- [44]. Patankar, S. V. & Spalding, D. B, A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. Int. J. of Heat and Mass Transfer, vol.15, 1972.

- [45]. C. M. Rhie and W. L. Chowt, numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation, Vol. 21, N. 11, 1983.
- [46]. Jia, M. and Xie, M., "A Chemical Kinetics Model of Iso-Octane" Oxidation for HCCI Engines", Fuel, Vol. 85, pp. 2293-2604, 2006.
- [47]. http://www.tfd.chalmers.se/~valeri/MECH.html.
- [48]. Anne Prieur, Le gaz naturel pour véhicules (GNV), IFP, France, 2006.