

RÉPUBLIQUE DU CAMEROUN

Paix – Travail – Patrie

UNIVERSITÉ DE YAOUNDÉ I

CENTRE DE RECHERCHE ET DE
FORMATION DOCTORALE EN SCIENCES,
TECHNOLOGIE ET GÉOSCIENCES

UNITÉ DE RECHERCHE ET DE
FORMATION DOCTORALE EN
PHYSIQUE ET APPLICATIONS

B.P. : 812 Yaoundé

Email : crfd_stg@uy1.uninet.cm



REPUBLIC OF CAMEROON

Peace – Work – Fatherland

THE UNIVERSITY OF YAOUNDÉ I

POSTGRADUATE SCHOOL OF
SCIENCE, TECHNOLOGY AND
GEOSCIENCES

RESEARCH AND POSTGRADUATE
TRAINING UNIT FOR PHYSICS AND
APPLICATIONS

P.O. Box : 812 Yaoundé

Email : crfd_stg@uy1.uninet.cm

Laboratoire d'Énergie et Systèmes Électriques et Électroniques
Laboratory of Energy and Electrical Systems and Electronics

**MODÉLISATION ET SIMULATION DES CARACTÉRISTIQUES DE
COMBUSTION ET DE NO DANS UN MOTEUR À ALLUMAGE PAR
COMPRESSION : APPLICATION AU CARBURANT BIODIESEL**

THÈSE

Présentée en vue de l'obtention du Diplôme de Doctorat/Ph.D en Physique

Spécialité : Énergie et Systèmes Électriques et Électroniques

Option : Énergie et Environnement

Et soutenue publiquement le 24 mai 2022 par

Jean Paul GRAM SHOU

Matricule : 07W309

Co-dirigée par :

KOFANE Timoléon Crépin

Professeur

Université de Yaoundé I

OBOUNOU AKONG Marcel Brice

Maître de Conférences

Université de Yaoundé I

Jury de soutenance :

Président :	OWONO OWNO Luc Calvin,	Université de Yaoundé I ;
	Professeur	
Rapporteurs :	KOFANE Timoléon Crépin,	Université de Yaoundé I ;
	Professeur	
	OBOUNOU AKONG Marcel Brice,	Université de Yaoundé I ;
	Maître de Conférences	
Membres :	BEN-BOLIE Germain Hubert,	Université de Yaoundé I ;
	Professeur	
	NJANDJOCK NOUCK Philippe,	Université de Yaoundé I ;
	Professeur	
	VONDOU DEBERTINI Appolinaire,	Université de Yaoundé I ;
	Maître de Conférences	
	FOPAH-LELE Armand,	Université de Buea.
	Maître de Conférences	

Mai 2022



RÉPUBLIQUE DU CAMEROUN
Paix - Travail - Patrie

UNIVERSITÉ DE YAOUNDÉ I

FACULTÉ DES SCIENCES

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE



REPUBLIC OF CAMEROON
Peace - Work - Fatherland

THE UNIVERSITY OF YAOUNDÉ I

FACULTY OF SCIENCE

DEPARTMENT OF PHYSICS

ATTESTATION DE CORRECTION DE LA THÈSE DE DOCTORAT/Ph.D

Nous soussignés, Professeur OWONO OWONO Luc Calvin, Président, Professeur BEN-BOLIE Germain Hubert et Professeur NJANDJOCK NOUCK Philippe, Examineurs du jury de la soutenance de la thèse de Doctorat/Ph.D de Monsieur Jean Paul GRAM SHOU, Matricule 07W309, préparée sous co-direction du Professeur OBOUNOU AKONG Marcel Brice et du Professeur KOFANE Timoléon Crépin, intitulée : « Modélisation et simulation des caractéristiques de combustion et de NO dans un moteur à allumage par compression : application au carburant biodiesel », soutenue publiquement le mardi 24 mai 2022 à la salle multimédia de la Faculté des Sciences de l'Université de Yaoundé I en vue de l'obtention du grade de Docteur/Ph.D de l'Université de Yaoundé I en Physique, spécialité : Énergie et Systèmes Électriques et Électroniques, attestons que toutes les corrections demandées par le jury de soutenance ont été effectuées.


En foi de quoi la présente attestation lui est délivrée pour lui servir et valoir ce que de droit.

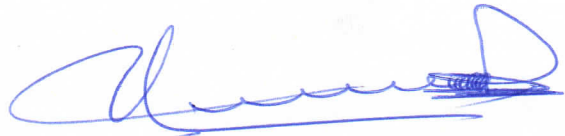
Fait à Yaoundé, le 07 JUN 2022

Les Examineurs

Le Président du jury

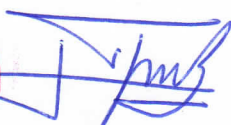

Pr. NJANDJOCK NOUCK
Philippe


Pr. BEN-BOLIE
Germain Hubert


Pr. OWONO OWONO
Luc Calvin

Visa du Chef de Département de Physique




Pr. NDJAKA Jean-Marie Bienvenu

DÉDICACE

DÉDICACE

Je dédie ce travail :

À ma mère **MBIKI SADJO** qui nous a inculqué l'esprit de travail, de persévérance et qui ne cesse de multiplier les efforts au quotidien pour nous voir réussir.

Qu'elle trouve ici l'expression de ma gratitude et de toute mon affection pour son amour, son abnégation et pour tous ses sacrifices.

À la mémoire de mon père **NGOUBOUIKOA BOUBA** disparu trop tôt quand j'étais en deuxième année de cycle de licence et en pleine session normale du deuxième semestre. J'espère que, du monde qui est le tien maintenant, tu apprécies cet humble geste comme preuve de reconnaissance de la part d'un fils qui a toujours prié pour le salut de ton âme. Puisse Dieu, le Tout Puissant, l'avoir en sa sainte miséricorde !

À la mémoire de mon encadreur **Pr. OBOUNOU AKONG Marcel Brice** disparu quand mon dossier de l'autorisation de soutenance était dans le circuit administratif. J'espère que, du monde qui est le tien maintenant, tu apprécies l'aboutissement de cette thèse. J'ose croire que le Dieu Tout Puissant nous donne l'énergie suffisante pour continuer énergiquement l'œuvre laissée. Puisse Dieu, le Tout Puissant, avoir ton âme en sa sainte miséricorde !

REMERCIEMENTS

REMERCIEMENTS

Je rends grâce au Dieu Tout Puissant pour m'avoir donné les dispositions physiques, mentales, intellectuelles et morales qui m'ont permises de réaliser ce travail.

Ce travail n'aurait pu être réalisé sans la contribution directe ou indirecte de nombreuses personnes envers lesquelles je profite pour leur exprimer toute ma reconnaissance.

Je tiens tout d'abord à faire part de ma reconnaissance au **Pr. OWONO OWONO Luc Calvin**, Vice-Recteur Chargé des Enseignements, de la Professionnalisation et du Développement des Technologies de l'Information et de la Communication de l'Université de Yaoundé I, Chef de Département de Physique de l'École Normale Supérieure de Yaoundé et Coordonnateur de l'Unité de Recherche et de Formation Doctorale en Physique et Applications de l'École Doctorale de l'Université de Yaoundé I, pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance et pour l'intérêt et le regard critique qu'il a porté sur mon travail.

Que **Pr. BEN-BOLIE Germain Hubert**, **Pr. NJANDJOCK NOUCK Philippe**, **Pr. VONDOU DEBERTINI Apollinaire** et **Pr. FOPAH-LELE Armand**, membres de **jury de soutenance**, veuillent bien agréer le témoignage de ma reconnaissance d'avoir accepté de participer au jury de soutenance de cette thèse, ainsi que pour les remarques constructives et les conseils judicieux qu'ils m'ont prodigués.

J'adresse mes sincères remerciements :

aux encadreurs de cette thèse nommément, **Pr. KOFANE Timoléon Crépin** et **Pr. OBOUNOU AKONG Marcel Brice**, de regrettée mémoire pour avoir dirigé ce travail et pour leur bonne compréhension à mon égard et la disponibilité du **Pr. KOFANE Timoléon Crépin**. Je voudrais que cette période marque le début d'une longue collaboration car c'est pour moi un réel plaisir de travailler en votre compagnie ;

au **Chef de Département de Physique**, **Pr. NDJAKA Jean-Marie Bienvenu**, pour les entretiens et les conseils qu'il n'a jamais cessé de nous adresser. Ses conseils ont été, pour moi, extrêmement enrichissants aussi bien du point de vue recherche qu'au niveau humain ;

au **Pr. NJOMO Donatien**, pour ses enseignements dans le domaine de l'énergie. Ses enseignements ont été, pour moi, extrêmement enrichissants aussi bien du point de vue recherche que du point de vue expertise qu'il aimait tant donner à notre parcours académique ;

à toutes les enseignantes et à tous les enseignants de la Faculté des Sciences et de l'École Normale Supérieure de l'Université de Yaoundé I et particulièrement à ceux et celles du Département de Physique qui ont contribué à ma formation ;

aux membres du jury de la présoutenance, pour avoir évalué ce travail et pour leurs remarques et questions pertinentes, le Président, **Pr. NDJAKA Jean-Marie Bienvenu**, le Rapporteur, **Pr. NJANDJOCK NOUCK Philippe**, ainsi que les Membres, **Pr. BEN-BOLIE Germain Hubert** et **Pr. SIMO Elie**.

aux membres du jury de l'audition, pour avoir évalué ce travail et pour leurs remarques et suggestions pertinentes, le Président, **Pr. ZEKENG Serge**, le Rapporteur, **Pr. BODO Bertrand**, ainsi que les Membres, **Pr. SIEWE SIEWE Martin** et **Pr. ENYEGUE A NYAM Françoise**.

à ma mère pour le soutien et les encouragements qu'elle n'a jamais cessé d'adresser à ma faveur ;

à mon tuteur **Monsieur PALDOU Christophe** pour son soutien et les encouragements qu'il n'a jamais cessé d'adresser à ma faveur. Mon vocabulaire n'est pas assez riche pour exprimer toute ma reconnaissance. Une fois de plus merci !

à mes amis thésards, **MAHAMAT HASSANE BABIKIR** et **autres** pour les soutiens et les encouragements qu'ils n'ont jamais cessé d'adresser à ma faveur et avec qui j'ai eu des discussions constructives et enrichissantes tout au long des années passées au **Laboratoire d'Énergie et Systèmes Électriques et Électroniques** du Département de Physique de la Faculté des Sciences de l'Université de Yaoundé I. J'ai le plaisir de partager avec vous ce travail ainsi que cette expérience de vie ;

à tous les membres de ma famille élargie et mes amis que je ne peux remercier nommément ainsi qu'à ceux que ma mémoire a pu ingratement oublier, trouvez ici l'expression de ma profonde gratitude pour les sacrifices que vous ne cessez de consentir à mon égard ;

à toutes les personnes qui, de près ou de loin, ont contribué à la réalisation de cette thèse de Doctorat/Ph.D en Physique.

Enfin, je dois exprimer ma gratitude à ma famille nucléaire et mes amis proches pour leurs encouragements et je tiens à leur consacrer ce travail, à savoir mes parents et frères qui m'ont donné des soutiens et des encouragements constants, mes enfants **GRAM SHOU Russell** et **GRAM SHOU Maxwell** qui me font de petites surprises tous les jours et leur **Maman Christelle**. Les valeurs que j'ai apprises d'eux m'ont aidé à franchir cette étape de ma vie, elles m'aideront encore sûrement pour celles à venir.

RÉSUMÉ

RÉSUMÉ

La demande mondiale d'énergie a connu une croissance exponentielle due à l'augmentation de la population mondiale, à la croissance économique et à l'évolution technologique. Cette hausse de la demande énergétique globale peut s'expliquer en grande partie par l'évolution du secteur des transports. Malheureusement, les réserves mondiales de pétrole sont en baisse permanente et de plus l'utilisation de ces énergies fossiles est à l'origine des problèmes environnementaux. À cet effet, les recherches ne cessent de proposer d'autres sources d'énergies alternatives à faire partie d'un mix énergétique durable.

La thèse s'inscrit dans ce sillage et concerne l'étude du carburant biodiesel qui est une source d'énergie renouvelable en raison de son immense potentiel. Le carburant biodiesel utilisé est à base des huiles de cuisson usagées (WCOBD). Notre objectif global est d'améliorer les performances énergétiques des moteurs à allumage par compression fonctionnant avec les carburants biodiesel et de réduire les émissions de NO.

Dans le cadre de cette thèse, une approche thermodynamique a été utilisée pour la modélisation de différents phénomènes physiques qui se produisent dans la chambre de combustion d'un moteur à allumage par compression fonctionnant avec le carburant biodiesel et avec le carburant diesel conventionnel. Ce modèle phénoménologique décrit l'ensemble des phénomènes physiques, qui interviennent lors de la combustion, tels la vaporisation, l'injection, la turbulence et l'impact de la chimie sur le dégagement de chaleur et ils sont modélisés en utilisant des sous-modèles décrivant chacun de ces phénomènes physiques. Ce modèle phénoménologique de combustion à deux zones prédit la pression, la température, les différentes performances énergétiques et les émissions de NO. La technique d'injection de vapeur ajoutée permet de réduire les émissions de NO et d'améliorer les performances. Les carburants biodiesel et les carburants conventionnels sont composés de nombreuses classes différentes d'hydrocarbures oxygénés et d'hydrocarbures, il est épineux de mener des expériences ou des simulations significatives avec un si grand nombre de produits chimiques contenus dans ces carburants. Afin de surmonter ce problème, des surrogates et la modélisation d'équilibre chimique sont utilisés pour répondre à ces exigences.

La comparaison des valeurs de concentration en monoxyde d'azote calculées et expérimentales à l'échappement pour les deux carburants montre une coïncidence très satisfaisante. Les valeurs de concentration des monoxydes d'azote calculées et mesurées du carburant biodiesel sont respectivement 927,7 ppm et 954,4 ppm. Alors que les valeurs de concentration des monoxydes d'azote calculées et expérimentales du carburant diesel sont respectivement 1004,4 ppm et 1019,4 ppm.

En guise des perspectives, la simulation de la combustion de carburant biodiesel dans les moteurs à allumage par compression en utilisant la mécanique des fluides numérique (CFD) et la modélisation de l'équilibre chimique des produits de combustion pour trouver des molécules modèles des carburants biodiesel (surrogates) sont envisagées.

Mots clés : modélisation, simulation, carburant biodiesel, méthode d'injection de vapeur d'eau, moteur à allumage par compression et équilibre chimique.

ABSTRACT

Global demand for energy has grown exponentially due to the increase of the world population, to the economic growth and to the technological evolution. This increase in overall energy demand can be explained in large part by the evolution of the transport sector. Unfortunately, the world's oil reserves are depleting and in addition, the use of these fossil fuels is responsible of the environmental issues. So, research continues to offer other alternative energy resources to be part of a sustainable energy mix.

The thesis follows this path and concerns the study of the biodiesel fuel which is from a renewable source of energy because of its immense potential. The biodiesel fuel used is based on waste cooking oil biodiesel (WCOBD). Our overall goal is to improve the energy performance of compression ignition engines operating with biodiesel fuels and to reduce NO emissions.

Within the framework of this thesis, a thermodynamic approach was used for the modeling of the various physical phenomena that occur in the chamber of combustion of a compression ignition engine running with biodiesel fuel and with conventional diesel fuel. This phenomenological model describes the whole physical phenomena, which occur during combustion, such as vaporization, injection, turbulence and the impact of chemistry on heat release and they are modeled using sub-models describing each of these physical phenomena. This two zone thermodynamic phenomenological model of combustion which predicts the pressure, the temperature, the different energy performances and the NO emissions. The technique of steam injection added reduces NO emissions and improves performances. Biodiesel fuels and conventional fuels are composed of many different classes of oxygenated hydrocarbons and hydrocarbons, it would be very hard to conduct meaningful experiments or simulations with such a large number of chemicals contained in these fuels. In order to overcome this problem, surrogates and chemical equilibrium modeling are used to meet these requirements.

The comparison of the calculated and experimental values of nitric oxide concentrations in the exhaust for the two fuels shows a very satisfactory coincidence. The calculated and measured nitric oxide concentration values of biodiesel fuel are 927.7 ppm and 954.4 ppm, respectively. While the values of calculated and experimental concentration of nitric oxides in diesel fuel are 1004.4 ppm and 1019.4 ppm, respectively.

As perspectives, the computational fluid dynamics of the combustion of biodiesel fuel in compression ignition engines and chemical equilibrium modeling combustion products to find surrogates molecules for biodiesel fuels are being considered.

Keywords : modeling, simulation, biodiesel fuel, steam injection method, compression ignition engine and chemical equilibrium.

LISTE DES FIGURES

1.1	Matières premières disponibles pour la production de carburant biodiesel.	6
1.2	Production des biocarburants.	8
1.3	Étude comparative entre la production des biocarburants et le pétrole, leurs usages et leurs influences sur l'environnement.	8
1.4	Diamètres des traces d'usure sur la goupille sous une condition de charge de 300 N avec des vitesses de glissement.	12
1.5	Principaux mécanismes de formation des NO_x .	22
1.6	Différentes techniques de réduction des émissions de NO_x .	24
1.7	Schéma fonctionnel de la méthode d'injection de vapeur.	32
2.1	Principaux phénomènes intervenant lors d'un cycle moteur.	37
2.2	Bilan énergétique du modèle de combustion de Krieger et Borman.	40
2.3	Caractéristiques géométriques d'une soupape.	45
2.4	Bilan énergétique du modèle de combustion de Ferguson et Olikara.	49
2.5	Caractéristiques du jet d'un carburant.	52
2.6	Organigramme de calcul de température adiabatique de flamme T_{ad} .	65
2.7	Diagramme de Clapeyron d'un moteur à allumage par compression.	72
3.1	Comparaison des pressions expérimentales avec les pressions simulées des carburants.	81
3.2	Dérivée de pression dans la chambre de combustion.	82
3.3	Évolutions de pertes de chaleur et de transferts de chaleur.	83
3.4	Évolution de pression et de travail.	84
3.5	Évolution des températures des carburants diesel conventionnel et biodiesel.	85
3.6	Température adiabatique de flamme pour la richesse $\phi = 1$.	86
3.7	Température adiabatique de flamme.	87
3.8	Variation de fraction molaire à l'équilibre de CO_2 avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 0,6$.	88
3.9	Variation de fraction molaire à l'équilibre de CO_2 avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 1,2$.	89
3.10	Variation de fraction molaire à l'équilibre de H_2O avec le rapport vapeur/air.	90
3.11	Variation de fraction molaire à l'équilibre de N_2 avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 0,6$.	91
3.12	Variation de fraction molaire à l'équilibre de N_2 avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 1,2$.	92
3.13	Variation des fractions molaires à l'équilibre de O_2 avec le rapport vapeur/air.	93
3.14	Variation des fractions molaires à l'équilibre de O avec le rapport vapeur/air pour richesse $\phi = 0,6$.	94

3.15	Variation de fraction molaire à l'équilibre de O avec le rapport vapeur/air pour richesse $\phi = 1,2$	95
3.16	Variation des fractions molaires à l'équilibre de CO avec le rapport vapeur/air.	96
3.17	Variation des fractions molaires à l'équilibre de H ₂ avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 0,6$	97
3.18	Variation des fractions molaires à l'équilibre de H ₂ avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 1,2$	98
3.19	Variation des fractions molaires à l'équilibre de H avec le rapport vapeur/air.	99
3.20	Variation des fractions molaires à l'équilibre de OH avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 0,6$	100
3.21	Variation des fractions molaires à l'équilibre de OH avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 1,2$	101
3.22	Variation des fractions molaires à l'équilibre de NO avec le rapport vapeur/air.	102
3.23	Variation de la température adiabatique de flamme et de la chaleur spécifique des produits de combustion du carburant diesel conventionnel avec la richesse.	104
3.24	Variation de la température adiabatique de flamme et de la chaleur spécifique des produits de combustion du carburant biodiesel avec la richesse.	105
3.25	Variation de l'enthalpie en fonction de la température.	106
3.26	Variation de l'enthalpie en fonction de la richesse.	107
3.27	Variation de la chaleur spécifique des produits de combustion avec le rapport vapeur/air.	108
3.28	Variation de l'enthalpie des produits de combustion avec le rapport vapeur/air.	109
3.29	Variation de l'enthalpie des produits de combustion avec le rapport vapeur/air.	110
3.30	Variation de l'entropie des produits de combustion avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 0,6$	111
3.31	Variation de l'entropie des produits de combustion avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 1,2$	112
3.32	Vitesse de dégagement de chaleur.	114
3.33	Dégagement de chaleur cumulé et fraction massique de carburant brûlé.	115
3.34	Évolution de la concentration en monoxyde d'azote en fonction de l'angle de vilebrequin.	117

LISTE DES TABLEAUX

1.1	Comparaison de différentes méthodes de production des carburants biodiesel.	9
1.2	Spécifications des carburants biodiesel selon les normes EN 14214 et ASTM D6751.	10
1.3	Principaux EMHV contenus dans les carburants biodiesel.	15
1.4	Modèles du délai d'auto-inflammation du carburant diesel conventionnel basés sur la loi de la forme d'Arrhenius.	28
1.5	Modèles du délai d'auto-inflammation des carburants biodiesel basés sur la loi de la forme d'Arrhenius.	28
1.6	Coefficients de la corrélation de Woschni.	30
2.1	Coefficients du modèle de combustion de Krieger et Borman.	41
2.2	Coefficients de la corrélation de Woschni.	47
2.3	Coefficients des constantes d'équilibre du modèle de combustion de Oli-kara et Borman.	59
2.4	Produits de combustion à basses températures $T < 1000$ K.	60
2.5	Spécifications du moteur à allumage par compression.	74
2.6	Propriétés chimiques et physiques de carburants testés.	74
2.7	Comparaison des fractions molaires des produits de combustion à l'équilibre du méthane à $\phi = 0,6$ et 10 % de vapeur obtenus avec le modèle à ceux obtenus avec le logiciel CEA de la NASA et le logiciel GASEQ.	76
2.8	Comparaison des fractions molaires des des produits de combustion à l'équilibre du méthane à $\phi = 1,2$ et 10 % de vapeur obtenus avec le modèle à ceux obtenus avec le logiciel CEA de la NASA et le logiciel GASEQ.	77

LISTE DES ABBRÉVIATIONS ET DES SIGLES

LISTE DES ABBRÉVIATIONS ET DES SIGLES

Abréviations

a	course du piston	[m]
b	alésage du cylindre	[m]
CO	monoxyde de carbone	[-]
CO ₂	dioxyde de carbone	[-]
COV	composés organiques volatils	[-]
C _p	chaleur spécifique à pression constante	[J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
CSE	consommation spécifique effective	[MJ/kWh]
CSF	consommation spécifique de carburant	[g/kWh]
C _v	chaleur spécifique à volume constante	[J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
d	diamètre de la goutte	[m]
d ₀	diamètre initial de la goutte	[m]
D ₃₂	diamètre moyen de Sauter	[m]
DI	degré d'insaturation	[-]
D _p	diamètre de la soupape	[m]
D _v	coefficient de diffusion des vapeurs de carburant	[m ² .s ⁻¹]
D _v	diamètre du conduit	[m]
E _A	énergie d'activation	[kJ.mol ⁻¹]
EGR	recirculation des gaz résiduels de combustion	[-]
g	intensité de la pesanteur	[g.m ⁻²]
h	enthalpie massique	[J.kg ⁻¹]
h _c	coefficient d'échange de chaleur	[W.m ⁻² .K ⁻¹]
HAP	hydrocarbures aromatiques polycycliques	[-]
HC	hydrocarbures imbrûlés	[-]
I _a	indice d'acide	[%]
I _C	indice de cétane	[-]
I _i	indice d'iode	[-]
I _S	indice de saponification	[-]
K	constante d'évaporation	[mm ² .s ⁻¹]
L _v	loi de levée des soupapes	[m]
L _v	chaleur latente de vaporisation	[J.kg ⁻¹]
m	masse du carburant	[kg]
M	masse molaire	[g.mol ⁻¹]
\dot{m}	débit massique	[kg.s ⁻¹]
NBD	biodiesel à base d'huile de soja	[-]
N	régime de rotation du moteur	[tr/mn]
NO	monoxyde d'azote	[-]
NO _x	oxydes d'azote (NO et NO ₂)	[-]

Nu	nombre de Nusselt	[-]
p	pression	[Pa]
P	puissance effective	[W]
P_c	pression critique	[atm]
PCI	pouvoir calorifique inférieur	[J.kg ⁻¹]
PCS	pouvoir calorifique supérieur	[J.kg ⁻¹]
PME	pression moyenne effective	[Pa]
PMF	pression moyenne des frottements	[Pa]
PMI	pression moyenne indiquée	[Pa]
ppm	partie par million	[-]
p_{sat}	pression de vapeur saturante	[mmHg]
Q	quantité de chaleur	[J]
Q_{amb}	quantité de chaleur	[-]
R	constante des gaz parfaits	[J.mol ⁻¹ .K ⁻¹]
R_e	nombre de Reynold	[-]
S	surface de la chambre de combustion	[m ²]
S_m	section de passage des gaz	[m ²]
r_m	rayon de la manivelle	[m]
t	temps	[s]
T	température	[K]
tep	tonne équivalent pétrole	[J]
T_r	température de référence	[K]
u	énergie interne massique	[J.kg ⁻¹]
V	volume	[m ³]
V_m	volume mort	[m ³]
V_p	vitesse moyenne linéaire du piston	[m.s ⁻¹]
w	vitesse des gaz dans le cylindre	[J]
W	travail	[J]
WCOBD	biodiesel à base d'huile de cuisson usagée	[-]
x	fraction brûlée de carburant	[-]
y	fraction massique	[-]

Indices

comb	combustion
ef	effectif
fr	frottement
l	liquide
p	parois
st	stœchiométrique

Sigles

ASTM	American Society for Testing and Mateials	[-]
EN	european norm	[-]
CFD	Computational Fluid Dynamics	[-]
JANAF	Joint Army, Navy and Air Force	[-]

Lettres grecques

β	rapport bielle/manivelle	[-]
---------	--------------------------	-----

ϕ	rapport air/carburant	[-]
ν	viscosité cinématique	[m ² .s ⁻¹]
μ	viscosité dynamique	[Pa.s]
ρ	masse volumique	[kg.m ⁻³]
σ	tension superficielle	[mN/m]
λ	conductivité thermique	[W.m ⁻² .K ⁻¹]
τ_c	taux de compression	[-]
τ_{ch}	délai chimique d'inflammation	[ms]
τ_{id}	délai d'auto-inflammation	[ms]
τ_{ph}	délai physique d'inflammation	[ms]
ω	vitesse de rotation du moteur	[rad/s]
θ	angle vilebrequin	[degrés]
γ	rapport des chaleurs spécifiques	[-]
η	rendement thermique du moteur	[%]
η_v	rendement volumétrique	[%]

TABLE DES MATIÈRES

Remerciements	iv
Résumé	vii
Abstract	viii
Liste des abréviations et des sigles	xiii
Introduction générale	1
1 Revue de la littérature	5
1.1 Introduction	5
1.2 Potentiel des matières premières des carburants biodiesel	5
1.3 Production des carburants biodiesel	6
1.3.1 Dilution et pyrolyse	7
1.3.2 Micro-émulsion	7
1.3.3 Transestérification	7
1.4 Propriétés physiques et chimiques des carburants biodiesel	10
1.4.1 Masse volumique	10
1.4.2 Viscosité cinématique	11
1.4.3 Volatilité	13
1.4.4 Points de trouble et d'écoulement	14
1.4.5 Pouvoir calorifique	14
1.4.6 Composition des carburants biodiesel	15
1.4.7 Indice de cétane	16
1.4.8 Stabilité à l'oxydation	16
1.4.9 Indice d'acide	17
1.4.10 Indice d'iode	17
1.5 Utilisation des carburants biodiesel	18
1.5.1 Carburants des moteurs à allumage par compression	18
1.5.2 Préoccupations environnementales	21
1.6 Production des carburants biodiesel au Cameroun	25
1.6.1 Institut de Recherche Agricole pour le Développement	25
1.6.2 Universités	26
1.6.3 Politiques bioénergétiques au Cameroun	26
1.7 Modèles mathématiques zéro dimensionnels	27
1.7.1 Délai d'auto-inflammation	27
1.7.2 Transferts thermiques pariétaux	28
1.8 Méthode d'injection de vapeur	31
1.9 Limites des précédentes études et la nécessité de la thèse	33

1.10 Conclusion	34
2 Modélisation thermodynamique de la chambre de combustion	36
2.1 Introduction	36
2.2 Modèles mathématiques zéro dimensionnels	37
2.3 Modèle thermodynamique à une zone	38
2.3.1 Équation de l'énergie	39
2.3.2 Écoulement à travers les soupapes	43
2.3.3 Transferts thermiques pariétaux	47
2.3.4 Délai d'auto-inflammation du carburant	48
2.4 Modèle phénoménologique de combustion à deux zones	49
2.4.1 Injection, pulvérisation et pénétration du jet liquide	50
2.4.2 Modèle de l'angle de jet	51
2.4.3 Modèle de pénétration vapeur maximum	53
2.4.4 Diamètre moyen des gouttelles pulvérisées	54
2.4.5 Modèles d'évaporation	55
2.4.6 Formations des oxydes d'azote	55
2.5 Modélisation de l'équilibre chimique	57
2.5.1 Modèle de combustion à l'équilibre chimique	57
2.5.2 Produits de combustion à l'équilibre chimique	58
2.5.3 Modèle de calcul des produits de combustion à l'équilibre chimique	60
2.5.4 Propriétés thermodynamiques	63
2.5.5 Température adiabatique de flamme à pression constante	64
2.6 Modèles de combustion des moteurs à allumage par compression	66
2.6.1 Sous-modèles de combustion	66
2.6.2 Propriétés thermodynamiques des produits de combustion et des carburants	68
2.6.3 Équations régissant les évolutions des grandeurs physiques	69
2.6.4 Performances du moteur à allumage par compression	71
2.7 Validations des modèles avec les résultats des expériences	74
2.8 Produits de combustion à l'équilibre chimique	75
2.9 Conclusion	78
3 Résultats et discussion	80
3.1 Introduction	80
3.2 Validations des modèles avec les résultats des expériences	80
3.2.1 Pression dans la chambre de combustion	80
3.2.2 Dérivée de la pression	81
3.3 Travail et transferts de chaleur	82
3.4 Optimisation des moteurs à allumage par compression	88
3.4.1 Effets d'injection de vapeur sur les produits de combustion	88
3.4.2 Effets d'injection de vapeur sur la température adiabatique de flamme	103
3.4.3 Effets d'injection de vapeur sur les propriétés thermodynamiques des produits de combustion	107
3.4.4 Vitesse de dégagement de chaleur	112
3.5 Caractéristiques de performance	116

3.5.1	Paramètres de performance	116
3.5.2	Température des gaz d'échappement	116
3.6	Conclusion	118
Bibliographie		123
Publications scientifiques		135

INTRODUCTION GÉNÉRALE

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Les besoins d'énergie sont en nette progression aussi bien dans les pays développés que dans les pays en voie de développement. La consommation mondiale d'énergie primaire a augmenté de 2,9 % en 2018, soit près du double de sa consommation moyenne sur la période de 2010 à 2018 qui était de 1,5 % par an, et la plus rapide croissance depuis 2010. La croissance de la production de biocarburants a été en moyenne de 9,7 % en 2018, la plus forte croissance depuis 2010 et légèrement supérieure à la consommation moyenne sur la période de 2010 à 2018 qui était de 9,0 % par an. Cette demande en énergie est assurée, en 2018, à 84,7 % par l'énergie primaire provenant des énergies fossiles. Malheureusement, les réserves mondiales de pétrole sont en baisse permanente et il est onéreux de nos jours de trouver des solutions de remplacement véritable. De plus, l'utilisation de ces énergies fossiles est à l'origine des problèmes environnementaux et contribue à l'accroissement sans cesse des émissions des gaz à effet de serre dont les conséquences sont bien établies à savoir les changements climatiques. Ainsi, les législations antipollution dans le monde sont de plus en plus sévères et s'inscrivent en général dans le cadre de l'objectif mondial de réduction des gaz à effet de serre ou des autres polluants.

Le gaz de pétrole liquéfié, le gaz naturel et les véhicules électriques sont envisagés pour leur caractère écologique. Cependant, le gaz de pétrole liquéfié, le gaz naturel et les véhicules électriques connaissent aujourd'hui une faible expansion dans le monde ; ils restent des solutions transitoires. L'origine fossile de gaz de pétrole liquéfié et de gaz naturel d'une part et certains verrous technologiques des véhicules électriques d'autre part constituent un handicap pour leur développement. De nos jours, les efforts sont orientés dans :

- la recherche de l'efficacité énergétique ;
- la valorisation des sources d'énergie renouvelables existantes.

Dans ce cadre, le carburant biodiesel fait l'objet d'une considération particulière. Cette considération tient compte du rôle qu'il pourrait jouer dans la réduction des émissions des gaz à effet de serre. Outre cet aspect environnemental, le carburant biodiesel apparaît comme un moyen d'assurer une certaine sécurité énergétique dans un contexte mondial marqué par la diminution des réserves mondiales de pétrole et la hausse des prix de pétrole. Malheureusement, le carburant biodiesel qui connaît un développement véritable apparaît très insuffisant.

Localement, le carburant biodiesel peut se présenter comme un véritable facteur de développement car l'utilisation de carburant biodiesel comme carburant de substitution partielle ou totale au gazole ou au fioul domestique dans les moteurs à allumage par compression peut s'avérer intéressante pour des pays disposant d'un potentiel permettant le développement de carburant biodiesel, en l'occurrence le carburant biodiesel procure aux pays développés et en voie de développement un approvisionnement énergétique indépendant et une sécurité énergétique pour les populations locales avec des opportunités d'emploi et les communautés rurales avec l'énergie moderne. Les applications de carburant biodiesel peuvent être dans la motorisation agricole et dans la production d'électricité ou orientées dans les transports.

Plusieurs études sur l'utilisation de carburant biodiesel dans les moteurs à allumage par compression ont été conduites. Les résultats varient très peu en termes de :

- consommation spécifique de carburant (CSF), elle augmente en général avec les esters d'huiles végétales ;
- problèmes rencontrés lors de l'utilisation des esters d'huiles végétales : formations des dépôts, en particulier dans les moteurs à allumage par compression à injection directe.

Des propositions de solutions technologiques ont été formulées pour pallier ces problèmes : modification ou adaptation des moteurs à allumage par compression, transestérification, mélange, craquage et micro-émulsions.

Cependant, les résultats sur les performances globales des moteurs à allumage par compression, les émissions polluantes et les paramètres prépondérants dans la formation des polluants lors de la combustion des carburants biodiesel restent des sujets de nombreuses divergences. En effet, les mécanismes qui gouvernent la formation des émissions polluantes ou qui définissent les performances dépendent en grande partie du type et des conditions de fonctionnement des moteurs à allumage par compression et des propriétés physicochimiques du carburant. Cette dépendance est très marquée avec les carburants biodiesel. Chaque carburant biodiesel doit être considérée avec ses spécificités. Tous les esters d'huiles végétales ont un comportement global similaire mais chacun présente ses particularités liées à sa nature physicochimique.

La détermination des conditions optimales de combustion de ces esters d'huiles végétales dans les moteurs à allumage par compression passe par une caractérisation en amont (caractérisation physicochimique des huiles et de leurs pulvérisations) et une caractérisation en aval (caractérisation de leur combustion : quantification des principaux polluants émis lors de leur combustion et identification des facteurs prépondérants sur la formation de ces polluants).

Pour la caractérisation de pulvérisation d'esters d'huiles végétales, l'étude théorique de l'évaporation de gouttes isolées est très intéressante (surtout lorsque les taux de réactions sont très élevés). La détermination théorique des taux d'évaporation nécessite la connaissance des propriétés thermodynamiques et des propriétés de transport de la phase gazeuse ou liquide du combustible. L'approche utilisée pour l'étude théorique de l'évaporation repose sur la détermination des propriétés de transport et des propriétés thermodynamiques des différentes phases de l'huile, en utilisant celles de ses acides gras majoritaires.

Pour étudier le comportement des moteurs à allumage par compression fonctionnant avec divers carburants de substitution, des simulations numériques sont nécessaires. Les simulations numériques présentent les avantages de réduire le temps, les coûts liés à la fabrication de prototypes et des équipements expérimentaux.

La simulation numérique des moteurs à allumage par compression est basée sur l'application des modèles mathématiques décrivant les différents processus physiques qui se produisent tout au long du cycle moteur. L'élaboration d'un modèle mathématique qui permet la simulation des processus de combustion dans les moteurs à allumage par compression donne la possibilité d'exécuter des scénarii et des procédures d'optimisation multiples afin de prédire le comportement des moteurs dans des conditions diverses et de réduire les dépenses liées aux études expérimentales.

Les émissions produites à partir des carburants biodiesel sont plus propres que celles produites à partir du carburant diesel conventionnel car les émissions de particules, la suie et le monoxyde de carbone sont plus faibles mais les émissions de NO_x sont bien plus élevés. Les performances du moteur pourraient être considérablement réduites et les émissions de NO_x pourraient être considérablement augmentées par l'utilisation des carburants biodiesel dans les moteurs à allumage par compression. Pour réduire les effets néfastes de l'utilisation des carburants

biodiesel comme carburant dans les moteurs à allumage par compression, certaines techniques telles que la recirculation des gaz résiduels de combustion (EGR), l'injection d'eau et de vapeur dans la chambre de combustion peuvent être utilisées. Lorsque l'EGR est utilisée pour minimiser les émissions de NO_x , les performances sont considérablement diminuées. Dans le cas d'injection d'eau dans la chambre de combustion pour réduire les émissions de NO_x , l'un des inconvénients importants est que l'eau condensée dans la chambre de combustion dégrade la qualité de lubrification et augmente le taux d'attrition des pièces mobiles des moteurs. Récemment, la méthode d'injection de vapeur est utilisée pour réduire les émissions de NO_x et pour améliorer les performances des moteurs. Les études montrent que la méthode d'injection de vapeur peut réduire les émissions de NO_x et de la consommation spécifique de carburant et peut améliorer la puissance effective. Les températures optimales de vapeur et les rapports massiques optimaux de vapeur peuvent être déterminés. La méthode d'injection de vapeur peut être mise en œuvre lors de la combustion des carburants biodiesel dans un moteur à allumage par compression afin d'améliorer les performances et de réduire les émissions de NO_x .

Dans cette thèse, une étude théorique de l'injection de vapeur dans le collecteur d'aspiration d'un moteur à allumage par compression fonctionnant avec le carburant biodiesel et le carburant diesel conventionnel est menée en utilisant un modèle thermodynamique de combustion à deux zones afin d'étudier les effets de l'injection de vapeur sur les performances et les caractéristiques de combustion et d'émissions de NO. L'objectif global de cette thèse est d'améliorer les performances de moteur à allumage par compression fonctionnant avec les carburants biodiesel et de réduire les émissions de NO. Il s'agit de mettre sur pied un modèle mathématique zéro dimensionnel pour le diagnostic et le contrôle des moteurs à allumage par compression qui fonctionne avec le carburant diesel conventionnel et avec les carburants biodiesel. Le modèle utilisé prend en compte l'influence du jet de carburant sur les caractéristiques de la cinétique de combustion et les performances notamment les émissions polluantes du moteur.

La présente thèse est faite en trois chapitres encadrés par une introduction générale et une conclusion générale et les perspectives. Le premier chapitre est consacré à la revue de la littérature portant sur les généralités sur les carburants biodiesel, les approches de modélisation thermodynamique et les techniques de réduction des oxydes d'azote. Quant au deuxième chapitre, le modèle de combustion à deux zones de Ferguson et Olikara et le modèle de combustion à une zone de Krieger et Borman sont analysés afin d'évaluer leurs limites et avantages pour faire un choix et la méthode d'injection de vapeur sont abordées. Et enfin, le troisième chapitre présente les résultats et discussion.

CHAPITRE I

1.1 Introduction

La demande mondiale d'énergie a connu une croissance exponentielle, ceci est dû à l'augmentation de la population mondiale. C'est le transport routier qui est le plus présent dans cette demande et récemment le transport aérien. Le pétrole reste toujours la source d'énergie la plus consommée à l'heure actuelle avec 33,6 % en 2018 soit environ 4,66 Gtep selon BP Statistical Review of Energy édition de juin 2019. Le secteur des transports est le premier en terme de consommation des produits pétroliers.

La demande en énergie et le développement sont à l'origine des problèmes environnementaux et de l'émission des gaz à effet de serre.

On a donc recours à des énergies de substitution renouvelables, non seulement en prévision de l'épuisement du pétrole mais aussi pour diminuer la dépendance des pays au pétrole et éviter les conséquences de tensions économiques et politiques avec les pays producteurs.

Les énergies renouvelables sont des sources d'énergie disponibles pendant une durée très supérieure à celle des civilisations humaines. Elles trouvent leur source dans des phénomènes divers qui se manifestent de façon plus ou moins continue ou se renouvellent périodiquement. Certaines résultent de l'énergie libre cinétique créée dans les mouvements météorologiques. L'énergie éolienne est fournie directement par la circulation atmosphérique. L'énergie hydraulique est assurée par les précipitations; cette dernière toutefois, sous sa forme de l'hydraulique de barrage, par accumulation de réserves d'eau, présente aussi un aspect d'énergie stockée, mais périodiquement renouvelable. La géothermie provient de la chaleur dégagée par les désintégrations radioactives des profondeurs de la Terre. L'énergie marémotrice résulte de l'attraction de la Lune. L'énergie solaire est directement issue des rayonnements émis par le Soleil; la biomasse l'est indirectement.

1.2 Potentiel des matières premières des carburants biodiesel

Toute source de corps gras peut être utilisée pour produire le carburant biodiesel. Cependant, certaines sources sont privilégiées plus que d'autres selon les pays. Les carburants biodiesel peuvent être une énergie alternative pour les combustibles fossiles. Cela peut réduire la consommation d'énergie fossile qui est également une question brûlante pour le réchauffement climatique. La [Figure 1.1](#) montre les matières premières disponibles qui sont couramment utilisées pour la production des carburants biodiesel.



Figure 1.1: Matières premières disponibles pour la production de carburant biodiesel.

1.3 Production des carburants biodiesel

Les carburants biodiesel attirent l'attention des énergéticiens en tant qu'une énergie renouvelable en raison de leur immense potentiel à faire partie d'un mix énergétique durable dans un avenir proche. Ils sont non toxiques, biodégradables et de nature plus écologique et ils peuvent être utilisés avec succès comme une énergie alternative au carburant diesel conventionnel dans les moteurs à allumage par compression. Les carburants biodiesel sont produits à partir d'huiles végétales comestibles et non comestibles, d'huiles de cuisson usagées et de graisses animales. La

plupart des huiles végétales peuvent être considérées comme une potentielle source renouvelable disponible au Cameroun. Le carburant biodiesel à base d'huiles végétales émet également moins de polluants que le carburant diesel conventionnel.

Les problèmes d'utilisation d'une huile végétale peuvent être résolus par les techniques comme la pyrolyse, la dilution avec des procédés de mélange d'hydrocarbures, la micro-émulsion ou la transestérification. La transestérification est le processus de production des carburants biodiesel le plus sûr et le plus conventionnel pour réduire la viscosité afin de surmonter le problème de la viscosité élevée.

1.3.1 Dilution et pyrolyse

Dans la méthode de dilution, les huiles végétales sont diluées par mélange avec du carburant diesel conventionnel à certaines proportions pour réduire leurs viscosités élevées. La pyrolyse est la décomposition de la matière organique en structures plus simples ou plus petites en utilisant l'énergie thermique dans un environnement sans oxygène. Il s'agit d'un procédé thermo-chimique à haut rendement mais non économique. La pyrolyse des triglycérides produit les alcènes, les alcanes, les alcadiènes, les composés aromatiques et les acides carboxyliques [1, 2].

1.3.2 Micro-émulsion

Les micro-émulsions peuvent être décrites comme la distribution thermodynamiquement stable, isotrope, transparente ou semi-transparente de l'huile, de l'eau, du surfactant et d'autres molécules amphiphiles [3]. La micro-émulsion est une autre méthode utilisée pour réduire la viscosité des huiles végétales et elle consiste à former des micro-émulsions avec des alcools à chaîne courte tels que le méthanol, l'éthanol et le butan-1-ol [4, 5]. Dans les micro-émulsions, le diamètre des gouttes varie de 100 à 1000 Å. Bien que des résultats positifs tels que les diminutions des viscosités et les améliorations des caractéristiques de pulvérisation des carburants obtenus par cette méthode aient été obtenus, il a été indiqué des réductions de nombre de cétane et de pouvoir calorifique inférieur dues à l'alcool inclus dans ces combustibles [6].

1.3.3 Transestérification

Dans la transestérification, les huiles ou les graisses et l'alcool à chaîne courte (méthanol et éthanol) en présence des catalyseurs (homogènes, hétérogènes et à base d'enzymes) sont estérifiés pour produire des esters comme produits principaux et la glycérine. De nos jours, cette méthode est la plus utilisée parmi les méthodes de production des carburants biodiesel. La méthode est préférée pour réduire la viscosité des huiles végétales [7–12]. La transestérification a une place importante dans la production des carburants biodiesel en raison de son efficacité en termes de production et de coût. Elle est réalisée dans des conditions normales et peut assurer la production des carburants biodiesel de meilleure qualité [13, 14]. Elle implique trois réactions réversibles par lesquelles le triglycéride est converti successivement en diglycéride, monoglycéride et glycérol consommant une mole d'alcool à chaque étape et libérant une mole d'ester [15–17]. Pour le coût et l'efficacité des carburants biodiesel, il est nécessaire d'analyser la relation des paramètres d'optimisation entre eux et d'appliquer une méthodologie d'optimisation appropriée [18–20]. Les

Figure 1.2 et Figure 1.3 présentent respectivement la production des biocarburants et l'étude comparative entre la production des carburants biodiesel et le pétrole, leurs usages et leurs influences sur l'environnement [21–23].

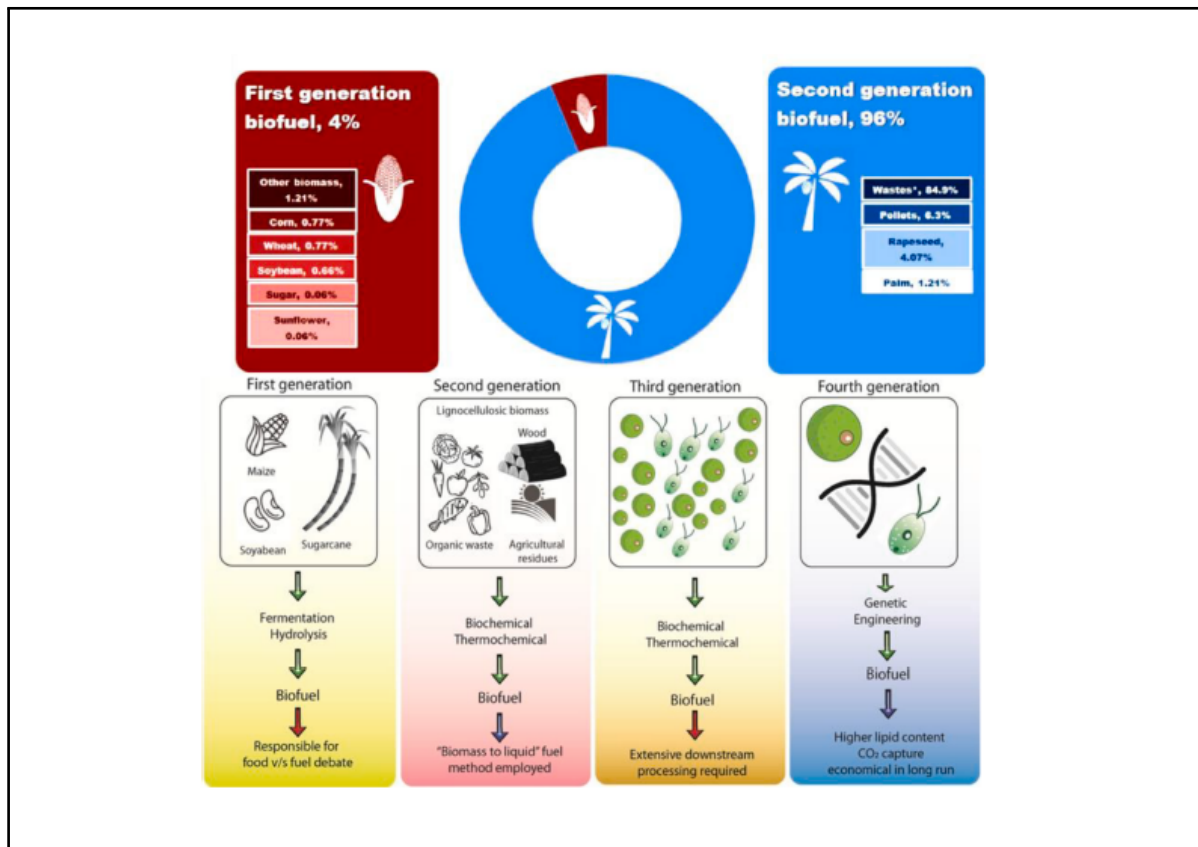


Figure 1.2: Production des biocarburants.

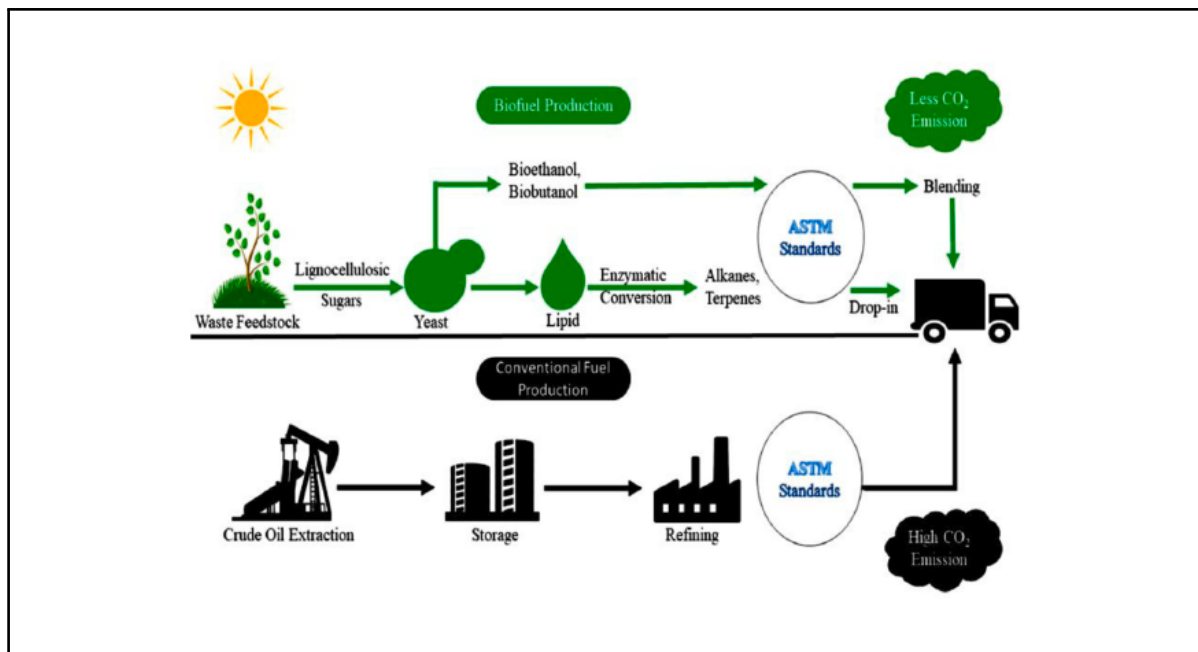


Figure 1.3: Étude comparative entre la production des biocarburants et le pétrole, leurs usages et leurs influences sur l'environnement.

Le Tableau 1.1 présente les avantages et les inconvénients de chaque méthode de production des carburants biodiesel.

Tableau 1.1: Comparaison de différentes méthodes de production des carburants biodiesel.

	Avantages	Inconvénients
Méthodes de production		
Transestérification	<ol style="list-style-type: none"> 1) les propriétés du carburant biodiesel sont plus proches de celles du carburant diesel ; 2) haute efficacité de conversion ; 3) bas prix ; 4) convient à la production industrialisée. 	<ol style="list-style-type: none"> 1) faible teneur en acides gras libres et en eau sont nécessaires (pour le catalyseur basique) ; 2) les polluants seront produits parce que les produits doivent être neutralisés et lavés ; 3) accompagnée de réactions secondaires ; 4) séparation difficile des produits de réaction.
Pyrolyse	<ol style="list-style-type: none"> 1) processus simple ; 2) pas de polluants. 	<ol style="list-style-type: none"> 1) une température élevée est requise ; 2) l'équipement est cher ; 3) faible pureté ; 4) mauvaise volatilité ; 5) mauvaise stabilité.
Micro-émulsion	<ol style="list-style-type: none"> 1) pas de catalyseur ; 2) temps de réaction court ; 3) conversion élevée ; 4) bonne adaptabilité. 	<ol style="list-style-type: none"> 1) une température et une pression élevées sont requises ; 2) le coût de l'équipement est élevé ; 3) consommation d'énergie élevée.

1.4 Propriétés physiques et chimiques des carburants biodiesel

Les propriétés des carburants biodiesel sont affectées par différents facteurs tels que la qualité de la matière première et la composition des acides gras, la méthode de production, le processus de raffinage et les paramètres finaux de production. Les propriétés des carburants biodiesel peuvent être classées selon de nombreux critères. Les plus importants sont l'influence sur les événements qui surviennent dans les moteurs (qualité de l'allumage, facilité d'utilisation, formation et combustion du mélange air-carburant, formation et qualité des gaz d'échappement, pouvoir calorifique), les propriétés à basse température (point de trouble, point de colmatage du filtre à froid), les propriétés de transport et de stockage (stabilité à l'oxydation et à l'hydrolyse, point éclair, période d'induction, température limite d'infiltration) et l'usure des pièces des moteurs (lubrification, effet nettoyant, viscosité, compatibilité avec les matériaux utilisés dans la production du système d'alimentation en carburant). Les propriétés des carburants biodiesel doivent se situer dans les intervalles des valeurs standards pour pouvoir être utilisés comme carburant commercial. Les normes les plus utilisées pour les carburants biodiesel sont les normes EN 14214 et ASTM D6751. Le [Tableau 1.2](#) répertorie les normes EN 14214 et ASTM D6751 des carburants biodiesel.

Tableau 1.2: Spécifications des carburants biodiesel selon les normes EN 14214 et ASTM D6751.

Propriétés du carburant	ASTM D6751	EN 14214
Masse volumique à 15 °C ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	880	860 – 900
Viscosité cinématique à 40 °C ($\text{mm}^2\cdot\text{s}^{-1}$)	1,9 – 6,0	3,5 – 5,0
Nombre de cétane	min. 47	min. 51
Point éclair (°C)	min. 93	min. 101
Soufre % (mg/kg)	max. 0,05	max. 10
Stabilité à l'oxydation à 110 °C (h)	min. 3	min. 6

1.4.1 Masse volumique

La masse volumique des carburants biodiesel, l'une des principales caractéristiques des carburants, doit être comprise entre 860 et 900 kg/m^3 à 15 °C selon la norme EN 14214. La masse volumique est directement liée aux propriétés de carburant telles que l'indice de cétane et le pouvoir calorifique [24]. Elle est également largement utilisée dans la modélisation, l'exploitation et la conception des procédés de combustion [25]. De plus, les valeurs de masse volumique des carburants sont utilisées pour calculer l'indice de cétane [6]. Les masses volumiques des carburants biodiesel sont généralement supérieures à celle du carburant diesel conventionnel et dépendent de la composition en acides gras de la matière première et de la pureté de carburant [26]. Les masses volumiques des carburants biodiesel augmentent lorsque la longueur de la chaîne d'hydrocarbure dans la structure des acides gras diminue et diminuent lorsque le nombre de doubles liaisons augmente tandis que la présence des résidus de faibles masses volumiques dans le carburant, de même que le méthanol, conduit à réduire les masses volumiques. D'autre part, la masse volumique est une caractéristique du contenu énergétique de carburant. La masse volumique élevée signifie un potentiel énergétique élevé. Bien que le contenu énergétique des carburants biodiesel soit faible par rapport à celui du carburant diesel conventionnel, les masses volumiques des carburants biodiesel sont plus élevées que celle du carburant diesel conventionnel et, de ce fait, la

différence est faible [27]. La masse volumique élevée indique que le glycérol ne peut pas être éliminé suffisamment dans la réaction de transestérification [28]. La masse volumique élevée permet au carburant d'être pulvérisé en grandes quantités et de former un mélange riche dans la chambre de combustion. Dans ce cas, le mélange riche conduit à une augmentation de la température de paroi de la chambre de combustion et le délai d'auto-inflammation diminue. L'augmentation de puissance des moteurs à allumage par compression est directement proportionnel à la quantité de carburant fourni dans la chambre de combustion. Bien que la quantité de carburant introduit dans la chambre de combustion augmente lorsque la puissance requise augmente, l'homogénéité du mélange air-carburant formé dans la chambre de combustion diminue et les dépôts de carbone augmentent en fin de combustion [29]. Par conséquent, une masse volumique plus élevée a également un impact sur l'efficacité de l'atomisation du carburant [30]. Cheikh et al. [31] ont signalé que le débit massique de carburant envoyé par la pompe d'injection augmentait en fonction de la masse volumique élevée des carburants biodiesel et de mélanges (860 kg/m^3 , 849 kg/m^3 et 846 kg/m^3) avec de carburant diesel conventionnel (840 kg/m^3). Ors [29] a déclaré que la masse volumique, la viscosité et le pouvoir calorifique sont des propriétés qui affectent directement les performances du moteur allumage par compression et les émissions à l'échappement. Attia et Hassaneen [32] ont conclu qu'une faible masse volumique de carburant diminuait la puissance du moteur à allumage par compression et les émissions à l'échappement.

1.4.2 Viscosité cinématique

La viscosité cinématique est l'une des propriétés les plus importantes des carburants biodiesel. Elle est la résistance d'un fluide à l'écoulement et est calculée en fonction du débit à travers l'orifice d'une taille donnée [12, 33]. La viscosité cinématique à 40°C des carburants biodiesel peut être déterminée conformément à la norme ASTM D445 ($1,9 \text{ mm}^2/\text{s}$ à $6,0 \text{ mm}^2/\text{s}$) ou à la norme EN ISO 3104 ($3,50 \text{ mm}^2/\text{s}$ à $5,00 \text{ mm}^2/\text{s}$). La limite supérieure des valeurs de la viscosité cinématique garantit que le carburant peut s'écouler en douceur pendant le démarrage des moteurs par temps froid tandis que la limite inférieure empêche les potentielles pertes de puissance dans les moteurs. Une viscosité cinématique élevée du carburant est un problème majeur lors de l'utilisation d'huile végétale pure comme carburant dans les moteurs à allumage par compression [34]. La majorité des chercheurs [35–38] a recommandé les modifications des réglages des moteurs allumage par compression ou la réduction des viscosités cinématiques des huiles végétales pour améliorer les propriétés des carburants issus des huiles végétales et des graisses animales. La transestérification est la méthode la plus préférée pour obtenir des carburants biodiesel. En raison de la réaction de transestérification qui est réversible et limitée, le glycérol reste dans les carburants biodiesel ce qui entraîne une viscosité cinématique élevée. La viscosité cinématique des carburants biodiesel est environ 1,6 fois supérieure à celle du carburant diesel conventionnel. Ce rapport augmente à basse température [39].

Les influences de la viscosité cinématique peuvent être observées dans la qualité de l'atomisation, la combustion et l'usure du moteur comme illustré sur la [Figure 1.4](#) [11].

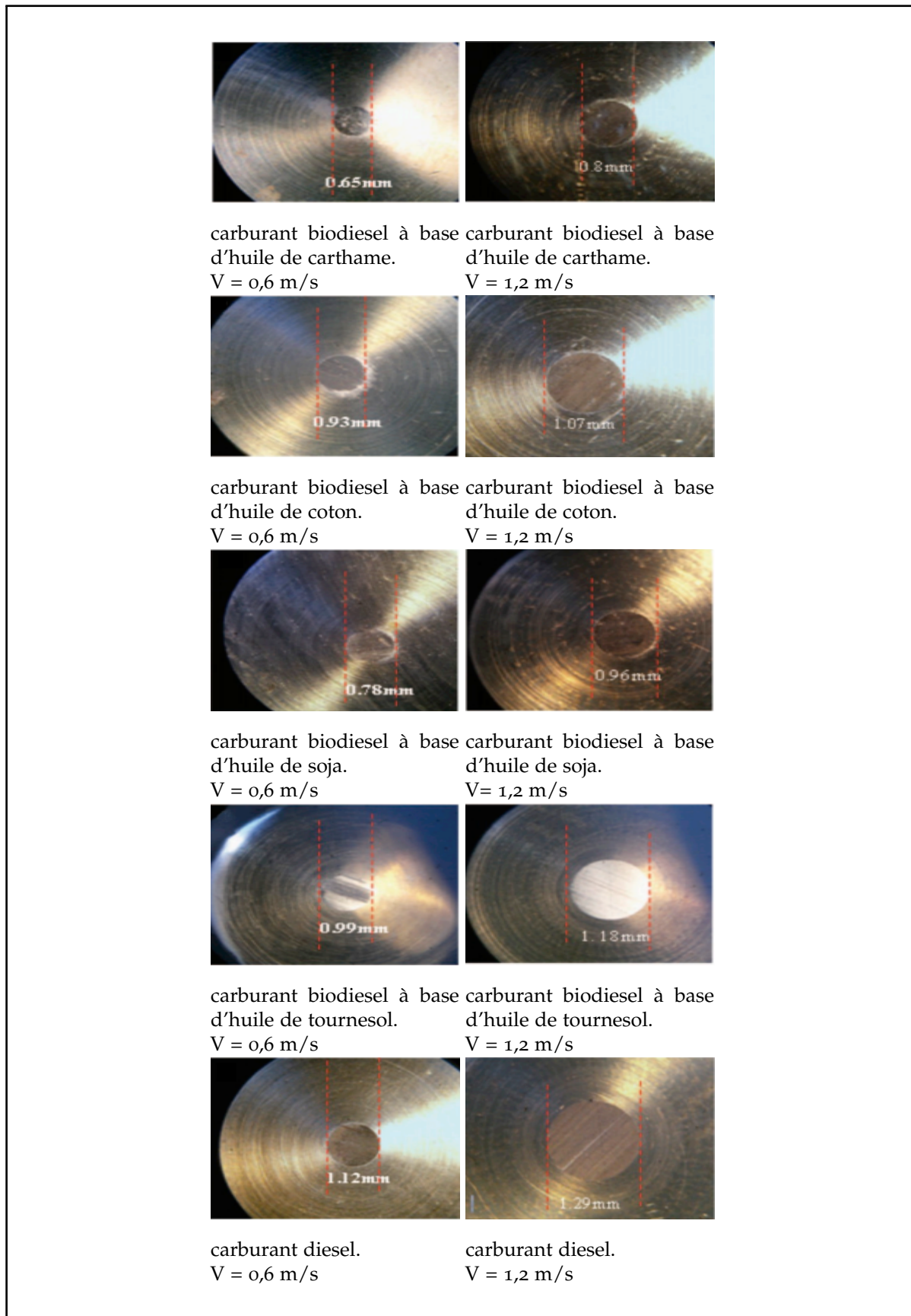


Figure 1.4: Diamètres des traces d'usure sur la goupille sous une condition de charge de 300 N avec des vitesses de glissement.

L'un des principaux inconvénients de l'utilisation des carburants biodiesel dans les moteurs à allumage par compression est la viscosité cinématique élevée. À ces égards, la viscosité cinéma-

tique plus faible est attendue pour les carburants biodiesel. Cependant, la viscosité cinématique inférieure provoque une fuite à travers le joint à l'intérieur de la pompe d'injection [19, 20, 40, 41]. Les recherches [42–44] ont montré que les valeurs de couple effectif et de puissance effective des moteurs à allumage par compression augmentent lorsque les carburants biodiesel sont utilisés dans les moteurs à allumage par compression en raison de leurs viscosités cinématiques élevées par rapport à celle du carburant diesel conventionnel. En outre, la viscosité cinématique élevée augmente la pénétration et la pulvérisation de carburant et améliore par conséquent le rapport de mélange air-carburant. Cependant, les recherches [16, 45] ont montré que la valeur élevée de viscosité cinématique du carburant conduit à diminuer l'efficacité de la combustion en raison de la mauvaise injection de carburant et donc la valeur de puissance effective diminue légèrement.

1.4.3 Volatilité

La courbe de distillation

La courbe de distillation d'un produit donne l'évolution du volume de ce produit évaporé en fonction de sa température. Les paramètres caractéristiques de distillation déterminent l'inflammabilité du produit ainsi que sa tendance à la formation des dépôts lors de sa combustion dans le cas des produits pétroliers. De ce fait, les valeurs limites des points caractéristiques de la courbe de distillation sont fixées par des spécifications. La température maximale de distillation pour le carburant diesel conventionnel se situe autour de 350 °C. Cette méthode est inadaptée dans le cas des huiles végétales. Celles-ci ne se distillent pratiquement pas à la pression atmosphérique. Elles se comportent comme des corps purs avec des températures de distillation à la pression atmosphérique proche de 350 °C.

La tension superficielle

C'est l'une des caractéristiques du carburant qui détermine les critères de transition entre les différents régimes de désintégration du jet de carburant. Une valeur relativement élevée de la tension superficielle est défavorable à l'obtention du régime d'atomisation. Sa valeur est plus élevée pour les huiles végétales comparée à celle du carburant diesel conventionnel. Elle décroît avec la température.

Le point éclair

C'est la température minimale à laquelle les vapeurs émises par un produit, dans des conditions normalisées, s'enflamment en présence d'une flamme. Le point éclair des carburants est une caractéristique qui affecte la sécurité du transport, du stockage et de l'utilisation [46]. De plus, un point éclair plus élevé empêche l'inflammation imprévue de carburant pendant la combustion [47]. Une valeur minimale est exigée pour limiter les risques d'incendie. Sa valeur n'a pas d'influence directe particulière sur les rendements de combustion ou sur les performances des moteurs et des brûleurs, c'est plutôt un paramètre de sécurité. Pour le carburant diesel conventionnel, sa valeur est généralement inférieure à 100 °C tandis que pour les points éclair des carburants biodiesel doivent être au minimum de 101 °C selon la norme EN 14214. Les recherches [48–50] ont montré que les carburants biodiesel provenant de différentes matières premières ont des points éclair plus élevés que celui du carburant diesel conventionnel.

Le méthanol, l'éthanol, le propanol, le butanol et le pentanol ont été utilisés dans la production des carburants biodiesel comme alcools [51,52]. Les points éclair du méthanol, de l'éthanol, du propanol, du butanol et du pentanol sont respectivement de 11 à 12, 17, 11, 7, 35 à 37 et 49 °C [53]. Si l'alcool n'est pas complètement éliminé du carburant biodiesel pendant sa production, le point éclair peut être bas.

1.4.4 Points de trouble et d'écoulement

Ces deux caractéristiques déterminent principalement le comportement à froid du carburant. Le point de trouble est la température à laquelle, un produit refroidi, dans des conditions normalisées, commence à présenter des cristaux. Sa valeur détermine la tendance du produit à colmater les filtres.

Quant au point d'écoulement, il représente la température la plus basse à laquelle un produit refroidi, dans des conditions normalisées, est susceptible de couler encore. Il détermine les conditions de stockage, de transport et de pompage du carburant. Plus une huile végétale est saturée, plus ces deux caractéristiques présentent des valeurs élevées. À l'opposé, des huiles insaturées telles les huiles de colza et de coton qui ont des points de trouble et d'écoulement relativement bas.

1.4.5 Pouvoir calorifique

Le pouvoir calorifique du combustible est la quantité d'énergie fournie par unité de masse. Le pouvoir calorifique inférieur du carburant est important dans les essais de performance des moteurs. En effet, le pouvoir calorifique inférieur du combustible est pris en compte car l'eau est toujours présente sous forme de vapeur à la fin de la combustion. Le pouvoir calorifique est un critère pour un fonctionnement optimal et pour une bonne qualité de fonctionnement des moteurs. Le carburant étant une mesure de la quantité d'énergie, il est souhaitable d'avoir un pouvoir calorifique élevé. De plus, au fur et à mesure que la longueur de chaîne d'hydrocarbures saturés augmente, le pouvoir calorifique augmente. Les valeurs de pouvoir calorifiques de divers carburants biodiesel se sont révélées différentes. Par exemple, le pouvoir calorifique de carburant biodiesel à base d'huile de karanja varie de 36,10 à 39,19 MJ/kg [54–57], le pouvoir calorifique de carburant biodiesel à base d'huile de palme varie de 38,05 MJ/kg à 39,6 MJ/kg [58,59], le pouvoir calorifique de carburant biodiesel à base d'huile de canola varie de 38,96 MJ/kg à 39,90 MJ/kg, le pouvoir calorifique de carburant biodiesel à base d'huile de *Rhazya stricta* est de 39,55 MJ/kg [60] et le pouvoir calorifique de carburant biodiesel à base d'huile de soja varie de 37,40 MJ/kg à 38,81 MJ/kg [61,62]. Cependant, il a été indiqué que les pouvoirs calorifiques des carburants biodiesel obtenus à partir de différentes matières premières sont inférieurs à celui du carburant diesel conventionnel. Les carburants biodiesel ont une teneur en énergie inférieure d'environ 10 % [63] à 12 % [64] en masse à celle du carburant diesel conventionnel en raison de la quantité importante d'oxygène.

Le pouvoir calorifique supérieur (PCS) peut être estimé en fonction de l'indice de saponification (I_S) et de l'indice d'iode (I_i) [65–67], les [Équation 1.1](#) à [Équation 1.3](#).

$$\text{PCS} = 49,43 - (0,041 \times I_S + 0,015 \times I_i) \quad (1.1)$$

$$I_i = \sum_i \frac{254 \times D \times A_i}{M_i} \quad (1.2)$$

$$I_S = \sum_i \frac{560 \times A_i}{M_i} \quad (1.3)$$

où I_i et A_i sont respectivement la valeur de l'indice d'iode et le pourcentage de chaque acide gras. D est le nombre de doubles liaisons et M_i est la masse molaire moléculaire de chaque acide gras. Le pouvoir calorifique inférieur (PCI) donné par l'Équation 1.4 peut être estimé en fonction du pouvoir calorifique supérieur (PCS) et de la chaleur latente de vaporisation (L_v).

$$PCI = PCS - 5 \times H\% \times M_{H_2O} \times L_v \quad (1.4)$$

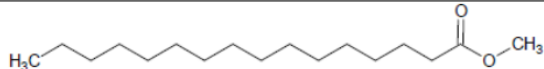
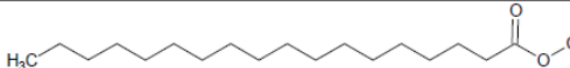
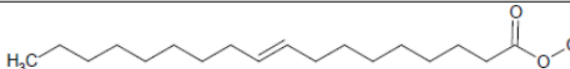
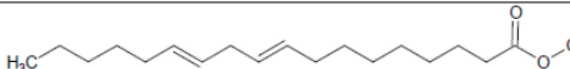
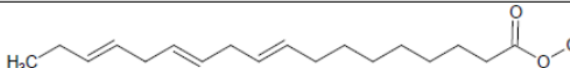
où $H\%$ est la teneur en hydrogène de l'huile utilisée dans la production du carburant biodiesel, M_{H_2O} est la masse molaire moléculaire de l'eau et L_v est la chaleur latente de vaporisation.

1.4.6 Composition des carburants biodiesel

Les carburants biodiesel sont composés d'un mélange d'esters d'huiles végétales renfermant les acides gras saturés et insaturés, contenus à des proportions variables suivant la matière première utilisée pour la production du carburant biodiesel.

Le Tableau 1.3 illustre les noms et les formules développées de principaux esters méthyliques d'huiles végétales constituant les carburants biodiesel [68]. Les carburants biodiesel qui ont les meilleures caractéristiques sont ceux qui ont les fortes concentrations en acides gras monoinsaturés comme l'acide oléique. On note de ces matières premières à hautes teneurs en acide oléique, les huiles d'olive, d'amende, de maïs, de colza et de tournesol [69]. L'huile insaturée est siccatrice donc peu résistante à l'oxydation tandis que l'huile saturée est résistante à l'oxydation mais elle est souvent solide à température ambiante (20 °C). Généralement, lorsque le degré d'insaturation augmente, le taux d'oxydation d'huile augmente aussi.

Tableau 1.3: Principaux EMHV contenus dans les carburants biodiesel.

Nom de l'EMHV	Formule développée	Désignation technique
Palmitate de méthyle (C ₁₇ H ₃₄ O ₂)		C16:0
Stéarate de méthyle (C ₁₉ H ₃₈ O ₂)		C18:0
Oléate de méthyle (C ₁₉ H ₃₆ O ₂)		C18:1
Linoléate de méthyle (C ₁₉ H ₃₄ O ₂)		C18:2
Linoléate de méthyle (C ₁₉ H ₃₂ O ₂)		C18:3

1.4.7 Indice de cétane

L'indice de cétane est une mesure de la qualité d'allumage du carburant diesel conventionnel. L'indice de cétane du carburant biodiesel est plus élevé que celui de carburant diesel conventionnel, il a une meilleure capacité d'allumage que le carburant diesel conventionnel. Les chaînes carbonées supérieures d'acides gras et les groupes esters du carburant biodiesel conduisent à un indice de cétane plus élevé. Le nombre de doubles liaisons affecte négativement l'indice de cétane [70]. Un faible indice de cétane entraîne une augmentation des émissions de HC et de PM. L'indice de cétane du carburant biodiesel doit être supérieur à 51 selon la norme TS EN 14214. Le nombre de cétane du carburant biodiesel peut être calculé à partir de l'Équation 1.5 [65,67,71].

$$CN = 46,3 + 5458/I_S - 0,225 \times I_i \quad (1.5)$$

L'expression de l'indice de cétane peut être utilisée en raison de la mesure coûteuse du nombre de cétane. Dans ce but, malgré le développement de nombreuses expressions, la norme la plus couramment utilisée est la norme ASTM D4737 et l'indice de cétane est donné par l'Équation 1.6.

$$I_C = 45,2 + 0,0892T_{10N} + (0,131 + 0,901B)T_{50N} + (0,523 - 0,420B)T_{90N} + 0,00049(T_{10N}^2 - T_{90N}^2) + 107B + 60B^2 \quad (1.6)$$

où I_C est l'indice de cétane, $T_{10N} = T_{10} - 215$, $T_{50N} = T_{50} - 260$, $T_{90N} = T_{90} - 310$. T_{10} , T_{50} et T_{90} sont des valeurs de température pour lesquelles 10 %, 50 % et 90 % de carburants sont récupérés respectivement [72]. $B = \exp(-3,5(\rho - 0,85)) - 1$ avec ρ la masse volumique du carburant à 15 °C en kg/dm³.

1.4.8 Stabilité à l'oxydation

La stabilité à l'oxydation est la résistance aux changements chimiques qui se produisent pendant le stockage prolongé du carburant biodiesel. L'oxydation des carburants biodiesel est causée par les changements chimiques résultant du contact avec l'air. Les doubles liaisons des esters méthyliques d'acides gras insaturés sont connues pour être sensibles à l'oxydation. Si la stabilité à l'oxydation des carburants biodiesel est insuffisante, des valeurs standards peuvent être obtenues en utilisant des antioxydants [73]. La stabilité à l'oxydation du carburant biodiesel doit être au moins 8 h selon la norme européenne sur le carburant biodiesel. Les huiles végétales ou les carburants biodiesel sont classés en trois catégories selon l'indice de stabilité à l'oxydation. Ces catégories sont désignées comme les meilleures huiles, les huiles modérées et les huiles médiocres. Les indices de stabilité à l'oxydation des meilleures huiles, des huiles modérées et des huiles médiocres sont respectivement supérieurs à 3 h, entre 2 h et 3 h et inférieurs à 2 h [74]. La stabilité à l'oxydation (OS) peut être prédite en utilisant l'Équation 1.7 [75].

$$OS = -0,0518 \times DI + 11,121 \quad (1.7)$$

où DI est le degré d'insaturation obtenu à partir de pourcentage massique de chaque acide gras monoinsaturé et polyinsaturé de l'échantillon [76, 77], et il est donné par l'Équation 1.8 :

$$DI = (\text{monoinsaturé Cn:1, mass \%}) + 2(\text{polyinsaturé Cn:2, mass \%}) + 3(\text{polyinsaturé Cn:3, mass \%}) \quad (1.8)$$

1.4.9 Indice d'acide

L'indice d'acide d'un lipide est la masse d'hydroxyde de potassium KOH, exprimée en milligrammes (mg), nécessaire pour neutraliser l'acidité libre contenue dans un gramme de corps gras. Les composés acides dans le carburant biodiesel peuvent être présents sous forme d'acides gras libres, d'autres acides organiques et de sous-produits d'oxydation résultant des étapes d'hydrolyse ou d'hydrolyse finale des acides minéraux restants de l'étape de production. Les acides gras libres (AGL) peuvent être déterminés en utilisant l'Équation 1.9.

$$AGL = \frac{(v - b) \times N \times 28,2}{m} \quad (1.9)$$

où v et b sont respectivement le volume de la solution de titrage et du blanc. m est la masse de l'échantillon d'huile et N est la normalité de la solution de titrage.

La forte acidité du carburant biodiesel montre que la formation des sédiments et la corrosion peuvent augmenter dans le système d'alimentation en carburant. L'indice d'acide dans le carburant biodiesel doit être 0,50 mg KOH/g au maximum selon la norme EN 14214.

1.4.10 Indice d'iode

L'indice d'iode d'un lipide est la masse de diiode, exprimée en centigrammes (cg), capable de se fixer sur les insaturations des acides gras contenus dans cent grammes de matière grasse. L'indice d'iode est une mesure de l'insaturation totale du carburant et varie en fonction de l'huile utilisée dans la production des carburants biodiesel. L'indice d'iode du carburant biodiesel ne doit pas dépasser 120 g d'iode/100 g selon la norme EN 14214. Une insaturation élevée conduit à la réduction de l'indice de cétane et de la stabilité à l'oxydation du carburant biodiesel. Au fil du temps, la diminution du nombre d'iode dans le carburant entraîne une augmentation de la dégradation oxydative [78]. La détermination de l'indice d'iode est utile pour la prévention des problèmes des moteurs (polymérisation sur les injecteurs, segments de piston et rainures, formation de résidus). Des indices d'iode élevés sont associés à divers produits de dégradation qui affectent négativement le fonctionnement des moteurs (comme l'augmentation des résidus de carbone, le colmatage des trous des buses ou des dommages à la chambre de combustion) et une qualité de lubrification réduite [79, 80].

Prankl et Woergetter [81] ont examiné les effets de différents indices d'iode sur les performances du moteur à allumage par compression en testant le carburant biodiesel à base d'huile de lin (182 g d'iode/100 g), le carburant biodiesel à base d'huile de tournesol (100 g d'iode/100 g) et leurs mélanges dans un moteur à allumage par compression. Ils ont constaté qu'après 250 h d'expérimentation, aucun résidu visible ne s'était formé dans la chambre de combustion, dans les soupapes et dans les injecteurs. Cependant, ils ont observé que les résidus augmentaient dans les segments de piston avec l'augmentation de l'indice d'iode. Rao et al. [82] ont étudié dans un

moteur à allumage par compression les carburants biodiesel qui ont différentes valeurs d'iode, comme le carburant biodiesel à base d'huile de noix de coco (10 g d'iode/100 g), le carburant biodiesel à base d'huile de palme (52 g d'iode/100 g), le carburant biodiesel à base d'huile de mahua (74 g d'iode/100 g), le carburant biodiesel à base d'huile de karanja (81 g d'iode/100 g), le carburant biodiesel à base d'huile de jatropha (93 g d'iode/100 g), le carburant biodiesel à base d'huile de son de riz (100 g d'iode/100 g) et le carburant biodiesel à base d'huile de sésame (110 g d'iode/100 g). En conséquence, ils ont révélé que les carburants biodiesel à base d'huile de noix de coco et d'huile de palme produisaient des émissions de NO_x inférieures à celles du carburant diesel conventionnel et ont également observé l'augmentation des émissions de NO_x avec l'augmentation du nombre d'iode. Si l'indice d'iode est supérieur à 50 g d'iode/100 g, la durée de vie du moteur à allumage par compression peut être réduite [83]. Pour cette raison, les huiles à faible indice d'iode devraient être préférées dans la production de carburant biodiesel.

1.5 Utilisation des carburants biodiesel

1.5.1 Carburants des moteurs à allumage par compression

Le carburant biodiesel est utilisé dans les moteurs à allumage par compression car il a des propriétés presque similaires à celles du carburant diesel conventionnel. Le pouvoir calorifique du carburant biodiesel varie de 39 MJ/kg à 41 MJ/kg et est légèrement inférieur à celui de l'essence (46 MJ/kg), à celui du carburant diesel conventionnel (43 MJ/kg) ou à celui du pétrole (42 MJ/kg) mais supérieur à celui du charbon qui varie de 32 MJ/kg à 37 MJ/kg. Azad et al. [84] ont étudié le carburant biodiesel comme carburant pour les véhicules et ont conclu que presque tous les types de carburants biodiesel à base d'huiles végétales peuvent être utilisés comme une énergie alternative au carburant diesel conventionnel et ont recommandé que les huiles de colza et de palme puissent être les plus appropriées car ces huiles ne contiennent pas de substances cancérigènes et leurs teneurs en soufre sont également inférieures à celle du carburant diesel conventionnel. Le carburant biodiesel est hautement biodégradable et a un pouvoir lubrifiant lorsqu'il est utilisé dans un moteur à allumage par compression. De plus, le carburant biodiesel a un bon potentiel et une facilité d'utilisation pratique en raison de la renouvelabilité et des propriétés opérationnelles presque similaires à celles du carburant diesel conventionnel.

Nabi et al. [85] ont étudié l'effet du carburant biodiesel à base d'huile de karanja sur les performances et sur les émissions à l'échappement d'un moteur à allumage par compression et ont rapporté que, par rapport au carburant diesel conventionnel, le B100 a réduit les émissions de CO de 50 % tandis que les émissions de NO_x ont augmenté de 15 % en condition de charge élevée. La présence d'oxygène est le principal facteur de réduction des émissions de CO et de l'augmentation des émissions de NO_x et les faibles composés aromatiques dans la structure moléculaire du carburant biodiesel à base d'huile de karanja peut être un facteur supplémentaire de réduction de ces émissions. Les auteurs ont également signalé que le rendement thermique effectif est presque similaire à celui du carburant diesel conventionnel. Hossain et al. [86] ont étudié les émissions d'un moteur à allumage par compression alimenté par un mélange de carburant biodiesel à base d'huile de noix de coco et de carburant diesel conventionnel et ils ont conclu que les émissions produites à partir du carburant biodiesel sont plus propres que celles du carburant diesel conventionnel car les émissions des particules, la suie et le monoxyde de carbone sont plus faibles mais les émissions de

NO_x sont bien plus élevés. Hasib et al. [87] ont étudié l'effet du mélange de carburant biodiesel à base d'huile de moutarde et de carburant diesel conventionnel sur les performances et les émissions à l'échappement d'un moteur à allumage par compression à quatre temps et ont rapporté que B30 et B40 ont une température à l'échappement plus basse ce qui réduit les émissions de HC, de PM, de NO_x et de l'efficacité du moteur à allumage par compression par rapport au carburant diesel conventionnel. Zaglul Shahadat et al. [88] ont mené une expérience sur les émissions à l'échappement avec du carburant diesel conventionnel et des mélanges de carburant diesel conventionnel et de carburant biodiesel à base d'huile de neem dans un moteur à allumage par compression à aspiration naturelle monocylindre à quatre temps et ont montré que lorsque les pourcentages de mélange augmentent, les émissions de NO_x augmentent. Cependant, si l'entrée est préchauffée, une réduction simultanée des émissions de NO_x et du CO peut être obtenue. Ils ont également signalé que si le B20 est préchauffé, de meilleurs paramètres d'émission que d'autres, même pour le diesel conventionnel, peuvent être atteints. Nabi et al. [89] ont également étudié les émissions à l'échappement avec du carburant diesel conventionnel et des mélanges de carburant diesel conventionnel et de carburant biodiesel à base d'huile de neem dans un moteur à allumage par compression à injection directe à quatre temps. Ils ont montré que, par rapport au carburant diesel conventionnel, les émissions de NO_x ont augmenté de 5 % et les émissions de CO sont réduites de 4 % avec 15 % d'ester méthylique d'huile de neem. Ils ont conclu que les émissions de mélange d'ester méthylique d'huile de neem et de carburant diesel conventionnel n'ont pas de différence significative avec le fonctionnement du carburant diesel conventionnel et la présence de l'oxygène entraînant une diminution des émissions à l'échappement.

Rahman et al. [90] ont étudié les émissions à l'échappement d'un moteur à allumage par compression à quatre temps à injection directe et à aspiration naturelle fonctionnant avec des mélanges d'huile de lin et d'huile de moutarde de divers pourcentages avec du carburant diesel conventionnel. Ils ont également signalé que, par rapport au carburant diesel conventionnel, les émissions de NO_x de ce mélange étaient un peu plus élevées, les émissions de CO étaient plus faibles en raison de la présence de l'oxygène dans le carburant biodiesel et qu'une amélioration significative des émissions de gaz à l'échappement a été obtenue avec des huiles estérifiées et leurs mélanges avec du carburant diesel conventionnel peuvent être effectivement utilisés dans les moteurs à allumage par compression comme carburants alternatifs appropriés. Nabi et al. [91] ont étudié les émissions à l'échappement des mélanges de carburant biodiesel à base d'huile de neem dans un moteur à allumage par compression et ont constaté que, par rapport au carburant diesel conventionnel, le B50 réduisait les émissions de PM et de CO de 30 % et de 31 % respectivement alors qu'une augmentation de 10 % des émissions de NO_x a été observée avec un mélange similaire parce que l'oxygène est présent dans la structure moléculaire. En outre, une autre raison de cette réduction est la faible teneur en composés aromatiques des mélanges de carburant biodiesel et de carburant diesel conventionnel. À l'inverse, le B50 a entraîné une augmentation de 10 % des émissions de NO_x et une réduction des émissions de CO et de particules de 31 % et de 34 % respectivement par rapport au carburant diesel conventionnel. Ils ont également observé que le dépôt de carbone sur la buse de l'injecteur est plus faible dans tous les mélanges de carburant biodiesel et de carburant diesel conventionnel. Azad et al. [92] ont étudié les performances et les émissions d'un moteur monocylindre à allumage par compression à injection directe en utilisant des mélanges de carburant biodiesel à base d'huile de jatropha et de carburant diesel conventionnel. Ils ont signalé que les émissions de NO_x du carburant diesel conventionnel sont inférieures à celles des mélanges de carburant biodiesel à base d'huile de jatropha et de carburant diesel

conventionnel. La teneur en oxygène est plus élevée dans le carburant biodiesel que dans le carburant diesel conventionnel, la chaleur produite lors de la combustion est légèrement plus élevée. Pour cette raison, la vitesse de formation de NO_x dans les mélanges des carburants biodiesel et de carburant diesel conventionnel est plus élevée que celle de carburant diesel conventionnel. La vitesse de formation de CO pour le carburant diesel conventionnel est plus que la vitesse de formation de CO des mélanges des carburants biodiesel et de carburant diesel conventionnel. Les mélanges de carburant biodiesel et de carburant diesel conventionnel contiennent plus d'oxygène dans leur structure moléculaire ; et leur combustion est plus complète. Pour cette raison, la vitesse de formation de CO des mélanges de carburant biodiesel et de carburant diesel conventionnel est inférieure à celle du carburant diesel conventionnel.

Nabi et Najmul Hoque [93] ont produit le carburant biodiesel à base d'huile de lin et ont étudié les performances d'un moteur à allumage par compression avec le carburant diesel conventionnel et le carburant biodiesel. Ils ont signalé que le rendement thermique effectif du carburant biodiesel est presque similaire à celui du carburant diesel conventionnel et que les rendements thermiques effectifs des mélanges des carburants biodiesel et de carburant diesel conventionnel, (B10 et B20), sont 1 % et 2 % inférieurs à celui du carburant diesel conventionnel en raison de sa faible volatilité, de sa viscosité cinématique et de sa masse volumique plus élevées. Les émissions de CO ont été réduites avec les mélange des carburants biodiesel et de carburant diesel conventionnel tandis que les émissions de NO_x ont augmenté avec les mélange des carburants biodiesel et de carburant diesel conventionnel par rapport au carburant diesel conventionnel. Les mélanges des carburants biodiesel et de carburant diesel conventionnel, (B10 et B20), ont réduit les émissions de CO respectivement de 9 % et de 23 %. Cependant, les émissions de NO_x sont 6 % et 13 % plus élevées que celles du carburant diesel conventionnel. Roy [94,95] a étudié la possibilité d'utiliser le carburant biodiesel dans un moteur à allumage par compression à injection directe et a signalé, cependant, que le rendement thermique effectif et la consommation spécifique de carburant (CSF) de B100 ont été négativement affectés. Une réduction significative des émissions de CO et de PM a été obtenue avec le B100 et le B20 avec une augmentation des émissions de NO_x par rapport au carburant diesel conventionnel. Roy et al. [95] ont étudié les performances et les émissions d'un moteur à allumage par compression à injection directe alimenté par le carburant diesel conventionnel et un mélange de 20 % à 80 % de carburant biodiesel à base d'huile de soja et de carburant diesel conventionnel dans diverses conditions de charge et de régimes moteur sans et avec faible pourcentage de recirculation des gaz résiduels de combustion (EGR). Ils ont montré que le rendement thermique effectif du B20 était presque similaire ou inférieur et que dans des conditions de charge faible sans recirculation des gaz résiduels de combustion (EGR), les émissions de CO étaient plus élevées et les émissions de NO_x étaient plus faibles avec le B20 qu'avec le carburant diesel conventionnel. Ils ont également signalé que dans des conditions de charge élevée, les émissions de NO_x sont devenues plus élevées et les émissions de CO ont diminué de manière significative avec le B20. Ils ont suggéré que, B20 avec 10 % de recirculation des gaz résiduels de combustion (EGR), peut être utilisé dans le moteur à allumage par compression sans aucune pénalité significative dans les performances du moteur et avec des réductions plus élevées des émissions de NO_x .

1.5.2 Préoccupations environnementales

Les politiques énergétiques actuelles abordent les problèmes environnementaux, notamment l'augmentation des approvisionnements en énergie renouvelable et l'encouragement d'une utilisation plus propre et plus efficace de l'énergie afin de réduire les émissions des polluants notamment les gaz à effet de serre responsables de l'effet de serre dont les conséquences environnementales sont bien établies. Les pays à haut risque de l'impact de ce phénomène sont les pays en voie de développement. Les énergies renouvelables ont le potentiel de fournir des services énergétiques avec presque zéro émission des polluants atmosphériques et des gaz à effet de serre [96]. Une utilisation excessive des combustibles fossiles entraîne une augmentation du CO₂ dans l'atmosphère.

a) Réductions des gaz à effet de serre

La quantité croissante des gaz à effet de serre a fortement accru l'intérêt pour l'utilisation des carburants biodiesel [87]. Une incitation souvent citée à l'utilisation des carburants biodiesel est leur capacité à éliminer le cycle de vie des émissions de CO₂ par rapport à celles des combustibles fossiles, qui est l'une des principales causes des gaz à effet de serre. Les carburants biodiesel réduisent l'effet de serre sur notre environnement en réduisant les émissions de CO₂. Les carburants biodiesel sont très respectueux de l'environnement car ils augmentent le pourcentage de O₂ dans les gaz d'échappement par rapport au carburant diesel conventionnel [97]. En tant qu'une énergie renouvelable utilisée dans le moteur à allumage par compression, les carburants biodiesel réduisent la consommation de carburant diesel conventionnel et réduisent ainsi l'effet de serre.

b) Généralités sur les oxydes d'azote

Le NO et le NO₂ sont les principaux oxydes d'azote formés par la combustion. Ces oxydes d'azote proviennent des réactions entre l'azote de l'air ou du combustible et l'oxygène de l'air. Le N₂O est un gaz comptabilisé à part des NO_x car il a une stabilité beaucoup plus grande. Ainsi toute combustion dans l'air émet des oxydes d'azote.

Une grande majorité d'oxydes d'azote émise provient des centrales thermiques et des moteurs à combustion interne des véhicules.

Le monoxyde d'azote NO est peu toxique, il est cependant connu pour avoir un impact sur la fixation de l'oxygène par l'hémoglobine à partir de 15 ppm. En revanche, le NO est un précurseur du dioxyde d'azote qui est un gaz toxique. Le NO₂ inhalé peut être absorbé dans les alvéoles pulmonaires, il pénètre profondément dans le système respiratoire entraînant des altérations des structures alvéolaires. Les symptômes de l'action toxique du NO₂ sont l'insomnie, la toux et une altération des muqueuses.

En dehors de leurs effets nocifs sur la santé, les composés azotés ont des répercussions sur l'environnement. Rejetés dans l'atmosphère, les NO_x peuvent former des acides nitriques. Ces acides se retrouvent alors dans les nuages et les précipitations provoquant alors l'acidification des lacs et la déforestation. De plus, les effets de ces pluies acides induisent de la corrosion entraînant des altérations diverses, notamment au niveau des bâtiments. Les composés azotés jouent aussi un rôle en ce qui concerne l'équilibre atmosphérique [98]. Ils créent de l'ozone dans la troposphère et détruisent l'ozone stratosphérique. Le N₂O présent dans l'atmosphère provient majoritairement de la recombinaison du NO avec la molécule de l'ozone. Dans la troposphère, le NO₂ se dissocie

produisant du NO et de l'oxygène, l'oxygène réagit alors avec le dioxygène présent pour former de l'ozone. De même, sous l'effet du rayonnement solaire, les NO_x et les COV peuvent réagir ensemble pour former de l'ozone. Cette pollution à l'ozone explique la couleur brunâtre des couches d'air polluées dans les villes à forte circulation automobile. Si l'ozone est nécessaire au niveau de la stratosphère, sa présence dans les basses couches de l'atmosphère est nocive pour l'homme et pour l'environnement. Les effets sur la santé (même à très basse concentration) sont divers : irritation des yeux et des muqueuses, maux de tête, réduction de la capacité pulmonaire. De plus, l'ozone affecte fortement les fonctions pulmonaires des asthmatiques.

Dans la stratosphère, les oxydes d'azote sont des agents actifs d'attaque de la couche d'ozone. Il existe dans la stratosphère des gaz inertes comme les dichlore. Ces gaz inertes vont venir réagir avec les cristaux liquides pour former des Cl₂. Le rayonnement solaire casse ces molécules formant des radicaux de chlore qui peuvent réagir avec l'ozone stratosphérique, détruisant les molécules d'ozone au profit des dioxygènes, entraînant la réduction de la couche d'ozone.

Enfin, le N₂O est une molécule qui a la propriété d'absorber le rayonnement infrarouge provenant du rayonnement solaire, c'est donc un gaz à effet de serre. Par rapport au CO₂, le N₂O a un pouvoir radiatif 150 fois supérieur, contribuant ainsi pour environ 10 % de l'effet de serre global.

Les émissions de NO_x sont néfastes pour l'homme et pour son environnement. Plus particulièrement, le dioxyde d'azote est un problème actuel et des solutions de réduction doivent être apportées.

c) Mécanismes de formation des oxydes d'azote

Les mécanismes de formation des NO_x durant la décomposition d'hydrocarbures sont complexes et certaines voies de formation sont encore mal comprises [99,100]. On distingue quatre voies principales de formation de NO_x qui sont données sur la Figure 1.5.

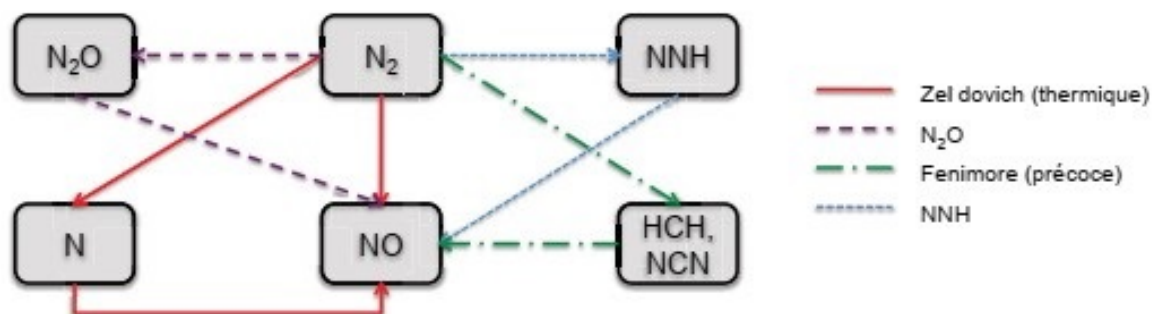


Figure 1.5: Principaux mécanismes de formation des NO_x.

• Le mécanisme de Zeldovich

Le mécanisme de formation de NO à partir de diazote est celui de Zeldovich. La vitesse de production de NO par cette voie devient significative à haute température et en présence de l'oxygène. Il s'agit de la principale voie de formation des oxydes d'azote dans les moteurs à combustion interne [101].

• Le mécanisme de Fenimore

Fenimore constate lors de travaux en flammes prémélangées que le profil de NO présente une pente beaucoup plus raide dans la zone de combustion que celle de la formation du NO dans

les gaz brûlés. Il explique ce phénomène par la rupture de la triple liaison du N_2 par des réactions moins endothermiques que le mécanisme de Zeldovich.

Ce mécanisme est donné par les [Équation 1.10](#) à [Équation 1.13](#) qui s'écrivent comme suit :



De Soete [102] met en évidence la formation d'acide cyanhydrique HCN dans la zone d'oxydation de flamme riche ce qui appuie la théorie de Fenimore. Le mécanisme de formation du NO est initié par des réactions entre le diazote de l'air et les radicaux hydrocarbonés CH_i pour former les HCN et les NCN menant au NO. Les radicaux CH_i se forment dans le front de flamme et ont une durée de vie très courte, le NO précoce est produit uniquement lors de la conversion du carburant.

La formation de NO à partir du protoxyde d'azote intervient dans des zones de suréquilibre d'espèces atomiques O et H et à forte pression.

- **La voie de formation du NO via NNH**

Dans les gaz brûlés de flammes riches, l'addition d'hydrogène suivie d'une attaque de l'oxygène sur l'espèce NNH conduit à la formation de NO.

Une autre voie de formation du NO est la voie de NO combustible, cette dernière voie dépend fortement de la présence de fonction pyridine et pyrole dans le carburant utilisé. Cette voie fait l'objet de nombreuses études [103, 104]. Au niveau du raffinage, le carburant diesel conventionnel contient très peu d'azote, si ce n'est par l'addition de procétane.

d) Technique de réduction des NO_x

Il existe **deux stratégies principales** pour réduire les émissions de NO_x .

La première stratégie consiste à éviter la formation de NO_x à la source en améliorant le procédé de combustion. On peut par exemple utiliser des stratégies de combustion qui présentent un fort potentiel de réduction des émissions.

- **Le mode de combustion parfaitement homogène**

Il est fondamentalement basé sur la combinaison d'un carburant parfaitement prémélangé à de l'air fortement dilué par des gaz brûlés et d'une auto-inflammation en masse dans l'ensemble de la chambre de combustion. La concentration importante des gaz brûlés admis dans le mélange réduit la concentration en oxygène par dilution et augmente le pouvoir calorifique du mélange enfermé. La baisse de température de combustion résultante présente l'avantage de réduire drastiquement la production d'oxydes d'azote. D'un point de vue pollution, le principal inconvénient de ce mode de fonctionnement est une augmentation des émissions d'hydrocarbures imbrûlés (HC) et de monoxyde de carbone (CO) inhérente à la réduction de la température de combustion. La combustion parfaitement homogène conduit à un pic de pression pouvant être destructeur.

- **Le mode de combustion prémélangée**

Il regroupe l'ensemble des stratégies consistant à maximiser la proportion de combustion prémélangée. Par rapport à la combustion conventionnelle, cela consiste à favoriser l'homogénéi-

sation du carburant à de l'air fortement dilué par des gaz brûlés avant l'auto-inflammation pour obtenir une combustion en masse.

D'autres solutions technologiques existent comme l'optimisation du système de combustion (optimisation de la chambre de combustion, optimisation de l'aérodynamique, optimisation du système d'injection, multi-injections et avance à l'allumage), l'utilisation d'une recirculation des gaz brûlés et l'utilisation des moyens de contrôle (capteurs et calculateurs).

La seconde stratégie consiste à traiter les fumées qui sortent de la chambre de combustion en éliminant les NO_x présents dans ses fumées par voie chimique. On peut citer par exemple :

- La réduction sélective catalytique
- Les pièges à NO_x

Les différentes techniques de réduction des émissions de NO_x utilisées en combustion sont montrées sur la [Figure 1.6](#).

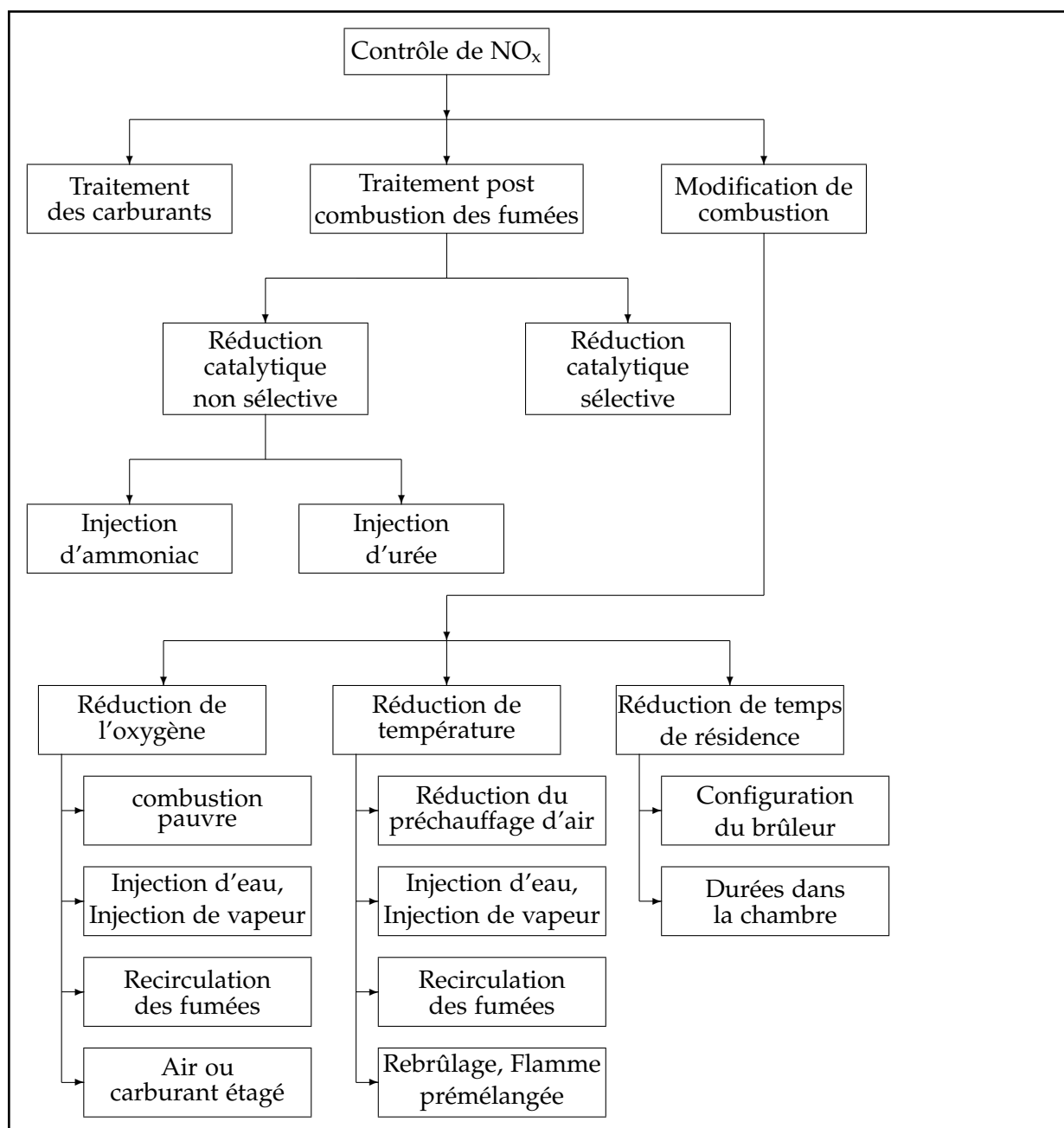


Figure 1.6: Différentes techniques de réduction des émissions de NO_x .

1.6 Production des carburants biodiesel au Cameroun

Il existe actuellement plusieurs acteurs qui interviennent dans la production des carburants biodiesel au Cameroun. La Société camerounaise de palmeraies (SOCAPALM), Société Africaine Forestière et Agricole du Cameroun (SAFACAM) et la Société des Plantations de la Ferme Suisse produisent pour leurs besoins personnels mais restent toutefois discrètes sur les quantités qu'elles produisent car il n'existe aucune loi qui les oblige à communiquer la quantité des carburants biodiesel produits. La production à petite échelle, notamment les expérimentations et les projets pilotes sont développés par des Universités et Instituts de recherche, des associations, des Organisations non Gouvernementales, des Groupes d'Initiative Commune.

Le Cameroun dispose de vastes terres disponibles, d'une main d'œuvre qualifiée et d'un climat favorable au développement de ces carburants biodiesel. Le développement des biocarburants pourrait avoir le potentiel de répondre à une grande partie des besoins énergétiques, de réduire la dépendance à l'importation des combustibles fossiles, de créer de nouvelles opportunités commerciales et de contribuer à la réduction des émissions des gaz à effet de serre (GES). Le Cameroun continue d'importer des combustibles fossiles pour ses approvisionnements en carburant malgré son statut de pays producteur d'énergie fossile et fait face à l'escalade des prix sur le marché mondial. Eu égard à la croissance économique, l'expansion des infrastructures et l'augmentation rapide de la demande énergétique, les dépenses du Cameroun pour l'importation des combustibles fossiles vont croître.

La production des biocarburants biodiesel au Cameroun reste à un stade embryonnaire. L'Institut de Recherche Agricole pour le Développement (IRAD) et les Universités sont les principaux types d'acteurs engagés dans les opérations des carburants biodiesel.

1.6.1 Institut de Recherche Agricole pour le Développement

L'Institut de Recherche Agricole pour le Développement (IRAD) mène une recherche sur la production des carburants biodiesel dans la région du Nord du Cameroun en partenariat avec l'Agence Française de Développement (AFD), le Centre de Coopération Internationale de Recherche Agronomique pour le Développement (CIRAD) et la Société de Développement du Coton du Cameroun (SODECOTON). Le but de cette recherche est de proposer à la SODECOTON des produits de substitution qui peuvent être transformés dans ses usines pour la production des carburants biodiesel. Les alternatives au coton étaient le *Jatropha Curcas*, le ricinus communis, les graines de soja et les graines de tournesol pour la production des carburants biodiesel. La recherche n'a été effectuée que pour le *Jatropha Curcas* puisque l'huile de ricin est un très bon lubrifiant en forte demande et ne peut donc pas être utilisée comme carburants biodiesel; l'huile de soja est comestible et est également en forte demande dans le marché camerounais; et les premiers tests sur le tournesol ont montré que la recherche sera complexe pour les partenaires.

L'IRAD travaille sur la collecte des données physiques et effectue les tests sur le *Jatropha Curcas* afin d'identifier quelles provenances sont à la fois résistantes aux maladies et offrent un bon rendement pour la production des carburants biodiesel au Cameroun. L'IRAD dispose de nombreux sites expérimentaux de *Jatropha Curcas* à Kismatari et à Sanguéré dans la région du Nord couvrant une superficie de 15 ha. Cette étape est préalable à la production et à l'utilisation des carburants biodiesel à partir de *Jatropha curcas*. Depuis 2008, la recherche est en cours mais

les résultats actuels ne sont pas assez concluants pour étendre la production du *Jatropha curcas* dans le pays malgré les essais sur diverses provenances.

Les chercheurs et les élèves ingénieurs du Département d'Énergie Renouvelable de l'École Nationale Supérieure Polytechnique de Maroua (ENSPM) de l'Université de Maroua travaillent sur l'identification du potentiel bioénergétique des graines de plantes telles que le neemier pour la production des carburants biodiesel.

1.6.2 Universités

Les chercheurs et les élèves ingénieurs de l'École Nationale des Sciences Agro-Industrielles (ENSAI) de l'Université de Ngaoundéré produisent des carburants biodiesel à partir des résidus et des déchets agricoles tels que les épiluchures de plantain et de manioc, les feuilles et les tiges de maïs, les tiges de légumes et les graisses animales.

Le Département d'Énergie Renouvelable de la Faculté d'Agriculture et des Sciences Agronomiques (FASA) de l'Université de Dschang mène de nombreuses recherches sur la production des biocarburants au Cameroun.

1.6.3 Politiques bioénergétiques au Cameroun

Il ne semble pas y avoir une politique d'ensemble permettant de répondre aux besoins bioénergétiques avec des outils et des mesures variées. Ce serait en partie dû à la difficulté de coordonner les multiples ministères et acteurs en charge de ce secteur. L'absence de traitement transversal de la politique bioénergétique au Cameroun est très visible. On se trouve face à une segmentation des politiques selon les ministères sans vision d'ensemble. Par exemple, le Ministère de l'Agriculture est plutôt axé sur la mobilisation des énergies renouvelables qui vont être développées dans le cadre de ses coopératives en lieu avec son programme de développement rural tandis que le Ministère de la Forêt et de la Faune est axé sur la biomasse.

Concernant la politique des énergies renouvelables, la priorité porte sur l'hydroélectricité. Les bioénergies ont un positionnement très spécifique et ne font l'objet que de peu d'attention par les pouvoirs publics camerounais qui préfèrent plutôt la poursuite d'une politique de subvention du pétrole aux consommateurs afin de bloquer les prix à la consommation malgré l'augmentation des prix du pétrole sur le marché mondial. Les bioénergies sont considérées comme concurrents à la production vivrière et donc contraire à un objectif de sécurité alimentaire. Dans ce contexte fragile, les bioénergies ne seraient pas nécessairement à voir comme des concurrents aux productions alimentaires mais comme des compléments car elles permettraient de développer des équipements motorisés voire en aval pour la transformation et la conservation des aliments. Globalement, elles devraient contribuer à développer la diversification des économies locales.

La question des acquisitions foncières à grande échelle reste un sujet très sensible du fait de la non transparence dans le processus d'acquisition des terres.

1.7 Modèles mathématiques zéro dimensionnels

1.7.1 Délai d'auto-inflammation

Dans le cas des moteurs à allumage par compression à injection directe, chaque injection s'accompagne d'un délai d'auto-inflammation dont la durée dépend directement des conditions thermo-chimiques locales de la chambre de combustion. Ce délai d'auto-inflammation exprime le temps écoulé entre le début de l'injection θ_{inj} et le début de combustion θ_{comb} , l'Équation 1.14 :

$$\tau_{ai} = \theta_{comb} - \theta_{inj} \quad (1.14)$$

Le délai d'auto-inflammation est atteint quand l'intégrale du temps caractéristique donnée par l'Équation 1.15 est égale à 1 [101].

$$\int_{\theta_{inj}}^{\theta_{comb}} \frac{1}{\tau_{ai}} dt = 1 \quad (1.15)$$

Le délai d'auto-inflammation est composé d'un temps caractéristique physique τ_{ph} et d'un temps caractéristique chimique τ_{ch} . Ces grandeurs τ_{ph} et τ_{ch} désignent respectivement le temps mis par le carburant pour s'évaporer et le temps caractéristique d'activation des réactions chimiques de combustion. Dans la réalité, ces deux phénomènes se superposent et il est traduit par l'Équation 1.16 :

$$\tau_{ai} = \tau_{ph} + \tau_{ch} \quad (1.16)$$

τ_{ph} peut se déterminer soit à partir d'un modèle d'évaporation, soit considéré comme constant. Les temps caractéristiques chimiques sont modélisés par une loi de la forme d'Arrhenius qui prend en compte la pression et la température dans la chambre de combustion. Cette loi de la forme d'Arrhenius est donnée par l'Équation 1.17 [101] :

$$\tau_{ch} = Ap^{-n} \exp\left(\frac{E_A}{RT}\right) \quad (1.17)$$

où A et n sont des constantes dépendantes du carburant utilisé et se déterminent expérimentalement. E_A est l'énergie d'activation nécessaire à l'auto-inflammation du carburant ; elle se déduit du nombre de cétane du carburant et son expression est donnée par l'Équation 1.18 proposée par Hardenberg et Hase [101].

$$E_A = \frac{618840}{CN + 25} \quad (1.18)$$

Gogoi [105], Rodriguez [106] ou Bibiç [107] ont proposé de nouvelles corrélations permettant de déterminer le délai d'auto-inflammation du carburant biodiesel. Ils ont adapté celle proposée par Assanis en ajustant les constantes de la corrélation suivant les types de carburant biodiesel et de moteur.

Il existe des modèles de délais d'auto-inflammation basés sur cette loi de la forme d'Arrhenius. Le Tableau 1.4 et le Tableau 1.5 présentent quelques corrélations proposées.

Tableau 1.4: Modèles du délai d'auto-inflammation du carburant diesel conventionnel basés sur la loi de la forme d'Arrhenius.

Auteur	corrélation
Shipinsky	$\tau_{ai} = \frac{0,8216}{p^{0,386}} \exp\left(\frac{4644}{T}\right) \left(\frac{40}{I_C}\right)^{0,69}$
Sitkei	$\tau_{ai} = 3,52p^{-0,7} \exp\left(\frac{3930}{T}\right) + 0,00463p^{-1,8} \exp\left(\frac{3930}{T}\right)$
Wolfer	$\tau_{ai} = 3,52p^{-1,022} \exp\left(\frac{2100}{T}\right)$
Tolstov	$\tau_{ai} = 0,0523(1 - 0,00016) \left(\frac{T}{p}\right)^{0,5} \exp\left(\frac{1477}{T}\right)$
Assanis	$\tau_{ai} = 2,4p^{-1,02} \phi^{-0,2} \exp\left(\frac{2100}{T}\right)$

Tableau 1.5: Modèles du délai d'auto-inflammation des carburants biodiesel basés sur la loi de la forme d'Arrhenius.

Auteur	carburant biodiesel à base	corrélation
Bibiç	-	$\tau_{ai} = 1,04 \times 10^{-3} N \times p^{-0,2} \phi^{-0,2} \exp\left(\frac{16550-20I_C}{RT}\right)$
Gogoi	de l'huile de karanja	$\tau_{ai} = 2,64 \times 10^{-3} p^{-0,8} \phi^{-0,2} \exp\left(\frac{16550-20I_C}{RT}\right)$
Rodriguez	de l'huile de palme	$\tau_{ai} = p^{-0,34} \phi^{-0,02} \exp\left(\frac{1130}{T}\right)$
Rodriguez	de l'huile de colza	$\tau_{ai} = p^{-0,34} \phi^{-0,06} \exp\left(\frac{1145}{T}\right)$

1.7.2 Transferts thermiques pariétaux

Dans un moteur à combustion interne, une partie de la chaleur issue de la combustion est transmise aux parois de la chambre de combustion et une autre partie de cette chaleur est évacuée par transfert radiatif entre le bloc moteur et l'air ambiant. Le transfert de chaleur par conduction dans les fluides réactifs ou au sein même du bloc moteur et le transfert de chaleur par rayonnement sont moins importants que ceux par convection entre les fluides réactifs et le bloc moteur à cause de la température élevée dans la chambre de combustion. Le flux d'énergie transmis des fluides réactifs aux parois de la chambre de combustion dépend du gradient de température au niveau de cette interface, il s'exprime sous la forme classique :

$$\frac{dQ_P}{dt} = h_c S (T - T_P) \quad (1.19)$$

où T_P la température, supposée constante, des parois et S la surface instantanée d'échange donnée par :

$$S = \frac{\pi b^2}{2} + \frac{\pi b a}{2} \left(1 + \beta - \cos \theta - \sqrt{\beta^2 - \sin^2 \theta}\right) \quad (1.20)$$

Le problème majeur réside dans la détermination du coefficient de transfert de chaleur par convection h_c . Plusieurs corrélations de coefficient de transfert de chaleur existent dans la littérature.

Corrélations des coefficients d'échanges

La corrélation de Nusselt est basée sur l'hypothèse de transfert de chaleur par convection naturelle avec un nombre de Nusselt [108]. La corrélation de Nusselt sous-estime le transfert thermique.

Nusselt a exprimé le coefficient d'échange thermoconvectif composé d'un terme convectif et d'un terme radiatif en s'appuyant sur des expériences dans une enceinte cylindrique. Le coefficient de la corrélation de Nusselt est donné par l'Équation 1.21.

$$h_c = 1,15 \sqrt[3]{pT} (1 + 1,24V_p) + 0,0004206 \frac{\left[\frac{T}{100}\right]^4 - \left[\frac{T_p}{100}\right]^4}{T - T_p} \quad (1.21)$$

Ce coefficient était prévu à l'origine pour prédire le flux moyen de chaleur dans le temps. Cependant, il a souvent été utilisé pour calculer les flux instantanés de chaleur.

Eichelberg a proposé, à partir de ses mesures réalisées sur des moteurs à allumage par compression à deux et à quatre temps, un coefficient de corrélation d'échange de chaleur donné par l'Équation 1.22 permettant de calculer les transferts thermiques instantanés globaux sans terme radiatif explicite.

$$h_c = 7,67 \times V_p^{0,333} \sqrt{pT} \quad (1.22)$$

où p est la pression et T est la température.

Les résultats de cette corrélation sont acceptables à l'exception de la phase de compression. Cette corrélation est facile à utiliser et donne une courbe plus étendue que celle de la corrélation de Woschni. Le temps de calcul est réduit et presque aucun calibrage n'est nécessaire.

Le coefficient d'échange thermoconvectif de Annand donné par l'Équation 1.23 est basé sur le principe de la convection turbulente.

$$h_c = C^{cste} \left[\frac{\lambda R_e^{0,7}}{B} \right] + C(T^4 - T_p^4) \quad (1.23)$$

Le nombre de Reynolds R_e est calculé sur la base de la vitesse moyenne du piston et du diamètre du cylindre. C^{cste} varie de 0,35 à 0,8 selon la vitesse de la charge. Le second terme représente l'influence du rayonnement et les valeurs de C sont données par l'Équation 1.24.

$$C = \begin{cases} 3,3 \times 10^{-11} & \text{pour un moteur à allumage par compression;} \\ 4,3 \times 10^{-12} & \text{pour un moteur à allumage commandé.} \end{cases} \quad (1.24)$$

Pour utiliser cette corrélation, il faut connaître la conductivité thermique des parois de la chambre de combustion. La corrélation de Woschni est basée sur l'hypothèse de la convection turbulente forcée contrairement aux corrélations qui reposent sur l'hypothèse de la convection libre. La formulation de ce coefficient de transfert de chaleur par convection h_c est donnée par l'Équation 1.25 :

$$h_c = 3,26b^{-0,2} p^{0,8} T^{-0,55} w^{0,8} \quad (1.25)$$

Cette corrélation inclue une dépendance du coefficient h_c avec la vitesse w des gaz dans la chambre de combustion. Woschni postule que cette dernière est proportionnelle à la vitesse moyenne du piston donnée par l'Équation 1.26 pendant les phases d'admission, de compression et d'échap-

pement. Durant la combustion et la détente, la vitesse moyenne des gaz est proportionnelle à l'écart entre la pression cylindre et la pression en régime entraîné p_{ent} .

$$w = C_1 V_p + C_2 \frac{V_d T_r}{p_r V_r} (p - p_{ent}) \quad (1.26)$$

où V_p est la vitesse moyenne du piston, p_r , T_r et V_r sont respectivement la pression, la température des gaz et le volume de la chambre de combustion au moment de la fermeture de la soupape d'admission ou au moment de l'auto-inflammation du carburant. Les valeurs des coefficients C_1 et C_2 illustrés dans le [Tableau 1.6](#) varient en fonction du temps moteur.

Tableau 1.6: Coefficients de la corrélation de Woschni.

Temps du cycle	C_1	C_2
Admission	6,18	0
Echappement	2,28	0
Compression	2,28	0
Combustion et détente	2,28	$3,24 \times 10^{-3}$

On approche la pression en régime entraîné p_{ent} par la relation décrivant des compression et détente polytropiques :

$$p_{ent} = p_r \left(\frac{V_r}{V} \right)^k \quad (1.27)$$

où k est le coefficient de compressibilité.

La corrélation de Woschni présente une courbe plus aiguë et possède un mode de transfert thermique le plus rapide. Cette corrélation sous-estime le coefficient de transfert thermique pendant la compression et le surestime durant la combustion. Il est nécessaire de connaître la pression en régime entraîné p_{ent} ce qui rend son usage difficile. Cette corrélation nécessite plus de temps de calcul que les autres corrélation de transfert thermique par convection.

Sitkey a remis en question le coefficient de transfert convectif proposé par Annand et l'a remplacée par l'[Équation 1.28](#).

$$h_c = 1,182(1+b)A_e^{-0,3} p^{0,7} T^{-0,2} V_p^{0,7} \quad (1.28)$$

où la pression p est en MPa. Le terme A_e représente un diamètre équivalent donné par l'[Équation 1.29](#).

$$A_e = \frac{4V}{S} \quad (1.29)$$

où S est la surface d'échange et V le volume de la chambre de combustion. La constante b permet de tenir compte de l'effet de l'intensité turbulente et de la géométrie de la chambre de combustion.

Cette corrélation sous-estime le transfert thermique durant toutes les phases du cycle. La précision n'est pas acceptable. La corrélation de Hohenberg est une simplification de la corrélation de Woschni. Elle donne une courbe plus étendue que celle de la corrélation de Woschni, est plus simple à utiliser, a le temps de calcul réduit et aucun calibrage n'est nécessaire mais elle ne tient pas compte des périodes de fonctionnement du moteur.

$$h_c = 130 p^{0,8} T^{-0,4} V^{-0,06} (V_p + 1,4)^{0,8} \quad (1.30)$$

1.8 Méthode d'injection de vapeur

Les performances des moteurs pourraient être réduites et les émissions de NO_x pourraient être augmentées par l'utilisation des carburants biodiesel dans les moteurs à allumage par compression [109–116]. Afin de réduire ces effets néfastes des carburants biodiesel utilisés dans les moteurs à allumage par compression, certaines méthodes peuvent être utilisées telles que la recirculation des gaz résiduels de combustion (EGR), l'injection d'eau dans la chambre de combustion [117–124]. Même si la recirculation des gaz résiduels de combustion (EGR) est couramment utilisée pour minimiser les émissions de NO_x , les performances sont considérablement diminuées [117–119]. Une autre méthode connue de réduction des émissions de NO_x est l'injection d'eau dans la chambre de combustion des moteurs à combustion interne avec différentes méthodes [120,121]. D'un autre côté, l'un des inconvénients importants de la méthode d'injection d'eau est que l'eau condensée dans la chambre de combustion dégrade la qualité de l'huile de lubrification et augmente le taux d'attrition des pièces mobiles du moteur [124]. Récemment, l'une des méthodes développées pour réduire les émissions de NO_x et pour améliorer les performances des moteurs à combustion interne est l'injection de vapeur dans le collecteur d'aspiration [124–127]. Gonca et al. [122, 123] ont mené une étude théorique de l'injection de vapeur sur un moteur à allumage par compression et sur un moteur à allumage par compression à cycle de Miller en utilisant un modèle de combustion à deux zones. Les résultats de l'étude ont montré que l'injection de vapeur pouvait minimiser les émissions de NO_x et améliorer le rendement thermique effectif et la puissance effective. Parlak et al. [124] ont développé une méthode d'injection de vapeur à l'aide de commande électronique pour un moteur à allumage par compression. Lorsque cette méthode a été mise en œuvre sur le moteur à allumage par compression, les émissions de NO_x ont diminué jusqu'à 33 %, la puissance effective et le couple effectif ont augmenté jusqu'à 3 % et la consommation spécifique du carburant est minimisée jusqu'à 5 % lors des tests à pleine charge. Cesur et al. [125] et Kökkülünk et al. [126] ont appliqué un système d'injection de vapeur à l'aide de commande électronique dans les moteurs à allumage commandé et à allumage par compression et ils ont obtenu des résultats similaires à ceux de l'étude de Parlak et al. [124]. Dans ces études, le rapport optimal de vapeur a été déterminé comme étant 20 % du carburant injecté en masse en termes de réduction des émissions de NO_x et d'amélioration des performances. Gonca et al. [127] ont défini des températures optimales de vapeur et des rapports massiques optimaux de vapeur pour les moteurs turbocompressés à combustion interne. Kökkülünk et al. [129] ont appliqué une combinaison de la recirculation des gaz résiduels de combustion (EGR) et de la méthode d'injection de vapeur dans un moteur à allumage par compression à aspiration naturelle et à injection directe pour minimiser les émissions de NO_x et une réduction a été acquise jusqu'à 48,3 % avec peu de perte de puissance effective. Kökkülünk et al. [130] ont examiné l'influence de la conception du moteur à allumage par compression et des paramètres de fonctionnement tels que la richesse, le taux de compression, la température et la pression de suralimentation sur le rendement thermique effectif, la puissance effective et les émissions de NO d'un moteur à allumage par compression à injection directe avec la combinaison de la méthode d'injection de vapeur et de la recirculation des gaz résiduels de combustion (EGR). Les résultats ont montré que les paramètres de conception des moteurs à allumage par compression affectent considérablement le rendement thermique effectif, la puissance et les émissions de NO . Gonca et al. [131, 132] ont réalisé une étude approfondie pour comparer un moteur à allumage par compression avec la méthode d'injection de vapeur et un moteur à allumage par compression à cycle de Miller. Ils

ont rapporté que le cycle de Miller et la méthode d'injection de vapeur diminuent les émissions de NO à des taux élevés. Gonca et al. [133] ont examiné les effets de la méthode d'injection de vapeur sur les caractéristiques de performance d'un moteur à allumage par compression à cycle de Miller et des réductions considérables de 48% des émissions de NO ont été obtenues. Kökkülünk et al. [126] et Cesur et al. [125] ont mis en œuvre la méthode d'injection de vapeur dans les moteurs à allumage par compression et à allumage commandé et ont obtenu une diminution considérable des émissions de NO_x et une légère augmentation du rendement thermique effectif et de la puissance effective.

Le schéma fonctionnel de la méthode d'injection de vapeur est illustré sur la Figure 1.7, [128].

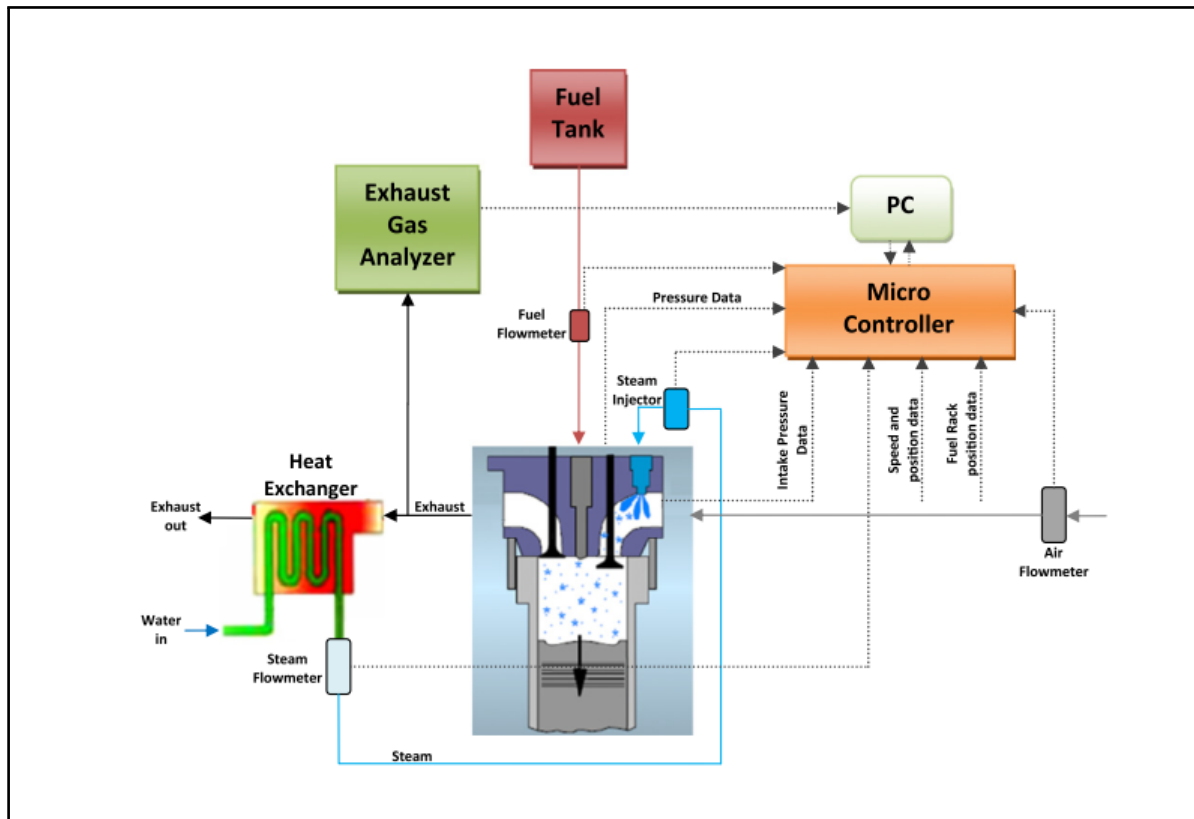


Figure 1.7: Schéma fonctionnel de la méthode d'injection de vapeur.

Gonca et al. [127] ont réalisé une étude d'optimisation afin de décrire les températures et les rapports massiques de vapeur injectée dans les moteurs turbocompressés à combustion interne. Les résultats ont montré que la température à l'échappement est très importante pour obtenir la vapeur. La plage de température optimale se situe entre 200 et 300 °C. Gonca [134] a mis en œuvre la méthode d'injection de vapeur dans un moteur monocylindre à allumage par compression à aspiration naturelle et alimenté par les mélanges de carburant d'éthanol et de carburant diesel conventionnel. Gonca [132] a étudié les effets d'injection de vapeur sur les produits de combustion à l'équilibre chimique des carburants biodiesel et des alcools. Gonca et Sahin [135, 136] ont appliqué la méthode d'injection de vapeur dans un moteur à allumage par compression enrichi en hydrogène [135] et dans un moteur turbocompressé à allumage par compression à cycle de Miller [136]. Il a été observé que la formation de NO a diminué dans toutes les études avec l'application de la méthode d'injection de vapeur. L'émission de NO a diminué de 40%. Parlak et al. [137] ont examiné l'influence de l'injection de vapeur sur les caractéristiques de performance et la formation des émissions d'un moteur à allumage par compression à aspiration

naturelle alimenté par des mélanges de carburant biodiesel à base d'huile végétale et de carburant diesel conventionnel. Les résultats ont montré que l'injection de vapeur améliore le rendement thermique effectif et la puissance effective de 5 % et 3,5 %, respectivement, et réduit la formation de NO jusqu'à 30 %.

1.9 Limites des précédentes études et la nécessité de la thèse

Les carburants conventionnels comme le carburant diesel conventionnel, l'essence, les carburants d'aviation et le carburant biodiesel sont composés de nombreuses classes différentes d'hydrocarbures, il est donc épineux de mener des expériences significatives avec un si grand nombre de produits chimiques contenus dans un tel mélange. Afin de surmonter ce problème, des molécules modèles ou des mélanges de molécules modèles de carburant biodiesel sont utilisés. Il s'agit des mélanges bien définis d'un petit nombre de composés hydrocarbonés dont les concentrations relatives peuvent être ajustées pour que les propriétés physiques et chimiques de leur combustion se rapprochent de celles d'un carburant difficile à étudier expérimentalement et numériquement.

Logiciel d'équilibre chimique GASEQ et code d'équilibre chimique CEA

Le logiciel d'équilibre chimique GASEQ est un logiciel qui ne convient pas pour être intégré comme un sous-modèle de combustion dans les moteurs à combustion interne. Il néglige les effets des dissociations chimiques des produits de combustion sur la chaleur spécifique des produits de combustion pouvant entraîner des erreurs significatives dans les calculs de performances des moteurs à combustion interne. Des écarts significatifs sont signalés entre les chaleurs spécifiques obtenues avec le GASEQ et le CEA de la NASA, en particulier à des températures élevées. Le CEA nécessite que la température adiabatique de flamme ou l'enthalpie de combustion soit donnée comme données d'entrée afin de calculer la température adiabatique de flamme et l'enthalpie de combustion.

Modèle d'équilibre chimique

Avec le modèle d'équilibre chimique actuel, la température adiabatique de flamme et l'enthalpie de combustion peuvent être calculées simultanément avec les produits de combustion à l'équilibre contrairement au logiciel d'équilibre chimique GASEQ et au code d'équilibre chimique CEA de la NASA. De plus, il est très pratique d'être intégré avec des simulations des moteurs, des modèles de cycles thermodynamiques et permet d'étudier des paramètres des carburants et des moteurs à combustion interne. L'approche de modélisation peut être adaptée aux études paramétriques de presque tous les types de modèles thermodynamiques de moteur. Un nombre supplémentaire de combustibles et d'autres réactifs peut être envisagé s'il y en a un.

De plus, le modèle d'équilibre chimique peut calculer plus précisément les propriétés thermodynamiques des produits de combustion que les modèles de combustion existants qui sont utilisés dans l'analyse thermodynamique des moteurs à combustion interne. Dans d'autres études, les propriétés des gaz d'échappement sont supposées constantes indépendamment des changements de températures et de pressions ou plus précisément un mélange de produits de combustion complets comprenant uniquement de CO_2 , de H_2O , de O_2 et de N_2 est considéré comme produits de combustion. Cela entraînerait encore des inexactitudes ou des écarts dans l'estimation des

performances car les réactions de combustion réelles ne se terminent pas à des températures élevées. Les principales espèces chimiques se dissocient et réagissent après 2200 K, ce qui entraîne la formation des espèces supplémentaires en quantités significatives. Ainsi, un modèle d'équilibre chimique considérant un certain nombre d'espèces est indispensable pour améliorer considérablement la précision des résultats des performances des moteurs à combustion interne. Bien que la plupart des gaz de combustion puissent être considérés en équilibre chimique, la vitesse des dissociations n'est pas la même que celle de formation pour certains produits de combustion tels que les oxydes d'azote et le monoxyde de carbone. Afin d'obtenir des concentrations de NO, les principes de cinétique chimique sont appliqués en utilisant les fractions molaires à l'équilibre et la température adiabatique de flamme.

1.10 Conclusion

La revue de la littérature a montré que la production des carburants biodiesel se développe dans le monde entier en raison de la sécurité énergétique et des préoccupations environnementales. Cependant, la production des carburants biodiesel et leur utilisation comme un carburant renouvelable alternatif au carburant diesel conventionnel présentent certains défis. Ces défis comprennent la disponibilité, les propriétés des carburants biodiesel, le rendement, les caractéristiques d'émission et de combustion.

Les moteurs à allumage par compression modernes sont soumis à des contraintes normatives sur les émissions polluantes de plus en plus drastiques et au même moment les besoins en termes des performances sont de plus en plus élevés. Ces contraintes ont poussé les motoristes à mettre sur pied des modèles mathématiques permettant de prédire les performances de ces moteurs et de réduire les coûts liés à l'expérimentation. Le compromis entre la vitesse et la précision des calculs est une problématique d'envergure. La revue de la littérature nous a montré que les modèles thermodynamiques phénoménologiques répondent mieux à ce compromis et permettent un champ d'études assez large concernant la modélisation des phénomènes inhérents à la combustion dans les moteurs à allumage par compression. Dans la même foulée, les modèles thermodynamiques peuvent être intégrés comme sous-modèles des modèles phénoménologiques. Les performances des moteurs et les émissions de NO_x pourraient augmenter en utilisant les carburants biodiesel dans les moteurs à allumage par compression. Afin d'augmenter les performances et de réduire les émissions de NO_x dans les moteurs à allumage par compression, la méthode d'injection de vapeur est préconisée.

Dans le chapitre suivant, une étude de modèle de combustion à une zone de Krieger et Borman et de modèle de combustion à deux zones de Ferguson et Olikara est faite afin d'évaluer leurs avantages et limites et ainsi justifier le choix du modèle de combustion pour appliquer à la combustion du carburant biodiesel et du carburant diesel conventionnel.

CHAPITRE II

2

MODÉLISATION THERMODYNAMIQUE DE LA CHAMBRE DE COMBUSTION

2.1 Introduction

La modélisation thermodynamique des moteurs à combustion interne et la simulation de leur fonctionnement se sont fortement développées. L'optimisation de la combustion dans la chambre de combustion des moteurs à combustion interne consiste à rechercher les conditions optimales de température, de pression et d'homogénéité du mélange air-carburant en général et l'amélioration de la qualité de l'auto-inflammation des mélanges homogènes conduisant à d'importants progrès sur la détermination des configurations optimales qui permettent de minimiser la formation des polluants. Cette étape d'optimisation des phénomènes liés à la combustion peut se faire soit à partir des expériences soit par le biais des calculs prévisionnels impliquant préalablement la mise en œuvre des modèles capables de reproduire des données expérimentales déjà disponibles. Ainsi, la modélisation est un moyen intéressant permettant de limiter les nombreuses expériences nécessaires pour l'optimisation des phénomènes de combustion car les essais peuvent s'avérer très coûteux, très dangereux et très difficiles de mesurer tous les paramètres. Les enjeux de cette approche qui est complémentaire à celle traditionnellement basée sur l'expérimentation sont majoritairement la réduction de la consommation des carburants et des rejets des polluants dus aux essais.

Les modèles thermodynamiques sont basés sur les deux premiers principes de la thermodynamique. La modélisation zéro dimensionnelle consiste à écrire les équations de conservation de masse et d'énergie pour lesquelles les débits entrants et sortants, les propriétés thermodynamiques et les transferts thermiques sont modélisés. La structure globale de la résolution incluant les modèles et les sous-modèles spécifiques est illustrée sur la [Figure 2.1](#).

Les modèles thermodynamiques se décomposent en deux groupes à savoir les modèles thermodynamiques à une zone et les modèles thermodynamiques multizones comportant deux zones, trois zones ou plusieurs zones. Les modèles thermodynamiques permettent de prédire la pression et la température, la puissance, le rendement et éventuellement les émissions polluantes dans la chambre de combustion en utilisant une loi spécifiée de combustion.

Les modèles thermodynamiques à une zone reposent sur la résolution d'un système d'équations différentielles ordinaires pour la pression, la température et la masse du mélange mais sans tenir compte de la vaporisation des gouttelettes liquides, de l'entraînement d'air, de la géométrie de la chambre de combustion et de la variation spatiale de la composition et de la température du mélange.

Le passage à une modélisation thermodynamique multizone permet de prendre en compte non seulement l'évolution temporelle des diverses grandeurs mais aussi leurs distributions spa-

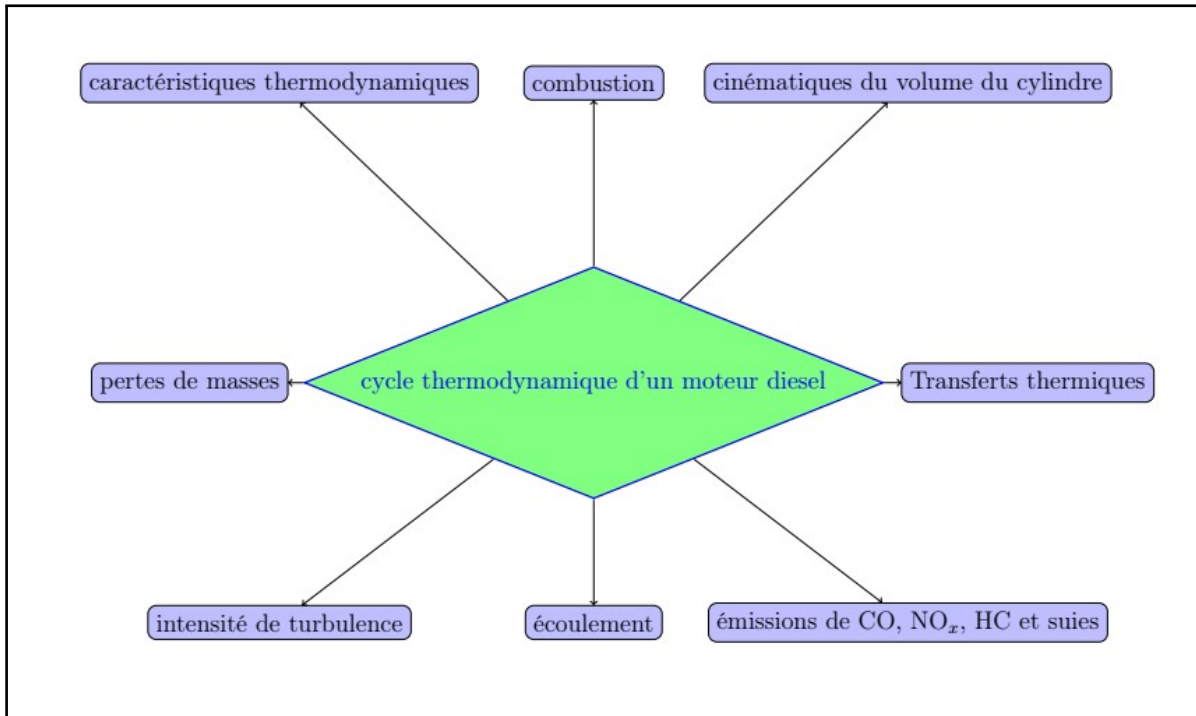


Figure 2.1: Principaux phénomènes intervenant lors d'un cycle moteur.

tiales. C'est un très bon compromis entre les modèles thermodynamiques à une zone et les modèles multidimensionnels qui utilisent la résolution des équations de Navier-Stokes.

2.2 Modèles mathématiques zéro dimensionnels

Les modèles thermodynamiques sont basés sur les lois de la thermodynamique et des relations semi-empiriques décrivant la vitesse de combustion du carburant injecté. Le niveau d'empirisme a été limité autant que possible afin de parvenir à un modèle flexible, évolutif et facilement adaptable à des moteurs différents et dans lequel on peut remplacer certains sous-modèles pour les simplifier ou pour les affiner de manière à atteindre la précision souhaitée.

Pour cela, nous avons choisi et combiné des sous-modèles adaptés à la modélisation des différents organes du moteur et des phénomènes physiques qui s'y déroulent. Les choix ont été guidés en fonction des critères suivants :

- ★ simulation du cycle moteur complet (admission, compression, détente et échappement) et de l'évolution de la pression dans la chambre de combustion ;
- ★ capacité à prédire les variables (pression, température et richesse du mélange) qui influencent l'évolution des polluants ;
- ★ reproduction de la vitesse instantanée du vilebrequin ;
- ★ recours à un nombre minimum de paramètres empiriques ;
- ★ simulations sur toute la plage de fonctionnement du moteur ;
- ★ temps de calculs courts (simulation en temps réel).

D'un point de vue fonctionnel, le moteur est assimilé à un assemblage des modules.

Premièrement, les réservoirs sont considérés comme des systèmes thermodynamiques ouverts de dimension finie par où transitent les gaz. Ces volumes sont modélisés en appliquant le premier principe de la thermodynamique. Les organes concernés sont :

- ★ le collecteur d'admission ;
- ★ les cylindres ;
- ★ les collecteurs d'échappement.

Ensuite, il faut y associer les modèles des divers composants et actionneurs du moteur à allumage par compression à savoir :

- ★ les soupapes et les ports d'admission ;
- ★ le système d'injection ;
- ★ le système de transmission mécanique composé de l'ensemble piston-bielle-manivelle ;
- ★ l'échangeur thermique monté sur la ligne d'admission.

Le modèle global inclut des sous-modèles représentatifs des phénomènes physiques intervenant dans un moteur à combustion interne, en particulier :

- ★ la combustion ;
- ★ les transferts thermiques ;
- ★ les pertes par frottement.

Les hypothèses suivantes sont formulées :

- ★ les gaz sont supposés parfaits ;
- ★ à tout instant du cycle moteur, l'équilibre thermodynamique est atteint ;
- ★ chaque système ouvert contient un mélange homogène de l'air pur et des produits de combustion ;
- ★ pas des variations spatiales de la pression ou de la température à l'intérieur des volumes de contrôle ;
- ★ le modèle ne prend pas en compte la géométrie exacte des conduits d'admission et d'échappement. Chaque système ouvert est modélisé par son volume moyen.
- ★ les pression et température en entrée sont supposées égales aux pression et température ambiantes ;
- ★ les effets des transferts thermiques aux parois des collecteurs sont négligés.

2.3 Modèle thermodynamique à une zone

Le modèle analytique de la chambre de combustion du moteur à allumage par compression est assez complexe car de nombreux processus sont impliqués à savoir l'injection du carburant, les débits massiques aux soupapes, la combustion et les transferts thermiques. Le modèle thermodynamique utilisé est le modèle à une zone de Krieger et Borman [138] qui est basé sur le premier principe de la thermodynamique, de la conservation de masse et la loi des gaz parfaits. Il calcule les variations de l'énergie interne dans la chambre de combustion en utilisant des coefficients correctifs qui correspondent à la variation de température par rapport à une température de référence. Le rapport des chaleurs spécifiques est déterminé en fonction de la température à l'aide des polynômes lissés à partir des données expérimentales tabulées.

2.3.1 Équation de l'énergie

Les expressions analytiques de la pression, de la température et de la masse sont obtenues à partir des lois de conservation appliquées au volume de contrôle défini par la chambre de combustion. Si on néglige les énergies potentielle et cinétique, l'équation de conservation de l'énergie sous sa forme différentielle s'écrit :

$$\frac{dU}{dt} = \frac{dW}{dt} + \frac{dQ}{dt} + \frac{dH_a}{dt} - \frac{dH_e}{dt} + \frac{dH_f}{dt} \quad (2.1)$$

où Q désigne la quantité de l'énergie échangée sous forme de chaleur avec le milieu extérieur, U est l'énergie interne et W est le travail effectué par le piston et est donné par l'Équation 2.2.

$$\frac{dW}{dt} = -P \frac{dV}{dt} \quad (2.2)$$

alors l'Équation 2.1 devient :

$$\frac{d(\mu)}{dt} = \frac{dQ}{dt} - P \frac{dV}{dt} + h_a \frac{dm_a}{dt} - h_e \frac{dm_e}{dt} + h_f \frac{dm_f}{dt} \quad (2.3)$$

avec dm_a/dt , dm_e/dt et dm_f/dt représentant respectivement les débits massiques des gaz d'admission, d'échappement et du carburant injecté. h_a , h_e et h_f représentant respectivement les enthalpies massiques des gaz d'admission, d'échappement et du carburant injecté. m est la masse totale des gaz dans la chambre de combustion pendant un cycle.

La Figure 2.2 illustre le bilan énergétique pour le système-gaz permettant d'identifier les différentes composantes qui interviennent dans la modélisation thermodynamique de la chambre de combustion [139].

Dans l'Équation 2.3, l'énergie interne massique u est estimée à partir d'un polynôme issu de l'interpolation des résultats de calcul des produits de combustion à l'équilibre pour une réaction entre l'air et un hydrocarbure. Pour calculer l'énergie interne massique u , nous avons utilisé l'expression proposée par Krieger et Borman [138] et donnée par l'Équation 2.4.

$$u(T, p, \phi) = A(T) - \frac{B(T)}{\phi} + u_{\text{corr}}(T, p, \phi) \quad (2.4)$$

$$A(T) = a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4 + a_5 T^5 \quad (2.5)$$

$$B(T) = b_0 + b_1 T + b_2 T^2 + b_3 T^3 + b_4 T^4 \quad (2.6)$$

Le terme de correction de l'énergie interne massique traduisant la dissociation chimique s'écrit :

$$u_{\text{corr}}(T, p, \phi) = c_u \exp(D_\phi + E_{T\phi} + F_{Tp\phi}) \quad (2.7)$$

$$D_\phi = d_0 + d_1 \phi^{-1} + d_3 \phi^{-3} \quad (2.8)$$

$$E_{T\phi} = \frac{e_0 + e_1 \phi^{-1} + e_3 \phi^{-3}}{T} \quad (2.9)$$

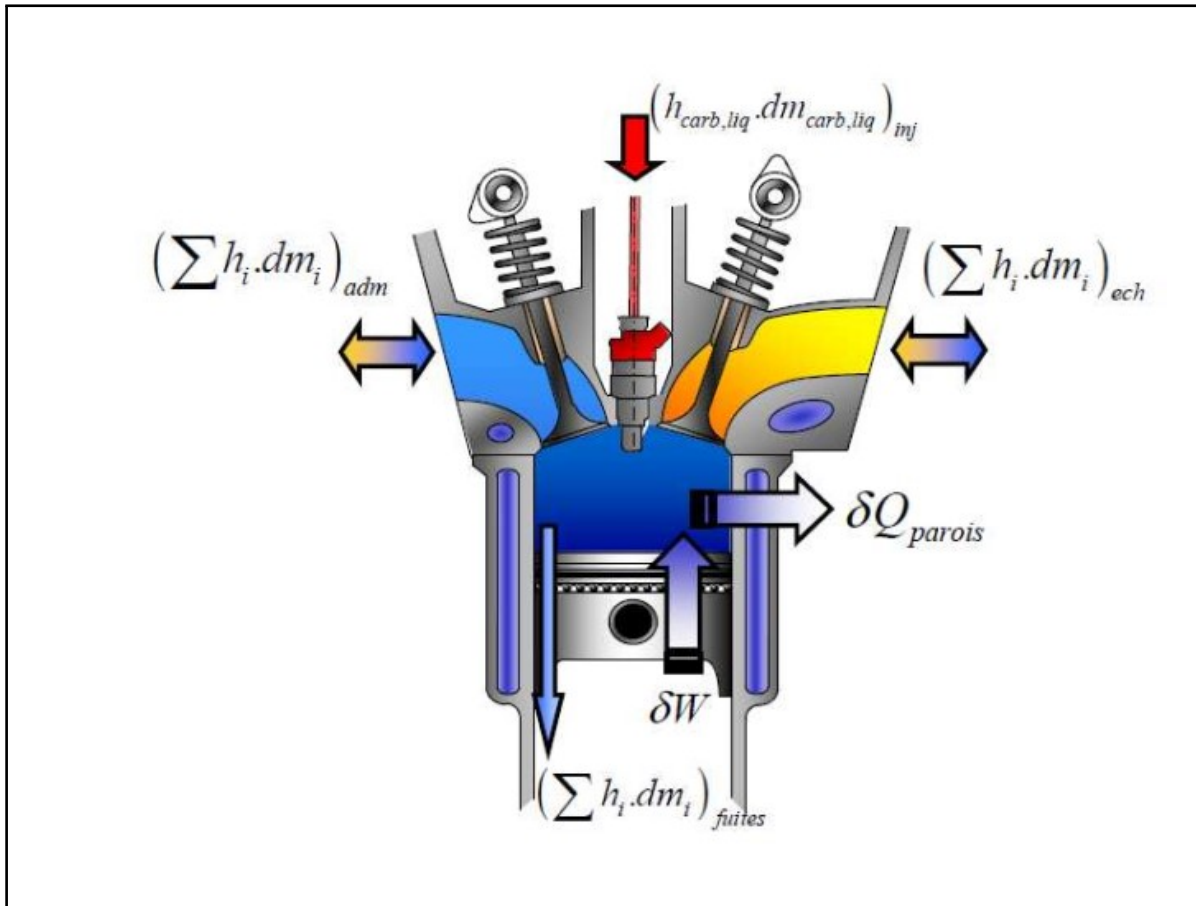


Figure 2.2: Bilan énergétique du modèle de combustion de Krieger et Borman.

$$F_{T,p,\phi} = (f_0 + f_1 \phi^{-1} + f_3 \phi^{-3} + \frac{f_4 + f_5 \phi^{-1}}{T}) \log(f_6 \cdot p) \quad (2.10)$$

La constante des gaz en fonction de la pression, de la température et du rapport de chaleur massique est exprimée comme :

$$R(T, p, \phi) = 0,287 + \frac{0,020}{\phi} + R_{\text{corr}}(T, p, \phi) \quad (2.11)$$

où

$$R_{\text{corr}}(T, p, \phi) = c_r \exp(r_0 \log(\phi) + \frac{r_1 + r_2}{T} + \frac{r_3 \log(f_6 \cdot p)}{\phi})$$

Le rapport des chaleurs massiques est donné par l'Équation 2.12 :

$$\gamma(T, p, \phi) = 1 + \frac{R(T, p, \phi)}{c_v(T, p, \phi)} \quad (2.12)$$

où

$$c_v(T, p, \phi) = \left(\frac{\partial u(T, p, \phi)}{\partial T} \right)_v \quad (2.13)$$

Les coefficients du modèle de combustion de Krieger et Borman sont donnés dans le [Tableau 2.1](#).

Une première hypothèse consiste à négliger l'influence de la pression sur l'énergie interne. Heywood [101] a montré que cette hypothèse ne vaut que si les effets des dissociations chimiques des produits de combustion sont faibles. C'est le cas des moteurs à allumage par compression

Tableau 2.1: Coefficients du modèle de combustion de Krieger et Borman.

	0	1	2	3	4	5	6
a		0,692	3,917	5,29	-2,29	2,7758	
b	3049,33	-0,057	$-9,5 \times 10^{-5}$	$2,153 \times 10^{-8}$	-2×10^{-12}		
c _r	0,004186						
c _u	2,32584						
d	10,41066	7,85125		-3,71257			
e	-15001	-15838		9613			
f	-0,10329	-0,38656		0,154226	-14,763	118,27	14,503
r	-0,2977	11,98	-25442	-0,4354			

car les températures de combustion restent inférieures à celles pour lesquelles interviennent ces réactions chimiques. L'énergie interne massique dépend donc de la température et de la richesse du mélange.

$$\frac{d(mu)}{dt} = m \frac{du}{dt} + u \frac{dm}{dt} \quad (2.14)$$

$$\frac{du}{dt} = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_\phi \frac{dT}{dt} + \left(\frac{\partial u}{\partial \phi} \right)_T \frac{d\phi}{dt} \quad (2.15)$$

Pour connaître la variation de la masse totale dans la chambre de combustion, on considère maintenant l'équation de conservation de la masse de l'air et du combustible, l'Équation 2.16 :

$$\frac{dm}{dt} = \frac{dm_a}{dt} - \frac{dm_e}{dt} + \frac{dm_{res}}{dt} + \frac{dm_{carb}}{dt} \quad (2.16)$$

Connaissant l'expression de la richesse du mélange ϕ donnée par l'Équation 2.17, on déduit l'expression de la masse de carburant brûlé m_{fb} donnée par l'Équation 2.18 :

$$\phi = \left(\frac{m_{carb}}{m_{air}} \right) / \phi_s \quad (2.17)$$

$$m_{carb} = \frac{m \phi_s \phi}{1 + \phi_s \phi} \quad (2.18)$$

Dès lors, les Équation 2.17 et Équation 2.18 nous permettent d'aboutir à l'équation d'état de la richesse du mélange ϕ que donne l'Équation 2.19 :

$$\frac{d\phi}{dt} = \left[\frac{1 + \phi_s \phi}{m} \right] \left[\frac{1 + \phi_s \phi}{\phi_s} \dot{m}_{carb} - \phi \dot{m} \right] \quad (2.19)$$

La quantité d'énergie échangée Q est la différence entre la chaleur libérée par la combustion Q_{comb} et celle Q_p due aux pertes liées aux transferts thermiques aux parois de la chambre de combustion :

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{dQ_{comb}}{dt} - \frac{dQ_p}{dt} = \frac{dm_{carb}}{dt} h_{for} - \frac{dQ_p}{dt} \quad (2.20)$$

où m_{carb} est la masse de carburant brûlé et h_{for} est l'enthalpie de formation des produits de combustion. En respectant l'hypothèse des gaz parfaits, on obtient l'équation générale de conservation de l'énergie dans la chambre de combustion :

$$\frac{dT}{d\theta} = \left[\left(\frac{dQ_{comb}}{d\theta} - \frac{dQ_p}{d\theta} + h_a \frac{dm_a}{d\theta} - h_e \frac{dm_e}{d\theta} + \frac{dm_{carb}}{d\theta} h_{for} - u \frac{dm}{d\theta} \right) \frac{1}{m} - \frac{rT}{V} \frac{dV}{d\theta} - \left(\frac{\partial u}{\partial \phi} \right)_T \frac{d\phi}{d\theta} \right] / \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_v \quad (2.21)$$

$$V = V_m \left[1 + \frac{1}{2} (r_c - 1) \left(\beta + 1 - \cos \theta - \sqrt{\beta^2 - \sin^2 \theta} \right) \right] \quad (2.22)$$

$$\frac{dV}{d\theta} = \frac{V_m}{2} (r_c - 1) \sin \theta \left[1 + \frac{\cos \theta}{\sqrt{\beta^2 - \sin^2 \theta}} \right] \quad (2.23)$$

où V_m est le volume mort, r_c est le rapport de compression et β est le rapport bielle-manivelle.

La température dans la chambre de combustion s'obtient en résolvant l'Équation 2.21 qui reste aussi valable pour les collecteurs d'admission et d'échappement, mais le volume et la

masse de carburant brûlé sont constants. L'équation d'état des gaz parfaits permet de calculer la pression dans la chambre de combustion à chaque pas de temps de la simulation à partir des Équation 2.11, Équation 2.21 et Équation 2.22.

2.3.2 Écoulement à travers les soupapes

L'application des modèles thermodynamiques à l'ensemble du cycle moteur nécessite de connaître les débits des gaz entrant dans la chambre de combustion et sortant par les soupapes. Il est donc nécessaire de bien évaluer ces débits qui conditionnent directement la masse présente dans la chambre de combustion pendant les phases fermées.

Équation du débit

Le débit massique entrant ou sortant à travers une soupape est déterminé à partir de l'Équation 2.24.

$$\frac{dm_i}{d\theta} = \frac{\rho v S_m}{6N} \quad (2.24)$$

avec ρ la masse volumique de l'air, v la vitesse de l'air et S_m la section de passage géométrique offerte par l'ouverture de la soupape.

L'Équation 2.25 est l'équation de Saint-Venant qui exprime la conservation de l'énergie.

$$\frac{v^2}{2} + h = C^{ste} \quad (2.25)$$

avec h l'enthalpie massique des gaz et v leur vitesse donnée par l'Équation 2.26.

$$v = \sqrt{2(h_{am} - h_{aval})} = \sqrt{2c_p(T_{am} - T_{av})} \quad (2.26)$$

L'écoulement est supposé isentropique, on a la relation suivante :

$$\frac{T_{aval}}{T_{am}} = \left(\frac{P_{aval}}{P_{am}} \right)^{\frac{\gamma_{am}-1}{\gamma_{am}}} \quad (2.27)$$

d'où

$$v = \sqrt{2c_p T_{am} \left[1 - \left(\frac{P_{aval}}{P_{am}} \right)^{\frac{\gamma_{am}-1}{\gamma_{am}}} \right]} \quad (2.28)$$

En notant γ le rapport des chaleurs massiques et r la constante massique des gaz, on a l'Équation 2.29 :

$$\begin{cases} \gamma = \frac{c_p}{c_v} \\ r = c_p - c_v \\ p = \rho r T \end{cases} \quad (2.29)$$

la vitesse v peut se mettre sous la forme donnée par l'Équation 2.30.

$$v = \sqrt{\frac{2\gamma_{am} P_{am}}{(\gamma_{am} - 1)\rho_{am}} \left[1 - \left(\frac{P_{aval}}{P_{am}} \right)^{\frac{\gamma_{am}-1}{\gamma_{am}}} \right]} \quad (2.30)$$

En tenant compte des pertes à travers une soupape, le débit massique de l'écoulement est donnée par l'Équation 2.31.

$$\frac{dm}{d\theta} = \frac{S_m C_d p_{am}}{6N} \times \sqrt{\frac{2\gamma_{am}}{(\gamma_{am}-1)r_{am}T_{am}} \left[(R_p)^{\frac{2}{\gamma_{am}}} - (R_p)^{\frac{\gamma_{am}+1}{\gamma_{am}}} \right]} \quad (2.31)$$

où C_d est le coefficient de décharge de la soupape. La valeur du rapport de pression est limitée par les conditions de col sonique au passage de la soupape. Le débit est maximum lorsque la vitesse du fluide au col atteint la vitesse du son.

$$R_a^p = \begin{cases} \frac{p_{av}}{p_{am}} & \text{si } \frac{p_{av}}{p_{am}} < R_p^c \\ R_p^c & \text{si } \frac{p_{av}}{p_{am}} > R_p^c \end{cases} \quad (2.32)$$

avec R_p^c le rapport de compression critique donné par l'Équation 2.33.

$$R_p^c = \left(\frac{2}{\gamma_{am} + 1} \right)^{\frac{\gamma_{am}}{\gamma_{am}-1}} \quad (2.33)$$

En écoulement subsonique, le débit massique est fonction de deux pressions alors qu'en régime supersonique, le débit est bloqué et n'est régi que par la pression amont. Dans le cas d'un écoulement inverse qui se présente quand les pressions de la chambre de combustion et de l'extérieur sont échangées par rapport au cas d'écoulement subsonique.

$$\frac{dm_a}{d\theta} = \begin{cases} \frac{A_r C_d p_a}{6N} \sqrt{\frac{2\gamma_a}{(\gamma_a-1)r_a T_a} \left((R_a^p)^{\frac{2}{\gamma_a}} - (R_a^p)^{\frac{\gamma_a+1}{\gamma_a}} \right)} & \text{si } p < p_a \text{ et } R_a^p > R_p^c \\ -\frac{A_r C_d p}{6N} \sqrt{\frac{2\gamma}{(\gamma-1)rT} \left((R_a^p)^{\frac{2}{\gamma}} - (R_a^p)^{\frac{\gamma+1}{\gamma}} \right)} & \text{si } p > p_a \text{ et } R_a^p > R_p^c \\ \frac{A_r C_d p_a}{6N} \sqrt{\frac{\gamma_a}{r_a T_a} \left(\frac{2\gamma_a}{\gamma_a+1} \right)^{\frac{\gamma_a+1}{\gamma_a-1}}} & \text{si } R_a^p < R_p^c \end{cases} \quad (2.34)$$

$$\frac{dm_e}{d\theta} = \begin{cases} \frac{A_r C_d p_e}{6N} \sqrt{\frac{2\gamma_e}{(\gamma_e-1)r_e T_e} \left((R_e^p)^{\frac{2}{\gamma_e}} - (R_e^p)^{\frac{\gamma_e+1}{\gamma_e}} \right)} & \text{si } p > p_e \text{ et } R_e^p > R_p^c \\ -\frac{A_r C_d p}{6N} \sqrt{\frac{2\gamma}{(\gamma-1)rT} \left((R_e^p)^{\frac{2}{\gamma}} - (R_e^p)^{\frac{\gamma+1}{\gamma}} \right)} & \text{si } p < p_e \text{ et } R_e^p > R_p^c \\ \frac{A_r C_d p_e}{6N} \sqrt{\frac{\gamma_e}{r_e T_e} \left(\frac{2\gamma_e}{\gamma_e+1} \right)^{\frac{\gamma_e+1}{\gamma_e-1}}} & \text{si } R_e^p < R_p^c \end{cases} \quad (2.35)$$

Les Équation 2.34 et Équation 2.35 sont valables si le débit est supposé strictement unidirectionnel. En revanche, lorsque le rapport des pressions s'inverse, le sens du débit s'inverse aussi. Ce cas peut se présenter au niveau du port d'admission pendant la période où la soupape est ouverte et si la pression qui règne dans la chambre de combustion devient supérieure à celle du collecteur d'admission. Une fraction des gaz brûlés résiduels est refoulée dans le collecteur. Ce phénomène peut aussi survenir pendant l'échappement des gaz. Dans ce cas, une fraction des gaz contenus dans le collecteur d'échappement peut se retourner dans la chambre de combustion.

En tenant compte du refoulement des gaz, les deux équations ci-dessus restent valables selon que la vitesse de l'écoulement dépasse ou non la célérité du son.

Section de passage géométrique

Il est nécessaire également de connaître la section de passage à tout instant et de connaître précisément la géométrie qui caractérise toute la soupape afin de déterminer le débit à travers celle-ci.

La phase la plus utile lors de l'ouverture d'une soupape est celle d'ouverture maximale qui permet de faire passer le plus grand débit. Cependant, une situation transitoire est inévitable et il faut essayer de modéliser au mieux l'élévation de la section de passage au cours du temps.

La loi de levée reflète le mouvement des soupapes au cours de leur ouverture et de leur fermeture, sa modélisation a été réalisée suivant l'Équation 2.36 [101].

$$L_v(\theta) = \frac{1}{2}L_{v\max} \left[1 + \tan\left(\frac{\theta + AO}{\text{pente}}\right) \tanh\left(\frac{180 - \theta - RF}{\text{pente}}\right) \right] \quad (2.36)$$

avec

- ★ θ est l'angle du vilebrequin en degrés ;
- ★ AO est l'avance à l'ouverture ;
- ★ RF est le retard à la fermeture ;
- ★ pente est la rapidité d'ouverture et de fermeture des soupapes.

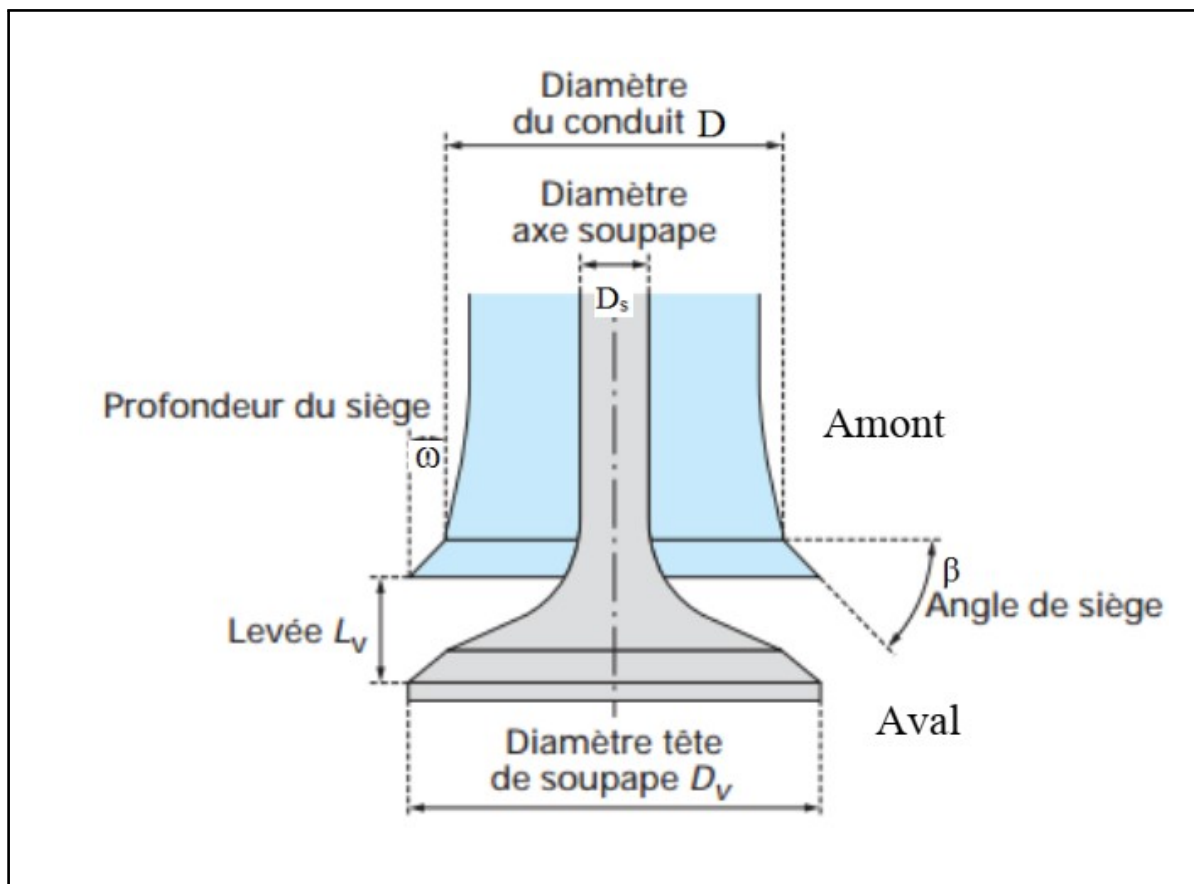


Figure 2.3: Caractéristiques géométriques d'une soupape.

La Figure 2.3 représente le schéma d'une soupape et ses caractéristiques géométriques. où

- ★ D_v est le diamètre de la soupape ;
- ★ L_v est la levée de la soupape ;
- ★ $D_s = 0,2 \times D_v$ est le diamètre de la tige de la soupape ;
- ★ $D_p = 0,8 \times D_v$ est le diamètre du conduit d'admission ;
- ★ $w = 0,05 \times D_v$ est la largeur du chanfrein ;
- ★ β est l'angle du chanfrein de la soupape.

La valeur de la section de passage des gaz à travers la soupape d'admission en fonction de la loi de levée est définie à partir de cette géométrie de la soupape. Cette section de passage des gaz est soumise à une ouverture en trois étapes selon le mode d'écoulement qui résulte de l'état d'ouverture de la soupape.

- ☉ Au démarrage de l'ouverture, la soupape est peu ouverte et l'écoulement est parallèle au chanfrein. L'intervalle de la levée de la soupape L_v est donné comme suit.

$$0 < L_v < \frac{w}{\sin \beta \cos \beta} \quad (2.37)$$

La section de passage S_m de la soupape est modélisée comme suit :

$$S_m = \pi L_v \cos \beta \left(D_v - 2w + \frac{L_v}{2} \sin(2\beta) \right) \quad (2.38)$$

- ☉ L'ouverture de la soupape est dans une position intermédiaire, la section de passage amont commence par influencer le débit des gaz. L'intervalle de la levée de la soupape L_v est donné comme suit.

$$\frac{w}{\sin \beta \cos \beta} < L_v < w \tan \beta + \sqrt{\left(\frac{D_p^2 - D_s^2}{4(D_v - w)} \right)^2 - w^2} \quad (2.39)$$

La section de passage S_m de la soupape est modélisée comme suit :

$$S_m = \pi(D_v - w) \sqrt{(L_v - w \tan \beta)^2 + w^2} \quad (2.40)$$

- ☉ Lorsque la soupape est bien ouverte, la section de passage amont influence intégralement l'écoulement. L'intervalle de la levée de la soupape L_v est donné comme suit.

$$L_v > w \tan \beta + \sqrt{\left(\frac{D_p^2 - D_s^2}{4(D_v - w)} \right)^2 - w^2} \quad (2.41)$$

Dans cette configuration, la section de passage S_m de la soupape est modélisée comme suit :

$$S_m = \frac{\pi}{4} (D_p^2 - D_s^2) \quad (2.42)$$

À ces considérations géométriques, les considérations de mécanique des fluides en termes de pertes de charges à travers les sections de passage définies sont ajoutées. Selon des mesures expérimentales présentées par Heywood [101], le coefficient de pertes de charge varie de 0,5 à 0,7. Il dépend de l'architecture complète de la soupape, de son conduit d'admission et de la levée de la soupape qui peut engendrer d'importantes zones de recirculation lorsque celle-ci est peu ouverte. Dans le cadre de ce travail, la moyenne des coefficients de pertes de charge égale à 0,6 est utilisée.

2.3.3 Transferts thermiques pariétaux

Dans un moteur à combustion interne, une partie de la chaleur issue de la combustion est transmise aux parois de la chambre de combustion. Le flux d'énergie transmis des gaz aux parois de la chambre de combustion dépend du gradient de température au niveau de cette interface, il est donné par l'Équation 2.43

$$\frac{dQ_p}{dt} = h_c S (T - T_p) \quad (2.43)$$

où T_p est la température locale, supposée constante, des parois de la chambre de combustion c'est-à-dire le moteur a atteint une température stationnaire et que son inertie thermique est telle qu'on peut négliger les variations de température du bloc moteur. Ce choix implique que le modèle n'est pas adapté aux simulations des démarrages à froid ou durant les périodes de mise en température. S la surface instantanée d'échange donnée par l'Équation 2.44.

$$S = \frac{\pi b^2}{2} + \frac{\pi b a}{2} \left(\beta + 1 - \cos \theta - \sqrt{\beta^2 - \sin^2 \theta} \right) \quad (2.44)$$

La difficulté majeure réside dans la détermination du coefficient de transfert de chaleur par convection h_c . Le coefficient de transfert de chaleur par convection h_c utilisé est la corrélation de Woschni basée sur l'hypothèse de la convection turbulente forcée. La formulation de ce coefficient est donnée par l'Équation 2.45.

$$h_c = 3,26 b^{-0,2} p^{0,8} T^{-0,55} w^{0,8} \quad (2.45)$$

Cette corrélation inclut une dépendance du coefficient de transfert de chaleur par convection h_c avec la vitesse moyenne w des gaz dans la chambre de combustion. Woschni postule que cette dernière est proportionnelle à la vitesse moyenne V_p du piston pendant les phases d'admission, de compression et d'échappement. Pendant les phases de combustion et de détente, la vitesse moyenne des gaz est proportionnelle à l'écart entre la pression dans la chambre de combustion et la pression en régime entraîné p_{ent} .

$$w = C_1 V_p + C_2 \frac{V_d T_r}{p_r V_r} (p - p_{ent}) \quad (2.46)$$

où p_r , T_r et V_r sont respectivement la pression, la température et le volume de la chambre de combustion au moment de l'auto-inflammation du carburant. Les valeurs des coefficients C_1 et C_2 illustrés dans le Tableau 2.2 varient en fonction du temps moteur.

On approche la pression p_{ent} avec la relation décrivant une compression et une détente polytropique :

$$p_{ent} = p_r \left(\frac{V_r}{V} \right)^k \quad (2.47)$$

où k est le coefficient de compressibilité.

Tableau 2.2: Coefficients de la corrélation de Woschni.

Période du cycle	C_1	C_2
Admission	6,18	0
Échappement	2,28	0
Compression	2,28	0
Combustion et détente	2,28	$3,24 \times 10^{-3}$

2.3.4 Délai d'auto-inflammation du carburant

Le délai d'auto-inflammation est l'intervalle de temps entre le début de l'injection et le début de la combustion. Il est l'un des critères les plus importants qui ont une influence sur le processus de combustion dans les moteurs à allumage par compression par conséquent il a une influence sur les efforts mécaniques que subissent les différents organes mécaniques et les émissions polluantes.

Dans le cas des moteurs à allumage par compression à injection directe, chaque injection s'accompagne d'un délai d'auto-inflammation dont la durée dépend directement des conditions thermochimiques locales de la chambre de combustion. Ce délai d'auto-inflammation exprime le temps écoulé entre le début de l'injection t_{inj} et le début de combustion t_{comb} :

$$\tau_{ai} = t_{comb} - t_{inj} \quad (2.48)$$

Heywood [101] a déclaré que le délai d'auto-inflammation est atteint quand l'intégrale du temps caractéristique est égale à 1 :

$$\int_{t_{inj}}^{t_{comb}} \frac{1}{\tau_{ai}} dt = 1 \quad (2.49)$$

Le délai d'auto-inflammation est composé :

- * d'un délai physique ou d'un temps caractéristique physique τ_{ph} au cours duquel l'atomisation, l'évaporation et le mélange du carburant avec l'air ont lieu ;
- * d'un délai chimique ou d'un temps caractéristique chimique τ_{ch} qui est le laps de temps entre le moment où les réactifs sont en phase gazeuse et l'instant où la combustion commence.

Ces grandeurs τ_{ph} et τ_{ch} correspondent, respectivement, au temps mis par le carburant pour s'évaporer et au temps caractéristique d'activation des réactions chimiques de combustion. Dans la réalité, ces deux phénomènes se superposent :

$$\tau_{ai} = \tau_{ph} + \tau_{ch} \quad (2.50)$$

τ_{ph} peut se déterminer soit à partir d'un modèle d'évaporation soit considéré comme constant.

Ces deux délais ont lieu de manière simultanée, ce qui a amené plusieurs chercheurs à mettre sur pied des formulations empiriques permettant de déterminer ces délais comme étant une entité unique.

Le délai d'auto-inflammation est exprimé par une corrélation de la forme d'Arrhenius, donnée par l'Équation 2.51, qui prend en compte la pression et la température dans la chambre de combustion.

$$\tau_{ai} = A \bar{p}^{-m} \exp\left(\frac{E_A}{R\bar{T}}\right) \quad (2.51)$$

où A est généralement une constante dépendante du carburant utilisé qui caractérise la fréquence de collision des molécules réactives, \bar{p} est la pression moyenne dans la chambre de combustion au moment de la levée de l'aiguille de l'injecteur, \bar{T} est la température moyenne au moment de la levée de l'aiguille de l'injecteur, R est la constante des gaz parfaits, m est une constante qui caractérise la cinétique de combustion du carburant liquide et E_A est l'énergie d'activation néces-

saire à l'auto-inflammation du carburant ; elle se déduit du nombre de cétane CN du carburant et son expression est donnée par Hardenberg et Hase [101] :

$$E_A = \frac{618840}{CN + 25} \quad (2.52)$$

Dans le cas où le nombre de cétane du carburant est supérieur ou égal à 50, la formule du délai d'auto-inflammation développée par Hardenberg et Haze [101] est utilisée.

$$\tau_{ai} (^{\circ}V) = (0,36 + 0,22V_p) \exp \left[E_A \left(\frac{1}{R\bar{T}} - \frac{1}{17,190} \right) + \left(\frac{21,2}{\bar{p} - 12,4} \right)^{0,63} \right] \quad (2.53)$$

où \bar{T} et \bar{p} sont les valeurs moyennes respectivement de la température et de la pression dans la chambre de combustion au moment de la levée de l'aiguille de l'injecteur.

2.4 Modèle phénoménologique de combustion à deux zones

Le modèle de combustion à deux zones de Ferguson et Olikara divise la chambre de combustion en deux zones constituées d'une zone des gaz brûlés et d'une autre zone des gaz imbrûlés. Les propriétés thermodynamiques des gaz, produits de combustion, se calculent en utilisant les hypothèses d'équilibre chimique lors des réactions chimiques qui ont lieu au cours de la combustion. Sur la [Figure 2.4](#), dm_{comb}/dt est le débit de masse des gaz transférés de la zone des gaz frais vers la zone des gaz brûlés induit par la combustion [139]. Rakopoulos et al. [140] ont illustré que les modèles multizones sont précis et bien adaptés pour la prédiction des polluants.

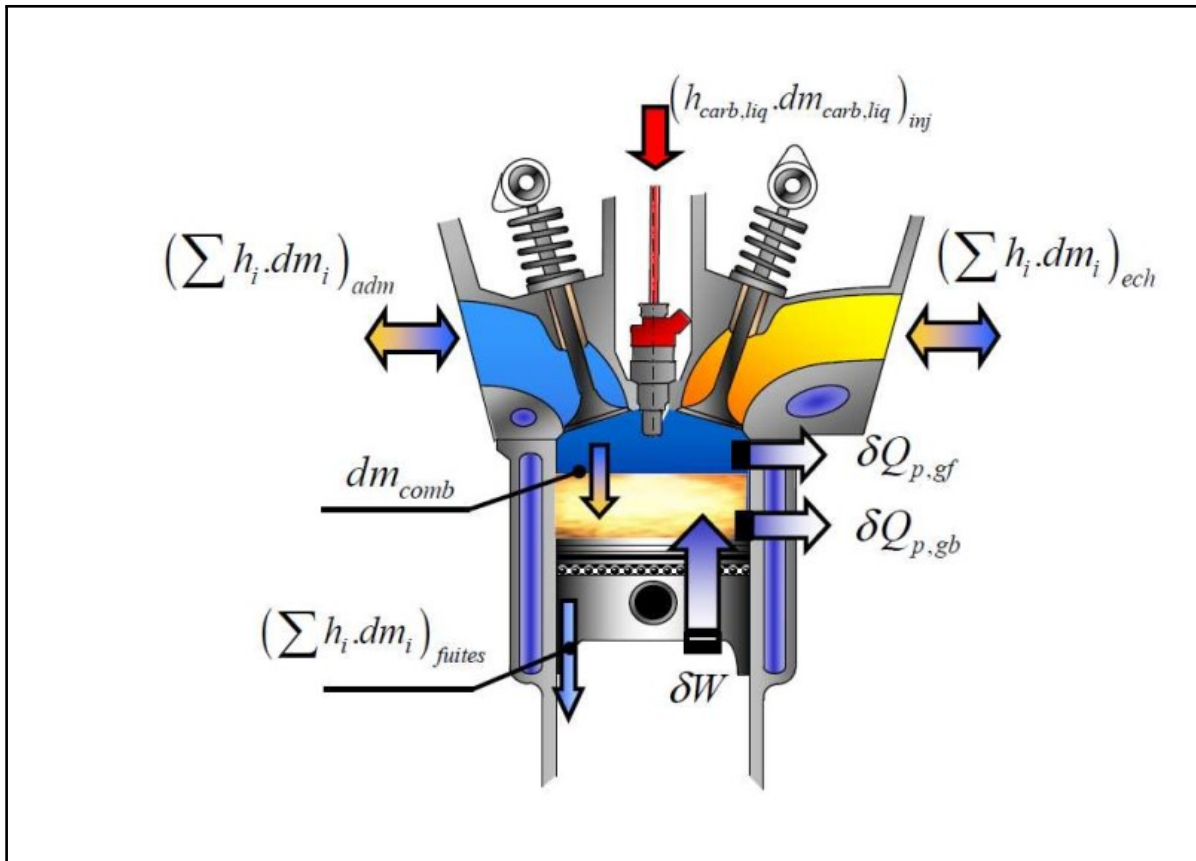


Figure 2.4: Bilan énergétique du modèle de combustion de Ferguson et Olikara.

Le mélange des gaz dans la chambre de combustion échange avec le milieu extérieur à travers des transferts thermiques aux parois, du travail effectué par le piston, de la variation d'enthalpie massique induite par les différents mécanismes de transfert de masse à savoir l'injection de carburant liquide, les fuites aux segments et des transferts de masse aux soupapes.

Le processus d'injection est simulé par une approche phénoménologique et a un effet dominant sur la formation de mélange réactif et le processus de combustion qui suit.

Ces modèles se subdivisent en sous-modèles zéro dimensionnels, couplés les uns aux autres, qui modélise chacun un des phénomènes ayant cours à chaque cycle. Les principaux sous-modèles sont l'injection et la pulvérisation, l'évaporation, le délai d'auto-inflammation, le sous-modèle thermodynamique et les sous-modèles d'émissions.

2.4.1 Injection, pulvérisation et pénétration du jet liquide

La création d'un mélange air-carburant approprié dans la chambre de combustion de moteur à allumage par compression est importante car elle contrôle le taux de dégagement de chaleur et, par conséquent, la pression et la formation des polluants. L'atomisation du carburant et la pulvérisation jouent un rôle crucial dans la préparation du mélange carburant-air en plus du flux d'air à l'intérieur de la chambre de combustion. Le diamètre moyen de Sauter (SMD), l'angle du cône (SCA) et la pénétration sont les principaux paramètres de pulvérisation qui influencent le processus de mélange air-carburant dans la chambre de combustion d'un moteur à allumage par compression [101]. Une plus petite taille des gouttelettes dans le pulvérisateur augmente le taux d'évaporation et améliore le mélange de vapeur de carburant et d'air. Un angle de cône de pulvérisation adéquat aide à distribuer le carburant liquide sur tout le volume de la chambre de combustion du moteur pour générer un mélange air-carburant uniforme. Si le carburant diesel conventionnel est remplacé par le carburant biodiesel lors du fonctionnement d'un moteur, les caractéristiques de la pulvérisation de carburant générée par l'injecteur de carburant diffèrent en raison de la variation des propriétés du carburant.

Trois propriétés importantes du carburant, qui influencent le processus de formation de la pulvérisation, sont la masse volumique, la viscosité et la tension superficielle.

L'angle du cône de pulvérisation (SCA) pour les pulvérisations de carburant est évalué en utilisant le modèle de Varde [141] donné par :

$$\tan \theta = A_1 \left(\frac{\rho_a}{\rho_{\text{carb}}} \right)^{\frac{1}{3}} (Re)^{\frac{1}{3}} (We)^{A_2} \quad (2.54)$$

où

$$A_1 = \begin{cases} 0,0001 \left(\frac{1}{d} \right)^5 & \text{si } \frac{1}{d} < 6 \\ 0,7 & \text{si } \frac{1}{d} > 6 \end{cases} \quad (2.55)$$

$$A_2 = \frac{3 - \frac{1}{d}}{31} \quad (2.56)$$

$$Re = \frac{ud\rho_{\text{carb}}}{\eta} \quad (2.57)$$

$$We = \frac{u^2 d \rho_{\text{carb}}}{\sigma} \quad (2.58)$$

La vitesse d'injection u est donnée par :

$$u = C_d \left(\frac{2\Delta p}{\rho_{\text{carb}}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.59)$$

où C_d est le coefficient de décharge.

$$C_d = 0,827 - 0,0085 \frac{1}{d} \quad (2.60)$$

En exprimant l'Équation 2.54 en termes de tension superficielle et de viscosité du carburant injecté, on réécrit :

$$\tan \theta = \frac{A_1 \rho_a^{\frac{1}{3}} d^{(A_2 + \frac{1}{3})} (2C_d^2 \Delta p)^{(A_2 + \frac{1}{6})}}{\eta_{\text{carb}}^{\frac{1}{3}} \rho_{\text{carb}}^{\frac{1}{6}} \sigma_{\text{carb}}^{A_2}} \quad (2.61)$$

La finesse de pulvérisation agit sur la qualité de combustion dans la chambre de combustion ; plus les gouttelettes de carburant pulvérisé sont fines, plus la distribution des gouttelettes sera homogène dans la chambre de combustion ; plus le mélange air-carburant est susceptible de brûler complètement [142]. L'injection de carburant est caractérisée par :

- ★ la pénétration du jet liquide ou longueur de transition (l_b) qui caractérise la pénétration du jet liquide dans la chambre ;
- ★ la pénétration du mélange vapeur-liquide (S) qui caractérise la distance parcourue après le break-up du carburant injecté ;
- ★ l'angle (2θ) ou demi-angle du jet (θ) ;
- ★ la finesse d_{32} .

La longueur de transition caractérise la phase initiale du jet pendant laquelle le liquide injecté constitue une masse uniforme se déplaçant le long de l'axe d'injection. Au-delà du temps de break-up, la phase liquide se décompose en fines gouttelettes dont le diamètre est caractérisé par le diamètre moyen de Sauter, qui par la suite, s'évaporeront à cause de la température élevée à l'intérieur de la chambre de combustion. La détermination de l'angle du jet revêt une importance primordiale. En effet, il est nécessaire de savoir si oui ou non le jet atteindra les parois de la chambre de combustion pour évaluer les interactions éventuelles. La finesse de la pulvérisation revêt également une importance avérée car elle dépend de la cinétique de combustion du carburant liquide dans la chambre de combustion. La Figure 2.5 illustre les caractéristiques du jet d'un carburant à l'intérieur de la chambre de combustion.

La majorité des corrélations empiriques qui décrit la pénétration du jet dépend de la masse volumique du carburant, de la pression d'injection, du diamètre des trous d'injecteurs et de la pression de l'air à l'intérieur de la chambre de combustion.

2.4.2 Modèle de l'angle de jet

Le carburant sous forme liquide pénètre dans la chambre de combustion à très haute pression. Deux phases apparaissent très rapidement et on distingue deux types de pénétration à savoir la pénétration vapeur maximum et la pénétration liquide maximum. La pénétration liquide atteint rapidement un maximum et se stabilise alors que la pénétration vapeur se développe bien plus en avant. Ceci s'explique par un phénomène physique appelé break-up [143]. Lorsque le temps de break-up est atteint, le carburant liquide entre dans la phase d'atomisation. Une fois

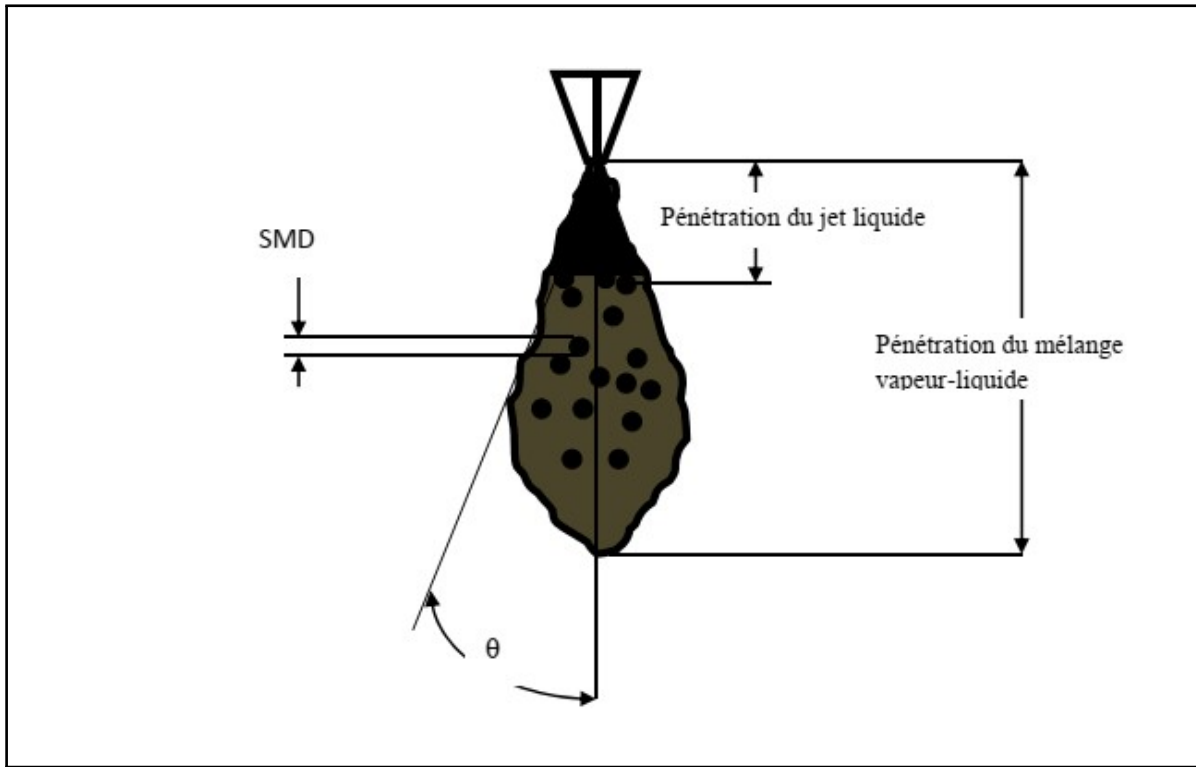


Figure 2.5: Caractéristiques du jet d'un carburant.

cette phase atteinte, il existe, à une certaine distance du nez de l'injecteur, une distribution de taille de gouttes de carburant liquide. Ces gouttes, qui continuent à pénétrer, subissent ensuite plusieurs phénomènes physiques à savoir l'atomisation secondaire, la coalescence et l'évaporation. L'expansion du jet entraîne des gaz ambiants par un phénomène de transfert de quantité de mouvement.

L'hypothèse adoptée consiste à considérer la géométrie d'un jet comme un cône parfait. Ceci implique en première approche de négliger l'impact de l'aérodynamique et des parois sur la géométrie du spray. Naber et Siebers [144] ont effectué des travaux de recherche en se basant sur des résultats expérimentaux réalisés dans une chambre à combustion à volume constant couvrant une plage de températures allant de 400 à 1400 K et des conditions des masses volumiques de 4 à 100 kg/m³ pour caractériser l'effet de la température et de la masse volumique sur le jet. Ils en ont déduit une corrélation pour la pénétration maximum. Par la suite, Siebers développera d'autres corrélations, principalement pour l'angle [145] ainsi que pour la pénétration liquide maximum [146].

Dans sa description d'un angle de jet, Lefebvre [147] explique que celui-ci croît très rapidement en début d'injection, atteint un maximum, puis décroît pour atteindre une valeur asymptotique. C'est cette valeur asymptotique qui est modélisée.

Siebers [145] propose une corrélation pour la détermination de l'angle de jet θ :

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = C_{\theta} \left[\left(\frac{\rho_{\text{amb}}}{\rho_{\text{carb},l}} \right)^{0,19} - 0,0043 \left(\frac{\rho_{\text{carb},l}}{\rho_{\text{amb}}} \right)^{0,5} \right] \quad (2.62)$$

avec C_{θ} une constante qui est liée à la géométrie de l'injecteur modélisé et qui varie de 0,255 à 0,276 .

Dans cette corrélation, le rapport des masses volumiques des gaz ambiants et du carburant liquide est pris en compte. Pour Siebers, l'angle du jet dépend exclusivement de l'état des condi-

tions thermodynamiques relatives aux gaz ambiants pour un injecteur donné. Cette corrélation a été choisie parmi d'autres corrélations.

2.4.3 Modèle de pénétration vapeur maximum

Les modèles de pénétration vapeur sont classés soit selon la théorie basée sur la pulvérisation et l'éclatement du jet développé par Hiroyasu et al. [148], l'approche qui utilise la théorie du moment décrite par Wakuri et al. [149] et utilisée par Siebers [144] soit selon l'utilisation de la physique diphasique par Sazhin et al. [150]. Notre choix s'est porté sur l'approche développée par Siebers.

Ce choix se justifie pour deux raisons majeures :

- ★ l'écriture de la pénétration se fait à l'aide de la valeur de l'angle de jet ;
- ★ ce modèle a l'avantage d'être continu et dérivable ce qui sera intéressant pour son adaptation à des cas des moteurs à combustion interne.

Siebers a exprimé une pénétration adimensionnée en fonction des termes de substitution [144] :

$$\tilde{S} = \left[\left(\frac{1}{\tilde{t}} \right)^n + \left(\frac{1}{\tilde{t}^{\frac{1}{2}}} \right)^n \right]^{-\frac{1}{n}} \quad (2.63)$$

où

- * $\tilde{S} = \frac{S}{x^+}$ est la pénétration adimensionnée ;
- * $\tilde{t} = \frac{t}{t^+}$ est le temps adimensionné ;
- * n est une constante du modèle dont sa valeur prise est 2,2 pour le cas de jet vapeur.

Les différentes grandeurs sont adimensionnées à l'aide d'une échelle temporelle t^+ et d'une longueur caractéristique x^+ :

$$x^+ = \frac{d_0 \left(\frac{\rho_{\text{carb},l}}{\rho_{\text{amb}}} \right)^{0,5}}{a \times \tan\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (2.64)$$

$$t^+ = \frac{d_0 \left(\frac{\rho_{\text{carb},l}}{\rho_{\text{amb}}} \right)^{0,5}}{a \times \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) \times v_{\text{carb},l}} \quad (2.65)$$

où

- * a est une constante dont sa valeur prise est 0,66 ;
- * d_0 est le diamètre géométrique de la buse ;
- * $v_{\text{carb},l}$ est la vitesse réelle au nez de l'injecteur.

La vitesse réelle au nez de l'injecteur est déduite de l'équation :

$$v_{\text{carb},l} = \frac{v_0}{C_a} \quad (2.66)$$

Pour obtenir un modèle de spray le plus prédictif possible, il est nécessaire de connaître précisément certaines données telles que la vitesse et la quantité de mouvement du carburant en sortie de l'injecteur. Pour cela, il faut tenir compte des pertes de charge et de la cavitation qui vont influencer très fortement ces données.

Dans le cas théorique d'une absence de cavitation, la vitesse au nez de l'injecteur s'exprime en fonction du débit massique réel de l'injecteur :

$$v_0 = \frac{\dot{m}_{\text{carb},l}}{\rho_{\text{carb},l} \times S_0} \quad (2.67)$$

où

- * $\dot{m}_{\text{carb},l}$ est le débit massique de carburant ;
- * $\rho_{\text{carb},l}$ est la masse volumique du carburant considéré ;
- * S_0 est la section géométrique du trou de l'injecteur.

La vitesse est soumise aux pertes de charge au travers de la valeur supposée réelle du débit massique. La cavitation est un phénomène physique qui va impacter la section efficace de l'injecteur par la création de bulles de gaz le long des parois dans le trou de l'injecteur. La section effective est donc déterminée à l'aide de l'Équation 2.68 :

$$S_{\text{eff}} = C_a \times S_0 \quad (2.68)$$

avec C_a le coefficient de contraction de l'injecteur qui varie en fonction de la pression d'injection. L'angle de spray est influencé par différentes propriétés du système du processus d'injection telles que les paramètres du système d'injection, les conditions thermodynamiques de la chambre de combustion et les propriétés du carburant injecté.

2.4.4 Diamètre moyen des gouttelettes pulvérisées

Une des fonctions importantes du système d'injection de carburant est de le pulvériser en gouttelettes très fines, en général autour de 10 μm de diamètre dans la taille. L'atomisation augmente considérablement la superficie du combustible liquide et accélère le procédé de vaporisation.

Le diamètre moyen de Sauter (SMD) représente la taille d'une goutte possédant en moyenne le même ratio volume et surface que l'ensemble des gouttes du spray et permet de caractériser la pénétration des gouttes dans l'air. Il est fonction du rapport entre l'inertie des gouttes et leur résistance aérodynamique. Il est une quantité caractérisant la taille moyenne des gouttelettes d'un jet de carburant pulvérisé et est utilisé pour définir la durée moyenne de combustion du mélange dans la chambre de combustion. Différentes corrélations sont disponibles dans la littérature pour prédire le diamètre moyen de Sauter (SMD) de la pulvérisation d'un injecteur de carburant de moteur à allumage par compression. La corrélation proposée par Elkotb [151] est applicable aux sprays dans les moteurs à allumage par compression. Eijm et al. [152] ont suggéré que la même corrélation s'applique également au carburant biodiesel. La corrélation du modèle de Elkotb est présentée en termes de viscosité cinématique et de tension superficielle du carburant injecté et elle est donnée par l'Équation 2.69.

$$\text{SMD} = 6156 \Delta p^{-0,54} \rho_a^{0,06} \rho_{\text{carb}}^{0,352} \eta_{\text{carb}}^{0,385} \sigma_{\text{carb}}^{0,737} \quad (2.69)$$

Dans l'Équation 2.69, Δp désigne la différence de pression d'injection, ρ_{carb} est la masse volumique du carburant, ρ_a est la masse volumique de l'air dans la chambre de combustion, η_{carb} est la viscosité cinématique du carburant et σ_{carb} est la tension superficielle du carburant.

2.4.5 Modèles d'évaporation

La concentration des vapeurs du carburant injecté et pulvérisé dans la chambre de combustion est proportionnelle à sa vitesse d'évaporation ce qui a une influence décisive sur les performances des moteurs à combustion interne. La distribution du jet de carburant, son aérodynamique, la température ambiante ainsi que la composition des gaz dans la chambre de combustion ont une grande influence sur l'évaporation du carburant.

Les hypothèses suivantes sont formulées dans les modèles d'évaporation du carburant pulvérisé dans les moteurs à allumage par compression :

- les gouttelettes de carburant possèdent des propriétés physiques homogènes ;
- les équations d'état décrivant les paramètres thermodynamiques des gouttelettes sont basées sur la théorie des gaz parfaits ;
- l'air ne se dissout pas dans la phase liquide du carburant ;
- les effets de radiations et de gravitation sont négligeables.

L'approche théorique proposée par Godsave [153] et Spalding [154] définit la variation du carré du diamètre de la gouttelette pulvérisée par rapport au temps. La variation du carré du diamètre d'une gouttelette de carburant pulvérisée par rapport au temps dans une chambre de combustion de moteur à allumage par compression est donnée par l'Équation 2.70.

$$d_k^2 = d_0^2 - K\tau_i \quad (2.70)$$

où d_0 est le diamètre initial de la gouttelette, d_k est le diamètre à l'instant d'observation de la gouttelette, K est la constante d'évaporation et τ_i est le temps écoulé à partir du début de l'évaporation d'une gouttelette donnée jusqu'au moment d'observation. En se basant sur l'hypothèse d'homogénéité de la distribution des gouttelettes dans la chambre de combustion, la finesse d_{32} est égale au diamètre initial de la gouttelette d_0 .

La constante d'évaporation K est donnée par la formule suivante [155].

$$K = \frac{4 \times 10^6 N_u D_v p_{\text{sat}}}{\rho_l} \quad (2.71)$$

où N_u est le nombre de Nusselt pour la diffusion, D_v est le coefficient de diffusion des vapeurs de carburant dans la chambre de combustion, p_{sat} est la pression des vapeurs saturée de carburant.

Pour Godsavel [153] et Spalding [154], la constante d'évaporation K caractérise la vitesse de diminution des dimensions de la gouttelette initialement formée après pulvérisation. L'Équation 2.71 montre que cette constante est inversement proportionnelle à la masse volumique du carburant ce qui veut dire que plus la masse volumique d'un carburant est grande, moins vite ses gouttelettes s'évaporeront après pulvérisation dans une chambre de combustion des moteurs à allumage par compression.

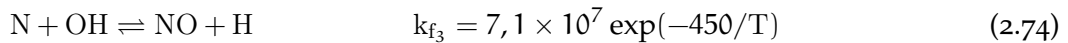
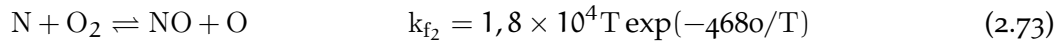
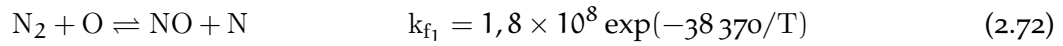
2.4.6 Formations des oxydes d'azote

Le monoxyde d'azote est le composant principal des émissions de NO_x dans les moteurs à combustion interne. Pendant la combustion, trois sources probables de formation des monoxydes d'azote ont été identifiées [156] :

NO thermique

La formation de NO thermique est déterminée par un ensemble de réactions chimiques fortement dépendantes de la température. Le mécanisme de formation du NO thermique [101] est régi par les trois réactions suivantes désignées sous le nom de mécanisme étendu de Zeldovich. Le mécanisme de Zeldovich originel comprenait les deux premières réactions, la troisième réaction a été ajoutée par Lavoie [157].

Les réactions et les constantes de vitesse pour ce mécanisme qui prend en compte 10 produits de combustion sont données par les Équation 2.72 à Équation 2.74.



En supposant que O, OH, O₂ et H sont à leurs concentrations à l'équilibre chimique. La concentration de N₂ est essentiellement constante. Les radicaux N sont à un état quasi-stationnaire. Compte tenu de la température, de la pression et de la richesse du mélange ϕ , les produits de combustion à l'équilibre chimique sont calculés pour déterminer les concentrations de N₂, O, NO et H.

Deux approximations sont utilisées : pour la première approximation, le système C-H-O-N est à l'équilibre chimique et il n'est pas perturbé par la dissociation chimique de N₂ et pour la deuxième approximation, la concentration des radicaux N change par un processus quasi-stationnaire.

Avec ces deux approximations, la vitesse de formation de NO est déterminé comme suit :

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = \frac{2R_1(1 - \alpha^2)}{(1 + K\alpha)} \quad (2.75)$$

où

$$\alpha = \frac{[\text{NO}]}{[\text{NO}]_e} \quad \text{et} \quad K = \frac{R_1}{R_2 + R_3} \quad (2.76)$$

Les constantes R₁, R₂ et R₃ sont définies par :

$$R_1 = k_{f_1} [\text{N}_2]_e [\text{O}]_e \quad (2.77)$$

$$R_2 = k_{f_2} [\text{N}]_e [\text{O}_2]_e \quad (2.78)$$

$$R_3 = k_{f_3} [\text{N}]_e [\text{OH}]_e \quad (2.79)$$

Pour contrôler la formation de NO thermique, il est nécessaire de réduire la température pour ralentir la vitesse de formation de N₂. Il est utile d'estimer d'abord de combien la vitesse de formation de NO serait réduit pour une réduction de la température obtenue par l'injection d'une quantité de vapeur donnée. Lorsque le niveau final de NO est bien inférieur à l'équilibre chimique, une réduction de x % des émissions correspond approximativement à une réduction de x % de R₁.

NO prompt

Le mécanisme de Fenimore a son importance significative dans les conditions de basses températures, de fortes richesses en combustible et dans les zones où les temps de séjour sont courts. Parmi l'ensemble de réactions mises en jeu, on retient le schéma réactionnel suivant :



NO du combustible

C'est un processus au cours duquel l'azote contenu dans le carburant réagit avec l'oxygène de l'air lors de la combustion pour former du NO. Les carburants gazeux contiennent une quantité relativement faible d'azote et produisent donc de faibles quantités d'émission de NO par ce processus. Le charbon et les carburants liquides contiennent beaucoup plus d'azote, ainsi la formation de NO de combustible constitue une partie importante de la quantité totale de NO produite par ces types de carburant comparés aux combustibles gazeux.

2.5 Modélisation de l'équilibre chimique

2.5.1 Modèle de combustion à l'équilibre chimique

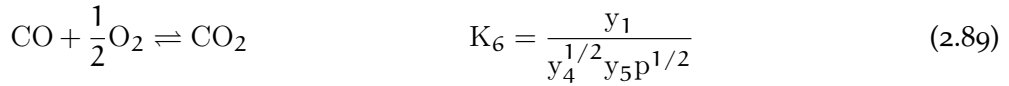
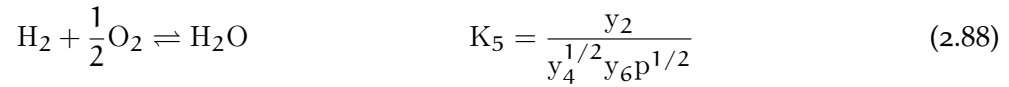
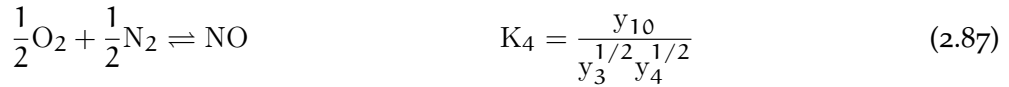
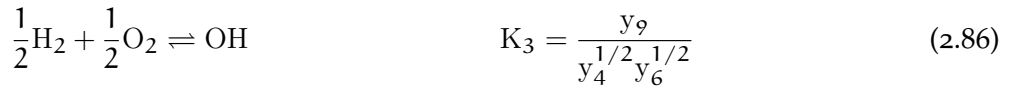
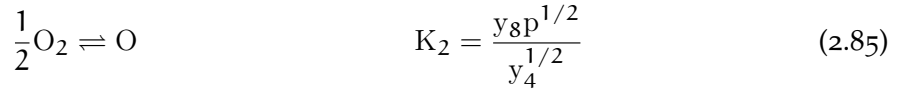
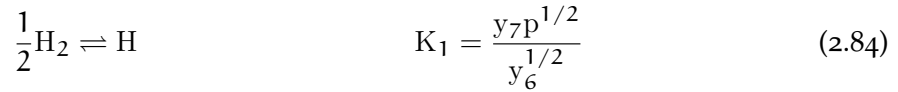
Modèle d'équilibre chimique

Le modèle d'équilibre chimique considère les gaz brûlés comme étant en équilibre chimique et prend en compte les dissociations chimiques. Il fournit l'approximation la plus précise pour l'analyse thermodynamique des moteurs à combustion interne et les fractions molaires exactes des produits de combustion à l'intérieur de la chambre de combustion.

Certaines études utilisent des équations ou des tableaux d'ajustement des propriétés thermodynamiques négligeant le type de carburant, la richesse du mélange ou l'effet de la pression pour déterminer les propriétés des gaz d'échappement.

2.5.2 Produits de combustion à l'équilibre chimique

Les produits de combustion sont constitués de dix espèces qui sont toutes supposées être des gaz idéaux et elles sont définies en considérant les dissociations chimiques des produits de combustion [158] :



où l'unité de pression p est l'atmosphère et K_1 à K_6 sont les constantes d'équilibre des réactions chimiques. Olikara et Borman [159] ont interpolé, en polynômes de température, les constantes d'équilibre K_i aux données des tables JANAF pour l'intervalle de température entre 600 K et 4000 K et ses valeurs sont calculées en utilisant l'Équation 2.90.

$$\log K_i = A_i \ln \left(\frac{T}{1000} \right) + \frac{B_i}{T} + C_i + D_i T + E_i T^2 \quad (2.90)$$

où les coefficients A_i , B_i , C_i , D_i et E_i des constantes d'équilibre K_i sont donnés dans le Tableau 2.3 présenté par Olikara et Borman [158].

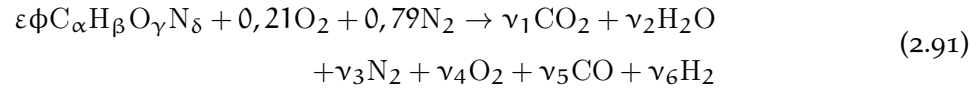
Tableau 2.3: Coefficients des constantes d'équilibre du modèle de combustion de Olikara et Borman.

i	A_i	B_i	C_i	D_i	E_i
1	0,432168	$-0,112464 \times 10^5$	$0,267269 \times 10^1$	$-0,745744 \times 10^{-4}$	$0,242484 \times 10^{-8}$
2	0,310805	$-0,129540 \times 10^5$	$0,321779 \times 10^1$	$-0,738336 \times 10^{-4}$	$0,344645 \times 10^{-8}$
3	$-0,141784$	$-0,213308 \times 10^4$	0,853461	$0,355015 \times 10^{-4}$	$-0,310227 \times 10^{-8}$
4	$0,150879 \times 10^{-1}$	$-0,470959 \times 10^4$	0,646096	$0,272805 \times 10^{-5}$	$-0,154444 \times 10^{-8}$
5	$-0,752364$	$0,124210 \times 10^5$	$-0,260286 \times 10^1$	$0,259556 \times 10^{-3}$	$-0,162687 \times 10^{-7}$
6	$-0,415302 \times 10^{-2}$	$0,148627 \times 10^5$	$-0,475746 \times 10^1$	$0,124699 \times 10^{-3}$	$-0,900227 \times 10^{-8}$

2.5.3 Modèle de calcul des produits de combustion à l'équilibre chimique

Produits de combustion à basse température

Aux basses températures ($T < 1000$ K) et pour des rapports α/γ inférieurs à un, la réaction chimique globale qui décrit la combustion ($\phi < 3$) est donnée ci-dessous :



Pour la combustion pauvre et stœchiométrique, on suppose qu'il y a suffisamment d'oxygène pour oxyder tous les CO et H₂, ce qui signifie que les CO et H₂ sont négligeables. On peut remarquer que la composition à l'équilibre chimique est indépendante de la température et de la pression. Cela ne dépend que de la richesse du mélange ϕ . La composition du produit est déterminée à l'aide des équations de conservation des atomes lors de la combustion.

Les produits de combustion pour les basses températures sont donnés dans le [Tableau 2.4](#).

Tableau 2.4: Produits de combustion à basses températures $T < 1000$ K.

i	espèces chimiques	$\phi \leq 1$	$\phi > 1$
1	CO ₂	$\alpha\phi\varepsilon$	$\alpha\phi\varepsilon - \nu_5$
2	H ₂ O	$\beta\phi\varepsilon/2 + \zeta$	$\phi\varepsilon(\gamma - 2\alpha) + 0,42 + \nu_5$
3	N ₂	$0,79 + \delta\phi\varepsilon/2$	$0,79 + \delta\phi\varepsilon/2$
4	O ₂	$0,21(1 - \phi)$	0
5	CO	0	ν_5
6	H ₂	0	$0,42(\phi - 1) - \nu_5$

Dans le cas des combustions riches, on suppose qu'il n'y a pas suffisamment d'oxygène pour oxyder tous les CO et H₂, ce qui signifie que l'oxygène est entièrement consommé. En écrivant les équations de conservation des atomes, cinq variables inconnues et quatre équations sont trouvées. Une autre équation, l'[Équation 2.93](#), est utilisée et elle dépend de la constante d'équilibre pour la réaction eau-gaz donnée par Ferguson et al. [158] pour l'intervalle de températures entre 400 K et 3200 K.

$$\ln K = 2,743 - \frac{1,761}{t} - \frac{1,611}{t^2} + \frac{0,2803}{t^3} \quad (2.92)$$

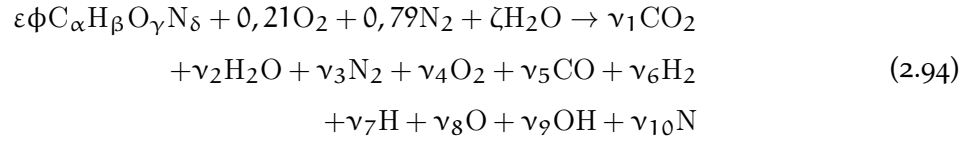
où $t = T/1000$.

La constante d'équilibre à pression constante K de la réaction eau-gaz s'exprime comme suit :



Produits de combustion à haute température

À des températures plus élevées ($T \geq 1000$ K) et pour des rapports α/γ inférieurs à un, la réaction chimique globale qui décrit la combustion ($\phi < 3$) est donnée ci-dessous :



où ν_i désigne le nombre de moles de chaque produit, α , β , γ et δ représentent respectivement les nombres d'atomes de carbone, d'hydrogène, d'oxygène et d'azote dans le combustible utilisé. ζ est le nombre de moles de vapeur injectée pour chaque $\varepsilon\phi$ moles de carburant. Dans le cas de carburant diesel conventionnel, γ et δ sont nuls.

Lorsque les fractions molaires des produits de combustion sont connues à une température, à une richesse et à une pression données, les grandeurs thermodynamiques telles que l'enthalpie, l'entropie, le volume spécifique et l'énergie interne sont calculés.

La conservation des éléments de l'Équation 2.94, la contrainte que la somme des fractions molaires de tous les produits de combustion est égale à un, le nombre total N inconnu de moles des produits de combustion et les six équations des dissociations chimiques des produits de combustion, les Équation 2.84 à Équation 2.89, entre les produits de combustion donnent un système de 11 équations à 11 inconnues à savoir les fractions molaires y_i inconnues et le nombre total N inconnu de moles des produits de combustion. Après avoir écrit les expressions des fractions molaires dépendantes des fractions molaires des autres espèces de combustion en fonction des quatre fractions molaires indépendantes, y_3 , y_4 , y_5 et y_6 , on obtient les équations non linéaires suivantes.

$$\begin{aligned} f_1 = C_6 y_4^{1/2} y_5 + C_5 y_4^{1/2} y_6 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 + C_1 y_6^{1/2} \\ + C_2 y_4^{1/2} + C_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} + C_4 y_3^{1/2} y_4^{1/2} - 1 = 0 \end{aligned} \quad (2.95)$$

$$\begin{aligned} f_2 = 2C_5 y_4^{1/2} y_6 + 2y_6 + C_1 y_6^{1/2} + C_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} \\ - d_1 (C_6 y_4^{1/2} y_5 + y_5) = 0 \end{aligned} \quad (2.96)$$

$$\begin{aligned} f_3 = 2C_6 y_4^{1/2} y_5 + C_5 y_4^{1/2} y_6 + 2y_4 + y_5 + C_2 y_4^{1/2} \\ + C_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} + C_4 y_3^{1/2} y_4^{1/2} - d_2 (C_6 y_4^{1/2} y_5 + y_5) = 0 \end{aligned} \quad (2.97)$$

$$f_4 = 2y_3 + C_4 y_3^{1/2} y_4^{1/2} - d_3 (C_6 y_4^{1/2} y_5 + y_5) = 0 \quad (2.98)$$

où

$$C_1 = \frac{k_1}{p^{1/2}} \quad (2.99)$$

$$C_2 = \frac{k_2}{p^{1/2}} \quad (2.100)$$

$$C_3 = k_3 \quad (2.101)$$

$$C_4 = k_4 \quad (2.102)$$

$$C_5 = k_5 p^{1/2} \quad (2.103)$$

$$C_6 = k_6 p^{1/2} \quad (2.104)$$

$$d_1 = \frac{\varepsilon \phi \beta + 2\zeta}{\varepsilon \phi \alpha} \quad (2.105)$$

$$d_2 = \frac{\varepsilon \phi \gamma + 0,42 + \zeta}{\varepsilon \phi \alpha} \quad (2.106)$$

$$d_3 = \frac{\varepsilon \phi \delta + 1,58}{\varepsilon \phi \alpha} \quad (2.107)$$

La richesse du mélange ϕ et le rapport molaire carburant/air ε s'expriment comme suit :

$$\phi = \frac{m_f/m_a}{(m_f/m_a)_s} \quad (2.108)$$

$$\varepsilon = \frac{0,21}{\alpha - \frac{\gamma}{2} + \frac{\beta}{4}} \quad (2.109)$$

Soient le vecteur des variables indépendantes $\mathbf{Y}=(y_3, y_4, y_5, y_6)^T$, le vecteur solution du système linéaire $\delta\mathbf{Y}=(\delta y_3, \delta y_4, \delta y_5, \delta y_6)^T$ et \mathbf{F} le vecteur contenant les équations f_3, f_4, f_5 et f_6 . Le système d'équations non linéaires peut être écrit en utilisant une expression vectorielle.

$$\mathbf{F}(\mathbf{Y}) = [f_3(\mathbf{Y}), f_4(\mathbf{Y}), f_5(\mathbf{Y}), f_6(\mathbf{Y})] = 0 \quad (2.110)$$

Si la solution exacte du système d'équations est $\mathbf{Y} = \mathbf{Y}^{(0)} + \delta\mathbf{Y}^{(0)}$ ce qui signifie :

$$\mathbf{F}(\mathbf{Y}^{(0)} + \delta\mathbf{Y}^{(0)}) = 0 \quad (2.111)$$

où $\mathbf{Y}^{(0)}$ est une approximation initiale de la solution et $\delta\mathbf{Y}^{(0)}$ est le terme de correction. Dans le voisinage de $\mathbf{Y}^{(0)}$, les fonctions $f_i(\mathbf{Y})$ sont développées en série de Taylor et tronquées après la première dérivée. Nous obtenons un système d'équations linéaires pour le vecteur $\delta\mathbf{Y}$ qui rapprochent simultanément chaque valeur $\delta\mathbf{Y}^{(0)}$ de zéro.

$$\mathbf{J}(\mathbf{Y}^{(0)})\delta\mathbf{Y}^{(0)} = -\mathbf{F}(\mathbf{Y}^{(0)}) \quad (2.112)$$

La matrice jacobienne \mathbf{J} est exprimée comme suit :

$$\mathbf{J}(\mathbf{Y}^{(0)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{Y}^{(0)})}{\partial y_3} & \frac{\partial f_1(\mathbf{Y}^{(0)})}{\partial y_4} & \cdots & \frac{\partial f_1(\mathbf{Y}^{(0)})}{\partial y_6} \\ \frac{\partial f_2(\mathbf{Y}^{(0)})}{\partial y_3} & \frac{\partial f_2(\mathbf{Y}^{(0)})}{\partial y_4} & \cdots & \frac{\partial f_2(\mathbf{Y}^{(0)})}{\partial y_6} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_4(\mathbf{Y}^{(0)})}{\partial y_3} & \frac{\partial f_4(\mathbf{Y}^{(0)})}{\partial y_4} & \cdots & \frac{\partial f_4(\mathbf{Y}^{(0)})}{\partial y_6} \end{pmatrix} \quad (2.113)$$

Le système d'équations linéaires, l'Équation 2.112, est résolu pour $\delta\mathbf{Y}^{(0)}$ en utilisant la méthode itérative de Gauss-Seidel. La nouvelle solution approchée est calculée comme :

$$\mathbf{Y}^{(1)} = \mathbf{Y}^{(0)} + \delta\mathbf{Y}^{(0)}.$$

Si $\mathbf{Y}^{(1)}$ ne rapproche pas la solution avec la tolérance voulue, un nouveau terme de correction est calculé comme suit :

$$\mathbf{J}(\mathbf{Y}^{(k)})\delta\mathbf{Y}^{(k)} = -\mathbf{F}(\mathbf{Y}^{(k)}) \quad (2.114)$$

La procédure est répétée jusqu'à ce que $\delta\mathbf{Y}^{(k)}$ atteigne une tolérance spécifiée qui mène aux valeurs de \mathbf{Y} .

$$\mathbf{Y} = \mathbf{Y}^{(k)} + \delta\mathbf{Y}^{(k)} \quad (2.115)$$

Les autres fractions molaires dépendantes sont exprimées après avoir déterminé les fractions molaires y_3 , y_4 , y_5 et y_6 comme suit :

$$y_1 = C_6 y_4^{1/2} y_5 \quad (2.116)$$

$$y_2 = C_5 y_4^{1/2} y_6 \quad (2.117)$$

$$y_7 = C_1 y_6^{1/2} \quad (2.118)$$

$$y_8 = C_2 y_4^{1/2} \quad (2.119)$$

$$y_9 = C_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} \quad (2.120)$$

$$y_{10} = C_4 y_3^{1/2} y_4^{1/2} \quad (2.121)$$

2.5.4 Propriétés thermodynamiques

À pression constante, la variation de température a un effet sur la chaleur spécifique due aux dissociations des espèces chimiques à haute température. L'effet de la température sur les fractions molaires doit être pris en compte lors du calcul de la chaleur spécifique.

$$\mathbf{J}(\mathbf{Y}^{(k)})\mathbf{Y}_T^{(k)} = -\mathbf{F}_T(\mathbf{Y}^{(k)}) \quad (2.122)$$

où

$$\mathbf{F}_T = \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial T} \right)_p \quad \text{et} \quad \mathbf{Y}_T = \left(\frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial T} \right)_p \quad (2.123)$$

La même procédure est utilisée pour résoudre l'Équation 2.122. Les résultats sont utilisés pour calculer la chaleur spécifique du mélange gazeux dans l'Équation 2.129.

Gordon et McBride [160] ont proposé les expressions de la chaleur molaire spécifique à pression constante $\bar{c}_{p,i}$, l'enthalpie molaire spécifique \bar{h}_i et l'entropie molaire spécifique \bar{s}_i^0 de chaque espèce. Elles sont déduites des modèles polynomiaux en température disponibles dans des tables thermochimiques JANAF.

À pression constante, l'enthalpie du mélange gazeux \bar{h} change en raison des dissociations chimiques car les fractions molaires des espèces changent avec la température.

$$\bar{h} = \sum_{i=1}^{10} y_i \bar{h}_i \quad (2.124)$$

$$\bar{s} = \sum_{i=1}^{10} R_u y_i \left(\frac{\bar{s}_i^0}{R_u} - \ln \left(\frac{y_i P}{P_0} \right) \right) \quad (2.125)$$

$$M = \sum_{i=1}^{10} y_i M_i \quad (2.126)$$

$$h = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{10} y_i \bar{h}_i \quad (2.127)$$

$$s = \frac{R_u}{M} \sum_{i=1}^{10} y_i \left(\frac{\bar{s}_i^0}{R_u} - \ln \left(\frac{y_i P}{P_0} \right) \right) \quad (2.128)$$

$$c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{10} \left(y_i \bar{c}_{p,i} + \bar{h}_i \left(\frac{\partial y_i}{\partial T} \right)_p - \frac{M_T}{M} y_i \bar{h}_i \right) \quad (2.129)$$

où

$$M_T = \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_p = \sum_{i=1}^{10} M_i \left(\frac{\partial y_i}{\partial T} \right)_p \quad (2.130)$$

2.5.5 Température adiabatique de flamme à pression constante

La température adiabatique de flamme à pression constante (T_{ad}) est calculée de manière itérative à l'aide de l'Équation 2.131. Une valeur initiale de température est requise pour déterminer l'enthalpie totale des réactifs h_u .

$$T_{ad}^{i+1} = T_{ad}^i + \frac{h_u - h}{c_p} \quad (2.131)$$

où h est l'enthalpie des produits de combustion obtenue par l'Équation 2.127 et c_p est la chaleur spécifique des produits de combustion obtenue par l'Équation 2.129.

Pour chaque itération, i , h et c_p sont réévalués jusqu'à ce qu'une valeur acceptable de tolérance donnée est atteinte. L'organigramme de calcul de la température adiabatique de flamme à pression constante est illustré sur la Figure 2.6.

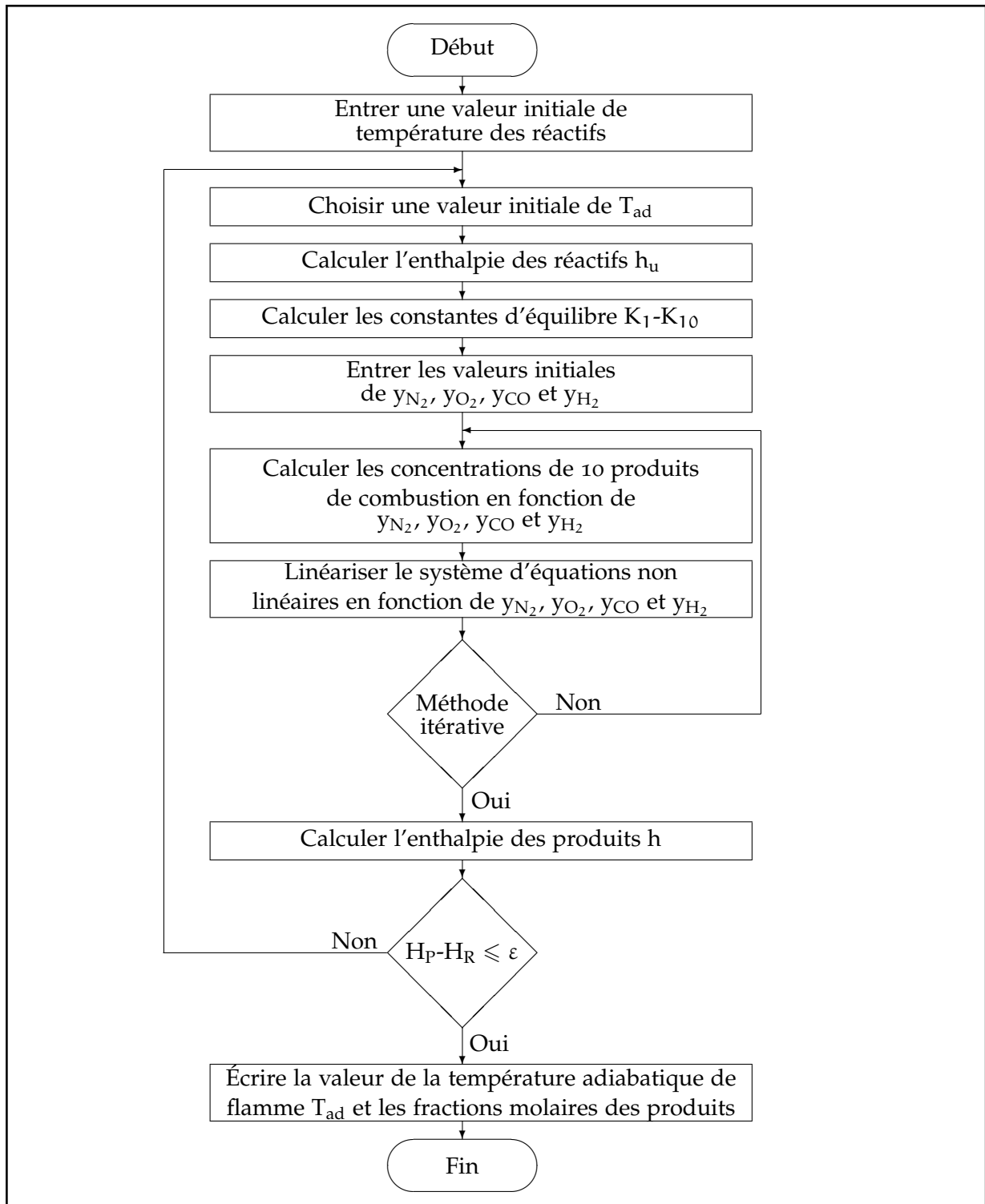


Figure 2.6: Organigramme de calcul de température adiabatique de flamme T_{ad} .

2.6 Modèles de combustion des moteurs à allumage par compression

2.6.1 Sous-modèles de combustion

Un modèle complet, représentatif et précis de la combustion doit prendre en compte l'évolution du jet, le mélange air-carburant, l'atomisation et la vaporisation du combustible et la cinétique chimique.

Un modèle de combustion qui est adéquat avec le simulateur du moteur à allumage par compression complet s'affranchit de l'aspect physique de la réaction chimique. Un modèle de combustion qui est capable de prédire le délai d'auto-inflammation, la durée de la réaction et qui respecte la phénoménologie typique de la combustion dans un moteur à allumage par compression est recherchée. La combustion dans les moteurs à allumage par compression comporte un régime de combustion en prémélange caractérisé par un avancement rapide de la réaction suivi d'un régime de diffusion pendant laquelle la transformation des produits de combustion est plus lente. La méthode se base sur des approximations de la vitesse de combustion. La loi de combustion utilisée dans cette modélisation phénoménologique des cycles moteurs est la fonction sigmoïdale de Wiebe.

Le sous-modèle de combustion qui correspond au calcul de la vitesse de combustion du carburant est une double fonction de Wiebe.

Fonction sigmoïdale de Wiebe

La fonction sigmoïdale de Wiebe décrit l'allure caractéristique de la fraction massique de carburant brûlé dans un moteur à allumage commandé au sein duquel la combustion s'accomplit uniquement dans un mélange homogène. La première phase de la combustion dans les moteurs à allumage par compression présente un caractère identique mais elle est suivie d'une seconde période durant laquelle la combustion se déroule en phase diffusionnelle. Deux fonctions de Wiebe pondérées et décalées dans le temps sont utilisées. Chaque fonction de Wiebe représente la fraction massique de combustible brûlé au cours d'une des phases de la combustion. La première fonction sigmoïdale de Wiebe décrit la combustion de prémélange alors que la seconde fonction sigmoïdale de Wiebe décrit la combustion de diffusion. Ce modèle assure une meilleure cohérence avec les profils de fraction massique du carburant brûlé observés expérimentalement puisque les paramètres des fonctions de Wiebe sont adaptés aux profils de vitesse de combustion obtenus expérimentalement.

Vitesse de la combustion

La masse de carburant brûlé s'écrit :

$$m_{\text{carbb}} = \beta x_p + (1 - \beta) x_d \quad (2.132)$$

β est la fraction massique du carburant brûlé en phase de prémélange et x_i est la fonction élémentaire de Wiebe correspondant à la phase i qui est donnée sous la forme suivante :

$$x_i = 1 - \exp \left(- a_i \left(\frac{\theta - \theta_{\text{comb}}}{\Delta \theta_{\text{comb},i}} \right)^{m_i+1} \right) \quad (2.133)$$

où a_i et m_i désignent les paramètres de réglage de la fonction de Wiebe et $\Delta\theta_{\text{comb},i}$ est la durée de la phase de combustion i . L'auto-inflammation se produit à l'angle vilebrequin θ_{comb} .

La vitesse de combustion normalisée du carburant est donnée par l'Équation 2.134.

$$\frac{dm_{\text{carbb}}}{d\theta} = \beta \frac{dx_p}{d\theta} + (1 - \beta) \frac{dx_d}{d\theta} \quad (2.134)$$

avec

$$\frac{dx_i}{d\theta} = a_i(m_i + 1) \frac{1}{\Delta\theta_{\text{comb},i}} \left(\frac{\theta - \theta_{\text{comb}}}{\Delta\theta_{\text{comb},i}} \right)^{m_i} \exp \left(-a_i \left(\frac{\theta - \theta_{\text{comb}}}{\Delta\theta_{\text{comb},i}} \right)^{m_i+1} \right) \quad (2.135)$$

La vitesse de combustion du carburant est donc donnée par l'Équation 2.136.

$$\frac{dm_{\text{carbb}}}{dt} = \omega \frac{dm_{\text{carbb}}}{d\theta} \quad (2.136)$$

La fraction massique du carburant brûlé pendant la phase de prémélange β est corrélée avec la richesse du mélange ϕ et le délai d'auto-inflammation τ_{ai} .

$$\beta = 1 - \alpha_{\beta_1} \frac{\phi^{\alpha_{\beta_2}}}{\tau_{\text{ai}}^{\alpha_{\beta_3}}} \quad (2.137)$$

Plus le délai d'auto-inflammation est long, plus la fraction de combustible brûlé en prémélange est importante car les réactifs ont eu suffisamment de temps pour se mélanger. À l'inverse si la richesse du mélange augmente, la combustion de diffusion sera prépondérante. Une approximation du délai d'auto-inflammation est déduite d'une corrélation qui se présente sous la forme de Arrhenius.

Le dégagement de la chaleur lors des phases de prémélange et de diffusion s'écrit comme suit :

$$\frac{dQ_{\text{comb}}}{d\theta} = \frac{dQ_p}{d\theta} + \frac{dQ_d}{d\theta} \quad (2.138)$$

où le dégagement de la chaleur lié à la combustion de prémélange s'écrit :

$$\frac{dQ_p}{d\theta} = \beta Q_{\text{comb}} \frac{a_p(m_p + 1)}{\Delta\theta_{\text{comb},p}} \left(\frac{\theta - \theta_{\text{comb}}}{\Delta\theta_{\text{comb},p}} \right)^{m_p} \exp \left(-a_p \left(\frac{\theta - \theta_{\text{comb}}}{\Delta\theta_{\text{comb},p}} \right)^{m_p+1} \right) \quad (2.139)$$

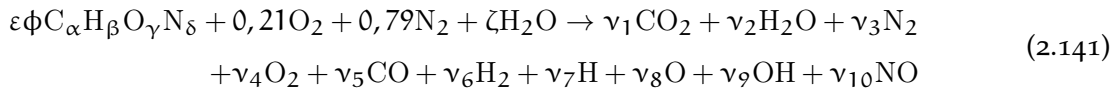
et le dégagement de la chaleur lié à la combustion de diffusion s'écrit :

$$\frac{dQ_d}{d\theta} = (1 - \beta) Q_{\text{comb}} \frac{a_d(m_d + 1)}{\Delta\theta_{\text{comb},d}} \left(\frac{\theta - \theta_{\text{comb}}}{\Delta\theta_{\text{comb},d}} \right)^{m_d} \exp \left(-a_d \left(\frac{\theta - \theta_{\text{comb}}}{\Delta\theta_{\text{comb},d}} \right)^{m_d+1} \right) \quad (2.140)$$

avec les indices p et d désignant les phases de combustion de prémélange et de diffusion. $\Delta\theta_{\text{comb},p}$ et $\Delta\theta_{\text{comb},d}$ désignent les durées des deux phases de combustion. Q_p et Q_d les dégagements totaux de chaleur des deux phases de combustion. m_p et m_d sont les facteurs de forme propre à chaque phase de combustion.

Réaction de combustion

Les gaz brûlés sont composés uniquement des produits issus de la combustion complète du carburant dans l'air. Cette équation de la combustion complète est donnée par l'Équation 2.141.



où ν_i désigne le nombre de moles pour chaque produit de combustion, α , β , γ et δ représentent respectivement les nombres d'atomes de carbone, d'hydrogène, d'oxygène et d'azote dans le combustible utilisé. ζ est le nombre de moles de vapeur injectée pour chaque $\varepsilon\phi$ moles de carburant.

Le rapport stœchiométrique ϕ_{st} est le quotient des masses d'air m_a et de carburant m_{carb} mises en jeu dans les conditions stœchiométriques :

$$\phi_{st} = \frac{4,76 \times 28,9 \times (\alpha + \frac{\beta}{4} - \frac{\gamma}{2})}{12\alpha + \beta + 16\gamma} \quad (2.142)$$

Le rapport stœchiométrique ϕ_{st} est déterminé par l'écriture de la réaction de combustion pour chaque carburant.

2.6.2 Propriétés thermodynamiques des produits de combustion et des carburants

Les gaz dans la chambre de combustion sont assimilés à des gaz idéaux. Les grandeurs thermodynamiques sont exprimées en fonction de la température.

Capacité thermique massique

La chaleur spécifique à pression constante $c_{p,i}$ de chaque produit de combustion est exprimée sous la forme d'une régression polynomiale en T [101] :

$$c_{p,i} = \frac{R}{M_i} \left(a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 \right) \quad (2.143)$$

Pour les cas des carburants diesel et biodiesel, les expressions de leurs propriétés thermodynamiques à savoir les chaleurs spécifiques, les enthalpies spécifiques et les entropies prennent les formes suivantes :

$$\frac{c_{p,carb,i}}{R} = a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 \quad (2.144)$$

$$\frac{h_{carb,i}}{RT} = a_{1,i} + \frac{a_{2,i}}{2}T + \frac{a_{3,i}}{3}T^2 + \frac{a_{4,i}}{4}T^3 + \frac{a_{5,i}}{5}T^4 + a_{6,i}\frac{1}{T} \quad (2.145)$$

$$\frac{s_{carb,i}}{R} = a_{1,i} \ln T + a_{2,i}T + \frac{a_{3,i}}{2}T^2 + \frac{a_{4,i}}{3}T^3 + \frac{a_{5,i}}{4}T^4 + a_{7,i} \quad (2.146)$$

R est la constante universelle des gaz parfaits et les coefficients $a_{j,i}$ utilisés couvrent l'intervalle de températures allant de 300 à 5000 K.

La chaleur massique à volume constant des gaz parfaits $c_{v,i}$ s'écrit en utilisant la constante massique des gaz parfaits r_i et la chaleur massique à pression constante des gaz parfaits $c_{p,i}$ de chaque espèce chimique i . Cette expression est donnée par l'Équation 2.147.

$$c_{v,i} = c_{p,i} - r_i = c_{p,i} - \frac{R}{M_i} \quad (2.147)$$

Enthalpie spécifique

L'enthalpie spécifique de chaque produit de combustion i est définie par l'Équation 2.148.

$$dh_i = c_{p,i} dT \quad (2.148)$$

Soit en intégrant l'Équation 2.148, on obtient :

$$h_i = h_{\text{ref},i} + \int_{T_{\text{ref}}}^T c_{p,i} dT \quad (2.149)$$

où $h_{\text{ref},i}$ est l'enthalpie spécifique de formation à la température de référence T_{ref} de l'espèce i .

2.6.3 Équations régissant les évolutions des grandeurs physiques

Les trois équations suivantes lient l'énergie interne massique, le volume spécifique et l'entropie à la température et à la pression en fonction de l'angle balayé par le vilebrequin.

$$\frac{du}{d\theta} = \left(c_p - \frac{pv}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p \right) \frac{dT}{d\theta} - v \left(\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p + \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln p} \right)_T \right) \frac{dp}{d\theta} \quad (2.150)$$

$$\frac{dv}{d\theta} = \frac{v}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p \frac{dT}{d\theta} - \frac{v}{p} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln p} \right)_T \frac{dp}{d\theta} \quad (2.151)$$

$$\frac{ds}{d\theta} = \frac{c_p}{T} \frac{dT}{d\theta} - \frac{v}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p \frac{dp}{d\theta} \quad (2.152)$$

Les variations de pression et de température des gaz brûlés et imbrûlés dans la chambre de combustion sont déterminées en résolvant les équations différentielles suivantes :

$$\frac{dp}{d\theta} = \frac{A + B + C}{D + E} \quad (2.153)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_b}{d\theta} = & \frac{-h_c \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) \sqrt{x} (T_b - T_P)}{m\omega c_{pb} x} \\ & + \frac{v_b}{c_{pb}} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right)_p \left(\frac{A + B + C}{D + E} \right) \\ & + \frac{h_u - h_b}{x c_{pb}} \left[\frac{dx}{d\theta} - (x - x^2) \frac{C_b}{\omega} \right] \end{aligned} \quad (2.154)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_u}{d\theta} = & \frac{-h_c \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) (T_u - T_P)}{m\omega c_{pu} (1 + \sqrt{x})} \\ & + \frac{v_u}{c_{pu}} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)_p \left(\frac{A + B + C}{D + E} \right) \\ & + \frac{h_u - h_b}{x c_{pu}} \left[\frac{dx}{d\theta} - (x - x^2) \frac{C_b}{\omega} \right] \end{aligned} \quad (2.155)$$

$$\frac{dW}{d\theta} = p \frac{dV}{d\theta} \quad (2.156)$$

$$\frac{dH_l}{d\theta} = \frac{m C_b}{\omega} \left((1 - x^2) h_u + x^2 h_b \right) \quad (2.157)$$

$$\frac{dQ_l}{d\theta} = \frac{h_c \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right)}{\omega} \left[\sqrt{x} (T_b - T_P) + (1 - \sqrt{x}) (T_u - T_P) \right] \quad (2.158)$$

avec

$$A = \frac{1}{m} \left(\frac{dV}{d\theta} + \frac{V C_b}{\omega} \right) \quad (2.159)$$

$$\begin{aligned} B = & \frac{h_c}{m\omega} \left[\frac{v_b}{c_{pb}} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right)_p \frac{\left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) \sqrt{x} (T_b - T_P)}{T_b} \right. \\ & \left. + \frac{v_u}{c_{pu}} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)_p \frac{\left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) (1 - \sqrt{x}) (T_u - T_P)}{T_u} \right] \end{aligned} \quad (2.160)$$

$$C = - \left(v_b - v_u \right) \frac{dx}{d\theta} - \frac{v_b}{T_b} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right)_p \left(\frac{h_u - h_b}{c_{pb}} \right) \left[\frac{dx}{d\theta} - (x - x^2) \frac{C_b}{\omega} \right] \quad (2.161)$$

$$D = x \left[\frac{v_b^2}{c_{pb} T_b} \left(\left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right)_p \right)^2 + \frac{v_b}{p} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln p} \right)_T \right] \quad (2.162)$$

$$E = (1 - x) \left[\frac{v_u^2}{c_{pu} T_u} \left(\left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)_p \right)^2 + \frac{v_u}{p} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln p} \right)_T \right] \quad (2.163)$$

où h_b et h_u désignent les coefficients de transferts thermiques pour les zones constituées des produits brûlés et imbrûlés respectivement, x est la fraction de carburant brûlé, m est la masse du mélange carburé, v_b et v_u sont les volumes spécifiques, ω est la vitesse angulaire du moteur et C_b est le coefficient qui prend en compte les fuites.

Les équations différentielles couplées, les [Équation 2.153](#) à [Équation 2.158](#), sont résolues par la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4.

2.6.4 Performances du moteur à allumage par compression

Les grandeurs les plus importantes dans l'évaluation des performances d'un moteur à combustion interne sont les suivantes :

- ❶ le travail effectué par cycle ;
- ❷ la pression moyenne ;
- ❸ la puissance ;
- ❹ la consommation spécifique ;
- ❺ le rendement.

Travail effectué par cycle

Le travail indiqué est le travail des forces de pression transmises au piston par les gaz pendant les quatre temps du cycle moteur. Sur le diagramme de Clapeyron, le travail indiqué W_i est représenté par la surface fermée du diagramme. Sa valeur est calculée en utilisant l'Équation 2.164 :

$$W_i = -\frac{V_m}{2}(r_c - 1) \int_0^{720} p \sin \theta \left[1 + \frac{\cos \theta}{\sqrt{\beta^2 - \sin^2 \theta}} \right] d\theta \quad (2.164)$$

Le travail reçu par le gaz est positif alors que le travail fourni à l'extérieur est négatif. Pour un moteur à quatre temps, deux boucles dans le diagramme de Clapeyron sont distinguées comme montre la Figure 2.7. La surface de la boucle positive, S^+ , correspond au travail des gaz pendant les phases de compression et de détente ; c'est le travail indiqué brut W_I tandis que la surface de la boucle négative, S^- , correspond au travail de pompage W_p qui est le travail absorbé par le remplissage et la vidange de la chambre de combustion.

La relation entre le travail indiqué brut W_I et le travail indiqué W_i est donnée par l'Équation 2.165.

$$W_I = W_i - |W_p| \quad (2.165)$$

Le travail effectif W_e est le travail disponible sur l'arbre moteur. Il est égal au travail indiqué diminué de la quantité de travail perdu par frottement W_{fr} .

$$W_e = W_i - |W_{fr}| \quad (2.166)$$

où

$$W_{fr} = W_{frc} - |W_{acc}| \quad (2.167)$$

Le travail de frottement est la somme de deux travaux. Le travail perdu par frottement W_{frc} qui est dû aux frictions mécaniques entre les parties mobiles et les parties fixes du moteur et le travail d'entraînement des accessoires W_{acc} qui correspond au travail d'entraînement des accessoires c'est-à-dire le travail nécessaire à l'actionnement des organes périphériques du véhicule.

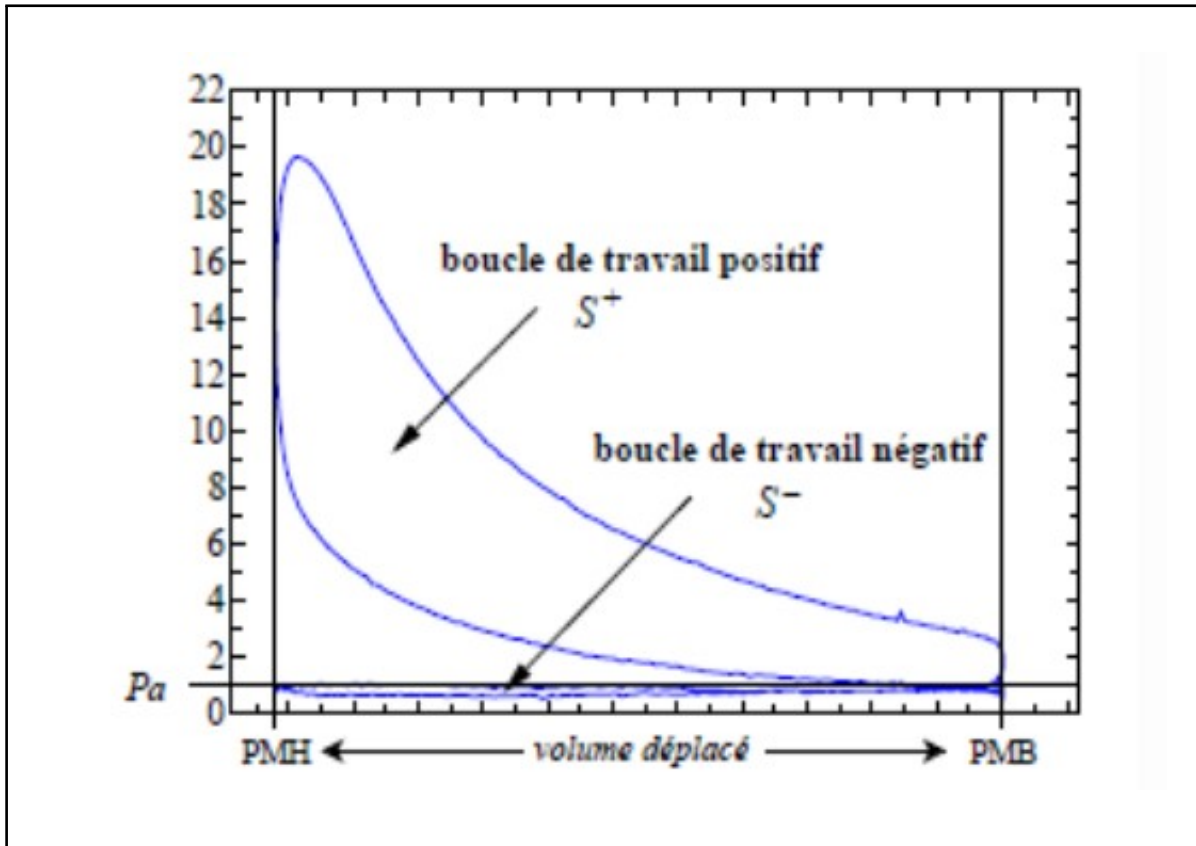


Figure 2.7: Diagramme de Clapeyron d'un moteur à allumage par compression.

Pression moyenne

Elle correspond théoriquement à la pression constante qu'il faudrait appliquer à la surface du piston tout au long d'une course motrice pour obtenir le même travail que celui fourni par le moteur. Les expressions de la pression moyenne indiquée PMI et de la pression moyenne effective PME sont données par les Équation 2.168 et Équation 2.169.

$$PMI = \frac{W_i}{V_d} \quad (2.168)$$

$$PME = PMI - PMF \quad (2.169)$$

Zweiri et al. [161] ont proposé un modèle détaillé qui distingue la contribution des frottements entre les segments et la chemise du cylindre, au niveau des roulements de la bielle ou encore les forces impliquées pour mouvoir les composants du système d'alimentation. Il intègre également les variations de viscosité cinématique de l'huile de lubrification avec la température et traite indépendamment chaque élément contribuant aux pertes mais ce modèle inclut un grand nombre de paramètres physiques et de variables d'entrée auxquels nous n'avons pas accès. La loi corrélative classique proposée par Millington et Hartles [162] fait intervenir le régime moteur comme variable principale à laquelle la vitesse moyenne du piston est associée. Elle est plus pratique et plus simple.

$$PMF = \frac{\tau - 4}{14,5} + 4,83 \times 10^{-4} N + 0,103 \left(\frac{V_P}{5,05} \right)^2 \quad (2.170)$$

Puissance d'un moteur

La puissance d'un moteur est l'énergie que le moteur fournit par unité de temps. La puissance effective correspond à la puissance recueillie sur l'arbre moteur.

Les relations entre la puissance et le travail par cycle sont données par les [Équation 2.171](#) à [Équation 2.173](#) :

$$P = \frac{W \cdot N}{2} \quad (2.171)$$

$$P_{\text{ef}} = \frac{W_{\text{ef}} \cdot N}{2} \quad (2.172)$$

$$P_i = \frac{W_i \cdot N}{2} \quad (2.173)$$

La puissance perdue par frottement P_f est donnée par l'[Équation 2.174](#) :

$$P_f = P_i - |P_{\text{ef}}| \quad (2.174)$$

Consommation spécifique de carburant

La consommation spécifique de carburant (CSF) d'un moteur est le rapport du débit massique horaire \dot{m}_{carb} du combustible consommé à la puissance effective P_{ef} développée par le moteur. Elle renseigne sur la capacité d'un moteur à convertir l'énergie du carburant en travail et elle permet de comparer deux moteurs qui peuvent être des cylindrées différentes. Son expression est donnée par l'[Équation 2.175](#) :

$$\text{CSF} = \frac{\dot{m}_{\text{carb}}}{P_{\text{ef}}} \quad (2.175)$$

Rendements du moteur

* Rendement thermique

Le rendement thermique effectif η_{ef} d'un moteur est le rapport de la puissance effective P_{ef} recueillie sur l'arbre moteur à la puissance thermique P_{carb} apportée par le combustible :

$$\eta_{\text{ef}} = \frac{P_{\text{ef}}}{\dot{m}_{\text{carb}} \cdot \text{PCI}} \quad (2.176)$$

Le rendement du moteur s'exprime, en fonction de la consommation spécifique du combustible et du pouvoir calorifique inférieur PCI, comme suit :

$$\eta_{\text{ef}} = 3600 \frac{10^3}{\text{CSF} \cdot \text{PCI}} \quad (2.177)$$

Il est également exprimé en fonction de la consommation spécifique de l'énergie (CSE) par la relation :

$$\eta_{\text{ef}} = 3600 \frac{10^3}{\text{CSE}} \quad (2.178)$$

avec

$$\text{CSE} = \text{CSF} \cdot \text{PCI} \quad (2.179)$$

* Rendement volumétrique

Le rendement volumétrique est le pourcentage de la quantité d'air introduite dans la chambre de combustion par rapport à la quantité théorique susceptible d'être introduite dans les conditions normales de température et de pression.

$$\eta_v = \frac{2\dot{m}_{\text{air}}}{\rho_{\text{air}}V_dN} \quad (2.180)$$

2.7 Validations des modèles avec les résultats des expériences

Les simulations numériques ont été réalisées en utilisant les caractéristiques d'un moteur stationnaire monocylindre à allumage par compression et à quatre temps, à injection directe et à aspiration naturelle à un régime de fonctionnement de 1500 trs/mn. Dans le but de valider le modèle, ce dernier a été implémenté et les résultats obtenus sont comparés aux données expérimentales de Ayissi [163] et dont les caractéristiques du moteur utilisé sont données dans le [Tableau 2.5](#). Les émissions des monoxydes d'azote (NO) et des oxydes d'azote (NO_x) sont mesurées par chimiluminescence via un analyseur des oxydes d'azote TOPAZE 32M sur une gamme de 0 à 10 000 ppm avec une incertitude absolue de 100 ppm. La détermination de la position angulaire du vilebrequin est réalisée par un codeur angulaire, de type AVL 364C, placé sur l'arbre vilebrequin. Ce type de codeur permet d'atteindre une résolution de 0,1 °V. La pression dans la chambre de combustion est mesurée par un capteur de pression piézoélectrique, refroidi par circulation d'eau, de type AVL QH32D, inséré dans le volume de combustion en tête du cylindre. La gamme de ce capteur est de 0 à 200 bars, avec une incertitude absolue de 2 bars.

Tableau 2.5: Spécifications du moteur à allumage par compression.

Puissance nominale à 1500 rpm	4,5 kW
Moteur monocylindre	4 temps, à injection directe
Type de refroidissement	refroidi à air
Système d'admission	aspiration naturelle
Cylindrée (cm ³)	630
Taux de compression	18:1

Les deux tests ont été effectués pour la simulation de la combustion du carburant diesel conventionnel et pour la simulation de la combustion du carburant biodiesel fait à base d'huile de neem. Les carburants utilisés dans le cas de notre étude sont le carburant diesel conventionnel et le carburant biodiesel qui est l'ester éthylique d'huile végétale. Le [Tableau 2.6](#) présente les propriétés des carburants utilisés dans cette étude.

Tableau 2.6: Propriétés chimiques et physiques de carburants testés.

Propriétés de carburant	Carburant diesel	Carburant biodiesel
Masse volumique à 15 °C (kg.m ⁻³)	840	883,3
Viscosité cinématique à 40 °C (mm ² .s ⁻¹)	2,44	3,5
PCI (kJ.kg ⁻¹)	42 821	37 515
Point éclair (°C)	71	138
Oxygène (masse.%)	0,00	9,30
Rapport stœchiométrique air/carburant	14,67	12,90
Indice de cétane	39	56

2.8 Produits de combustion à l'équilibre chimique

La validation du sous-modèle se fait en comparant les résultats du modèle à ceux obtenus avec le CEA de la NASA et à ceux obtenus avec le logiciel GASEQ, qui utilisent respectivement la méthode du potentiel d'élément et l'approche de la minimisation de l'énergie libre de Gibbs. Les simulations de méthane avec injection de vapeur sont réalisées. Les fractions molaires des produits de combustion à l'équilibre chimique et les propriétés thermodynamiques obtenues avec le modèle sont comparées à celles du CEA de la NASA et à celles du logiciel GASEQ à $\phi = 0,6$ et à $\phi = 1,2$ avec injection de vapeur à 10 %. Les résultats sont mentionnés dans les [Tableau 2.7](#) et [Tableau 2.8](#). Dans ces tableaux, les résultats issus du modèle de dissociations chimiques des produits de combustion ont des précisions scientifiquement acceptables par rapport à ceux issus de ces deux logiciels. On peut même dire que ce sous-modèle des simulation des dissociations chimiques des produits de combustion est une amélioration des valeurs des fractions molaires donnés par ces deux logiciels lorsque la température est très élevée.

Comme une amélioration du GASEQ, l'effet de la dissociation chimique des produits de combustion avec la température sur la chaleur spécifique des produits de combustion est considéré. Cela corrige des énormes erreurs dans les résultats de chaleurs spécifiques car les réactions de dissociation chimique sont hautement endothermiques. Les résultats de chaleurs spécifiques du modèle d'équilibre chimique correspondent bien à ceux du CEA.

Tableau 2.7: Comparaison des fractions molaires des produits de combustion à l'équilibre du méthane à $\phi = 0,6$ et 10 % de vapeur obtenus avec le modèle à ceux obtenus avec le logiciel CEA de la NASA et le logiciel GASEQ.

$\phi = 0,6$	Résultats du modèle	résultats du GASEQ	résultats du CEA	précision avec GASEQ (%)	précision avec CEA (%)
CO ₂	0,051506	0,05154	0,05151	0,066	0,066
H ₂ O	0,233920	0,23399	0,23385	0,029	0,029
N ₂	0,645559	0,64553	0,64553	-0,005	-0,005
O ₂	0,068353	0,06827	0,06827	-0,122	-0,122
CO	$1,328 \times 10^{-7}$	$1,33 \times 10^{-7}$	$3,27 \times 10^{-7}$	-0,157	-0,157
H ₂	$2,419 \times 10^{-7}$	$2,41 \times 10^{-7}$	$2,41 \times 10^{-7}$	-0,360	-0,360
H	$1,269 \times 10^{-9}$	$1,27 \times 10^{-9}$	$1,27 \times 10^{-9}$	0,03	0,03
O	$1,506 \times 10^{-7}$	$1,50 \times 10^{-7}$	$1,50 \times 10^{-7}$	-0,429	-0,429
OH	$3,263 \times 10^{-5}$	$3,39 \times 10^{-5}$	$3,39 \times 10^{-5}$	3,751	3,751
NO	$6,278 \times 10^{-4}$	$6,27 \times 10^{-4}$	$6,27 \times 10^{-4}$	-0,126	-0,126
C _p (kJ.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	1,46488	1,45383	1,45383	-0,76	-0,76
T _{in} (K)	300	300	300	0,000	0,000
T _{ad} (K)	1482,3	1482,3	1482,3	0,000	0,000

Tableau 2.8: Comparaison des fractions molaires des produits de combustion à l'équilibre du méthane à $\phi = 1,2$ et 10 % de vapeur obtenus avec le modèle à ceux obtenus avec le logiciel CEA de la NASA et le logiciel GASEQ.

$\phi = 1,2$	Résultats du modèle	résultats du GASEQ	résultats du CEA	précision avec GASEQ (%)	précision avec CEA (%)
CO ₂	0,063729	0,06368	0,06368	-0,077	-0,077
H ₂ O	0,278173	0,27822	0,27822	0,017	0,017
N ₂	0,594799	0,59480	0,59480	0,00017	0,00017
O ₂	$5,826 \times 10^{-8}$	$5,78 \times 10^{-8}$	$5,78 \times 10^{-8}$	-0,790	-0,790
CO	0,031138	0,03119	0,03119	0,168	0,168
H ₂	0,032106	0,03206	0,03206	-0,144	-0,144
H	$2,988 \times 10^{-5}$	$2,98 \times 10^{-5}$	$2,98 \times 10^{-5}$	-0,260	-0,260
O	$1,535 \times 10^{-8}$	$1,53 \times 10^{-8}$	$1,53 \times 10^{-8}$	-0,345	-0,345
OH	$2,199 \times 10^{-5}$	$2,95 \times 10^{-6}$	$2,68 \times 10^{-6}$	2,679	2,57
NO	$2,962 \times 10^{-6}$	$2,95 \times 10^{-6}$	0,646096	-0,394	-0,394
C _p (kJ.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	1,64592	1,63042	1,63042	-0,95	-0,95
T _{in} (K)	300	300	300	0,000	0,000
T _{ad} (K)	1919,3	1919,3	1919,3	0,000	0,000

Nous avons donc intégré ce modèle des dissociations chimiques des produits de combustion à l'équilibre dans notre modèle de combustion afin de trouver des valeurs plus précises des fractions molaires et des propriétés thermodynamiques des produits de combustion à chaque instant.

2.9 Conclusion

L'objectif est d'élaborer deux modèles thermodynamiques des moteurs à allumage par compression afin de ressortir les avantages et les inconvénients pour chacun de ces deux modèles. Ces modèles thermodynamiques sont basés sur le premier principe de la thermodynamique et des relations semi-empiriques décrivant la vitesse de combustion de chaque carburant injecté.

Le premier modèle thermodynamique élaboré est le modèle à une zone de Krieger et Borman qui est basé sur le premier principe de la thermodynamique, de la conservation de masse et la loi des gaz parfaits. Ce modèle calcule les variations de l'énergie interne massique à chaque instant du cycle en utilisant des coefficients correctifs qui correspondent à la variation de température par rapport à une température de référence. Le rapport de chaleur spécifique est déterminé en fonction de la température à l'aide de polynômes lissés à partir des données expérimentales tabulées. Dans le cadre de ce travail, la composition, la température et la pression des produits de combustion sont identiques en tout point de la chambre de combustion. Le modèle de combustion de Krieger et Borman est implémenté en utilisant les propriétés thermophysiques du carburant diesel conventionnel et les propriétés thermophysiques du butyrate de méthyle comme molécule modèle du carburant biodiesel. La difficulté de ce modèle est le nombre de constantes polynomiales à déterminer pour calibrer le modèle pour chaque type de moteur et pour chaque type de carburant à utiliser.

Le second modèle est le modèle de combustion à deux zones de Ferguson et Olikara. Ce modèle divise la chambre de combustion en deux zones constituées d'une zone des gaz brûlés et d'une autre zone des gaz imbrûlés. Les propriétés thermodynamiques des gaz de combustion se calculent en utilisant les hypothèses d'équilibre chimique lors des réactions chimiques qui ont lieu au cours de la combustion. Le calcul des propriétés thermodynamiques est basé sur le lissage en fonction de la température des valeurs expérimentales contenues dans les tables thermodynamiques.

Ces modèles se subdivisent en sous-modèles thermodynamiques couplés les uns aux autres. Chaque sous-modèle modélise un des phénomènes physiques ayant cours dans la chambre de combustion. Les principaux sous-modèles sont l'injection et la pulvérisation, l'évaporation, le délai d'auto-inflammation, le sous-modèle d'émissions de NO thermique de Zeldovich et la méthode d'injection de vapeur est aussi appliquée au modèle.

Pour le cas de modèle de combustion à deux zones de Ferguson et Olikara, les propriétés thermochimiques du carburant diesel conventionnel sont utilisées alors que pour les paramètres thermochimiques du carburant biodiesel, les propriétés thermochimiques du butyrate de méthyle sont utilisées.

CHAPITRE III

3.1 Introduction

Le présent chapitre est fait en quatre parties et terminé par une conclusion. La première partie porte sur les validations des modèles avec les résultats des expériences, la deuxième partie présente le travail et les transferts de chaleur, la troisième partie est consacrée à l'optimisation des moteurs à allumage par compression et enfin, la quatrième partie présente les caractéristiques de performance.

3.2 Validations des modèles avec les résultats des expériences

3.2.1 Pression dans la chambre de combustion

La [Figure 3.1](#) montre l'évolution des pressions simulées et expérimentales dans la chambre de combustion en fonction de l'angle de vilebrequin de carburant diesel conventionnel et de carburant biodiesel à pleine charge. Comme on peut le constater, les évolutions des pressions simulées dans la chambre de combustion représentent bien les pressions expérimentales. Les courbes de pression obtenues à partir du modèle de Ferguson et Olikara montre que ce dernier prédit bien les évolutions de pression pendant les phases de combustion et d'échappement pour les deux types de carburants. La simulation présente presque les mêmes pics de pression lorsque le moteur à allumage par compression est alimenté par le carburant diesel conventionnel et par le carburant biodiesel. Le peak de pression du carburant biodiesel dépasse celui du carburant diesel conventionnel en raison des teneurs élevées en oxygène et de nombre de cétane plus élevés du carburant biodiesel. La teneur élevée en oxygène, la vaporisation et le nombre de cétane des carburants peuvent influencer la fraction massique de carburant brûlé. Le nombre de cétane est l'un des facteurs les plus importants qui influencent le peak de pression. Un nombre de cétane plus élevé correspond normalement à réduire la durée d'auto-inflammation, à réduire le temps de prémélange et à déplacer la combustion plus tôt vers le temps de compression. Dans un moteur à allumage par compression, le peak de pression dans la chambre de combustion dépend de la quantité du carburant brûlé pendant la combustion de prémélange dans les étapes initiales de combustion et une durée d'auto-inflammation plus longue peut conduire à un peak de pression élevé dans la chambre de combustion.

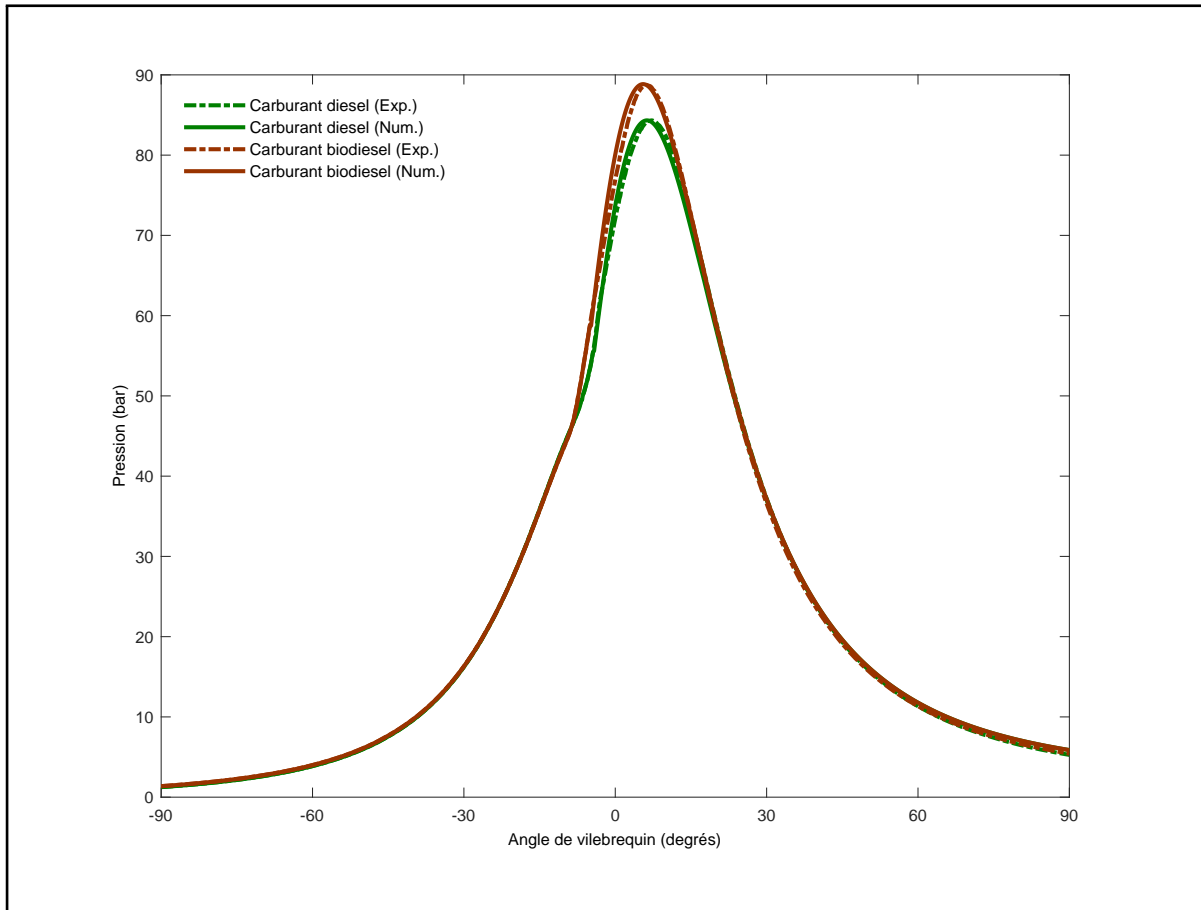


Figure 3.1: Comparaison des pressions expérimentales avec les pressions simulées des carburants.

3.2.2 Dérivée de la pression

La Figure 3.2 représente la dérivée de la pression dans la chambre de combustion qui indique le cognement. Le début de la combustion se situe au niveau du dernier minimum local avant le pic de combustion dans chaque courbe qui représente la dérivée de la pression dans le cylindre par rapport à l'angle de vilebrequin. Comme on peut le voir sur cette figure, il n'y a aucun indicateur de cliquetis ou de bruit avant le début de la combustion et après la fin de la combustion car les courbes de densité de cliquetis sont lisses pendant ces deux périodes d'intervalle. Le cliquetis pendant la phase de combustion peut être dû à une instabilité de la combustion ou au chaos de la combustion.

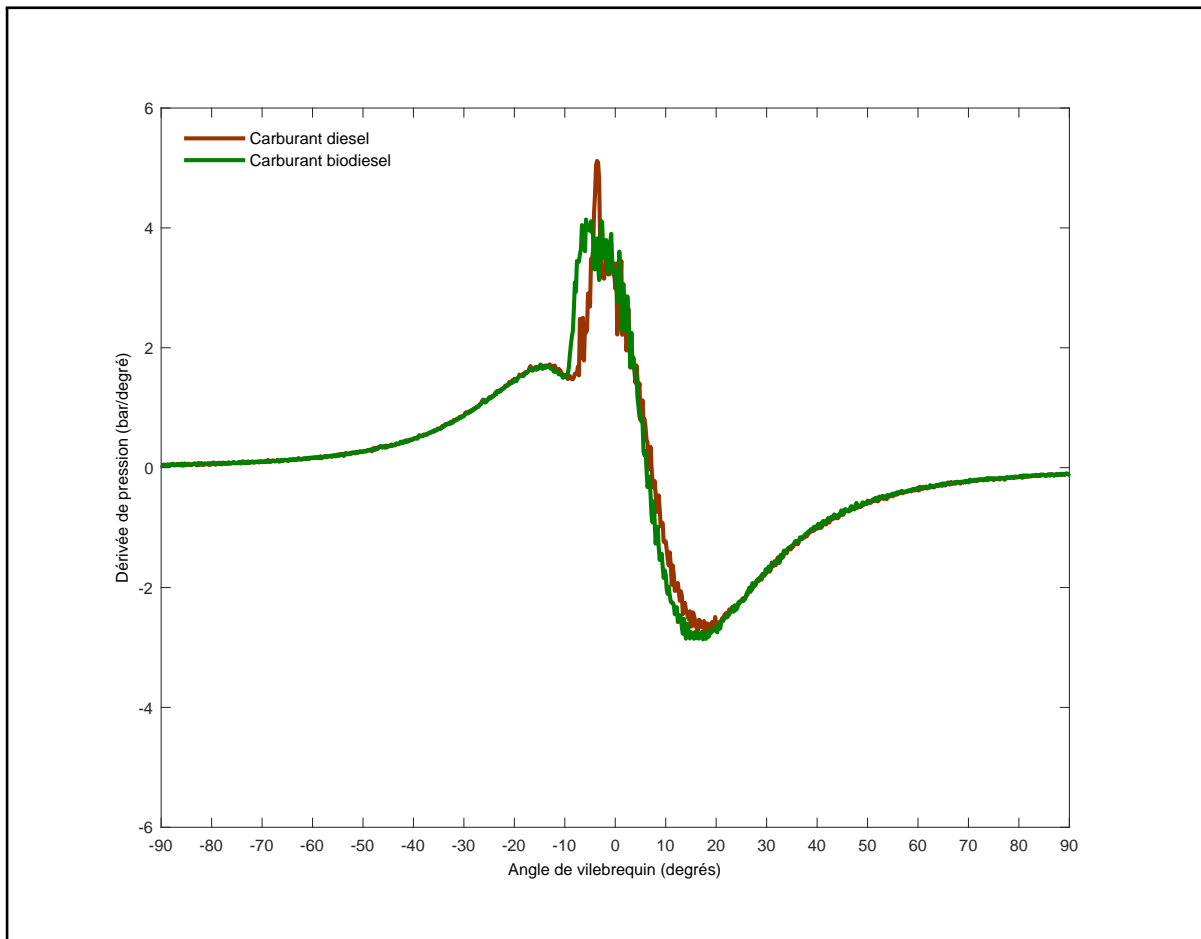
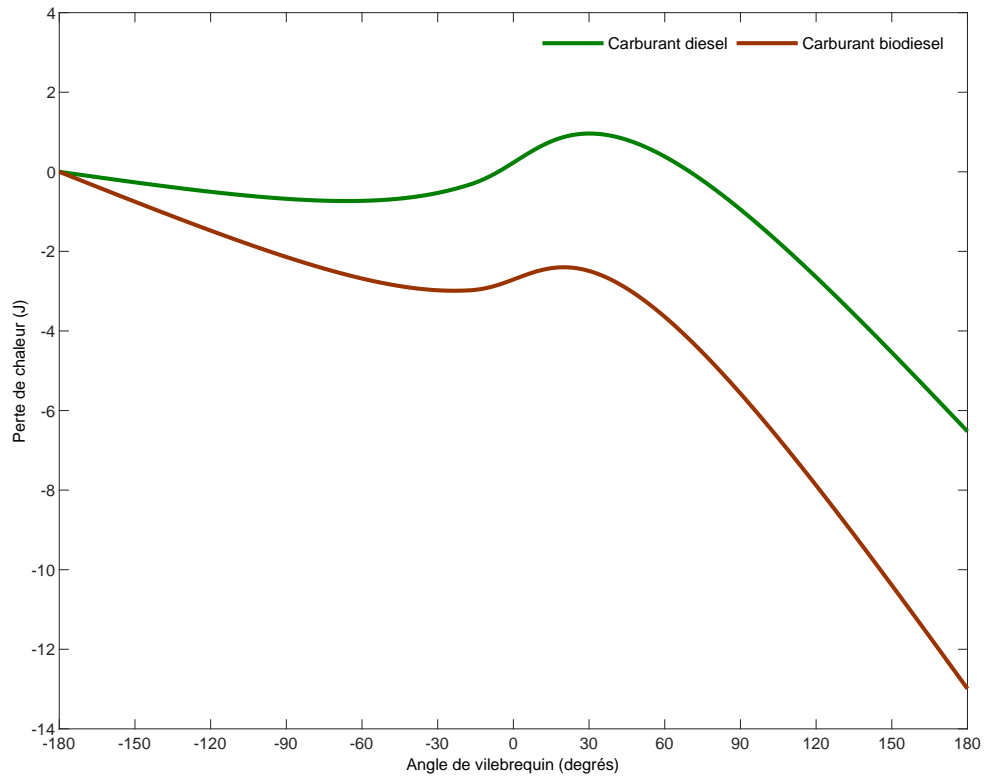


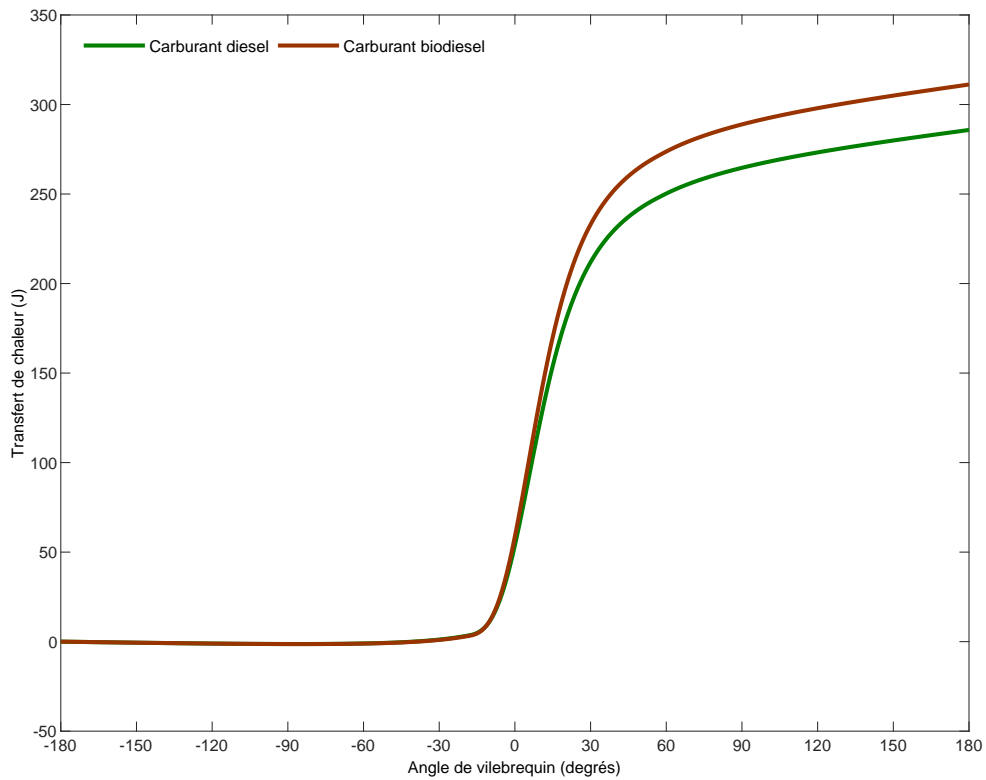
Figure 3.2: Dérivée de pression dans la chambre de combustion.

3.3 Travail et transferts de chaleur

La Figure 3.3 montre les variations de transfert de chaleur entre les produits de combustion et les parois de la chambre de combustion et les pertes de chaleur par fuites par les joints. Les réactions de combustion se produisent généralement très rapidement, de l'ordre de 1 ms et peu de transfert de chaleur ou de travail a lieu sur l'échelle de temps de la combustion. Pour cette raison, la température maximale atteinte dans le processus de combustion est souvent proche de celle de la combustion adiabatique. On voit sur la Figure 3.3b que le transfert de chaleur pariétal est constant avant le début de la combustion de chaque carburant, ceci s'explique par la diminution de surface d'échange de transfert thermique par convection entre les produits de combustion et les parois de la chambre de combustion en contact avec ces derniers.



(a) Évolution de pertes de chaleur.



(b) Évolution de transfert de chaleur.

Figure 3.3: Évolutions de pertes de chaleur et de transferts de chaleur.

Le gaz non brûlé a une température assez uniforme, mais le gaz brûlé ne l'est pas. En raison de la combustion progressive, un gradient de température se développe dans le gaz brûlé. Lorsqu'un élément fluide brûle, son expansion comprime à la fois les gaz non brûlés et brûlés parce que le volume massique du gaz brûlé chaud est plus grand que celui du gaz non brûlé plus froid, l'augmentation de l'énergie interne massique spécifique due au travail de compression est plus élevée pour le gaz brûlé que pour le gaz non brûlé, [Figure 3.4](#). La valeur du travail effectué lorsque le moteur est alimenté par le carburant biodiesel est légèrement supérieure à celle du travail effectué lorsqu'il est alimenté par le carburant diesel conventionnel. L'augmentation du travail cumulé effectué par le carburant biodiesel est due à l'augmentation de la vitesse de dégagement de chaleur et du peak de pression.

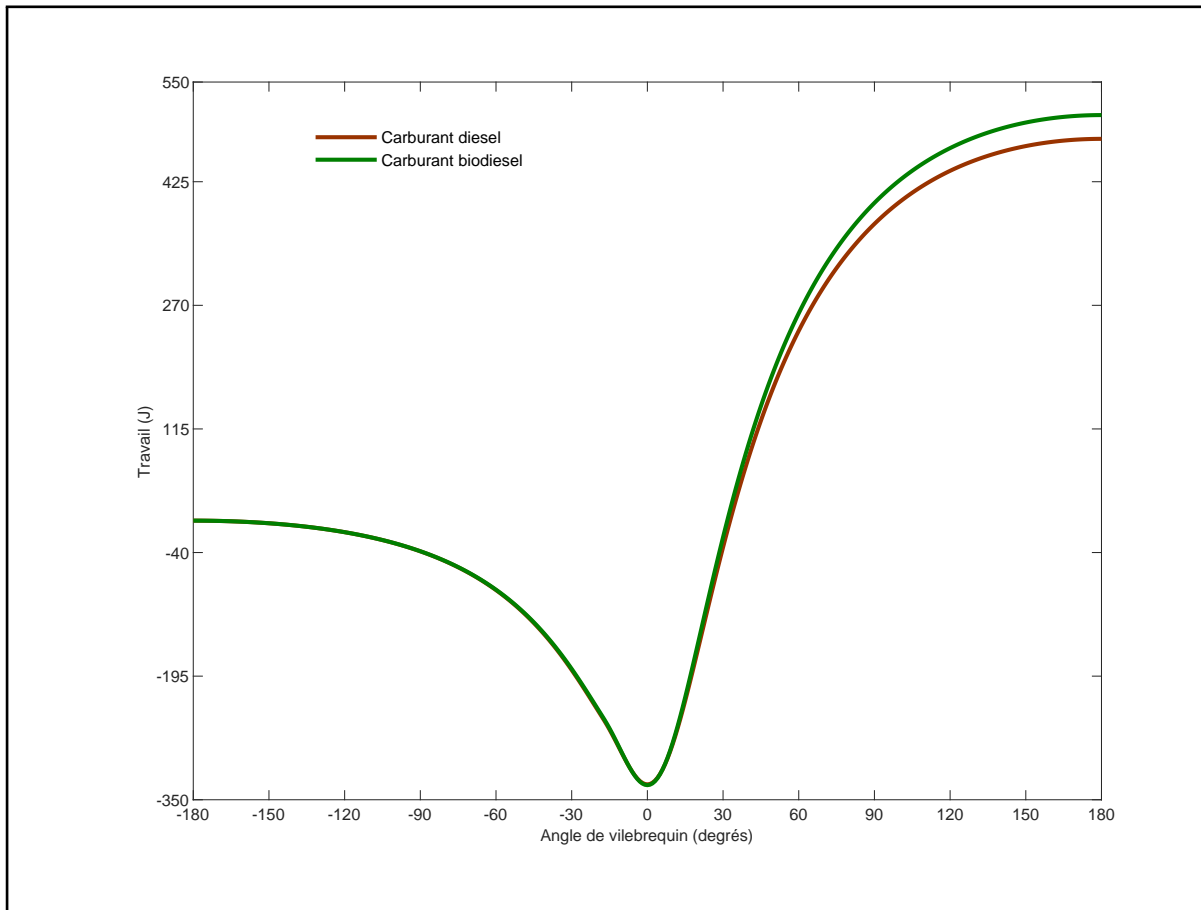


Figure 3.4: Évolution de pression et de travail.

La combustion du carburant diesel a des températures de réaction plus élevées que celles de la combustion du carburant biodiesel, [Figure 3.5](#), et c'est la raison des différences des émissions de NO_x entre les deux carburants. Une augmentation des émissions de NO_x pourrait résulter lors de la combustion du carburant diesel conventionnel; la température adiabatique de flamme à la stœchiométrie du carburant diesel conventionnel est supérieure à celle du carburant biodiesel, comme illustré sur la [Figure 3.6](#). La température adiabatique de flamme est utilisée comme une température initiale des produits de combustion au début du dégagement de chaleur. Les éléments fluides conservent leur identité c'est-à-dire aucun mélange entre les éléments fluides ne se produit.

Chaque élément brûle à sa température adiabatique de flamme basée sur les températures du gaz imbrûlé au moment où il a brûlé. Une fois, l'élément est brûlé, sa température suit la

pression car il est plus ou moins comprimé ou dilaté de manière isentropique. Le premier élément à brûler est considérablement comprimé ; chaque élément suivant à brûler est moins comprimé, et le dernier élément à brûler ne subit aucune compression. En conséquence, le premier élément à brûler est plus chaud que tous les autres, et le dernier élément à brûler est le moins chaud.

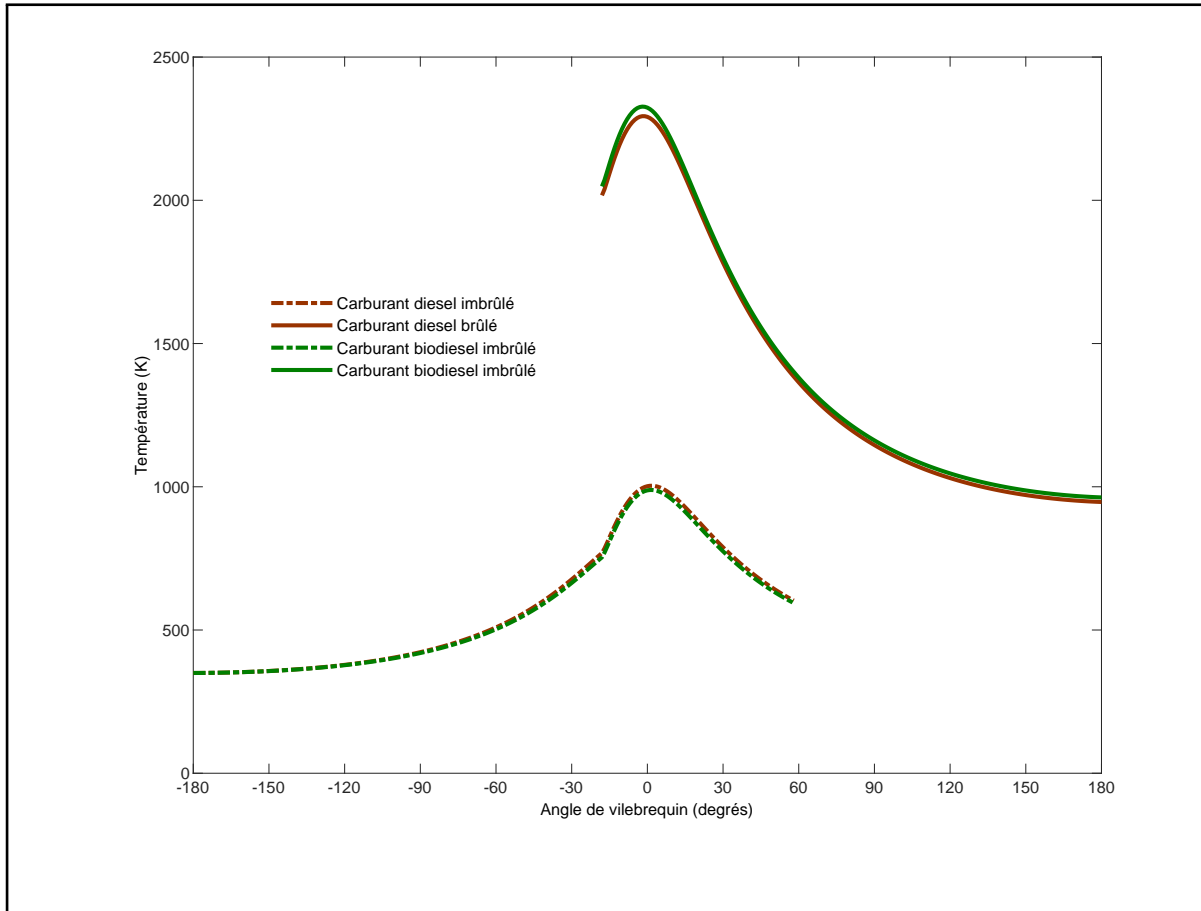


Figure 3.5: Évolution des températures des carburants diesel conventionnel et biodiesel.

Nous voyons sur la Figure 3.6 que les températures de flamme adiabatique peuvent atteindre 2300 K pour une combustion stœchiométrique. À des températures aussi élevées, les espèces stables à température ambiante peuvent se dissocier par des réactions telles que



Ainsi, du monoxyde de carbone, de l'hydrogène et d'autres espèces réduites peuvent être présents même s'il y a suffisamment d'oxygène disponible pour une combustion complète. En fait, ces espèces s'oxydent rapidement, mais elles sont continuellement reconstituées par la dissociation et d'autres réactions qui se produisent dans les gaz chauds.

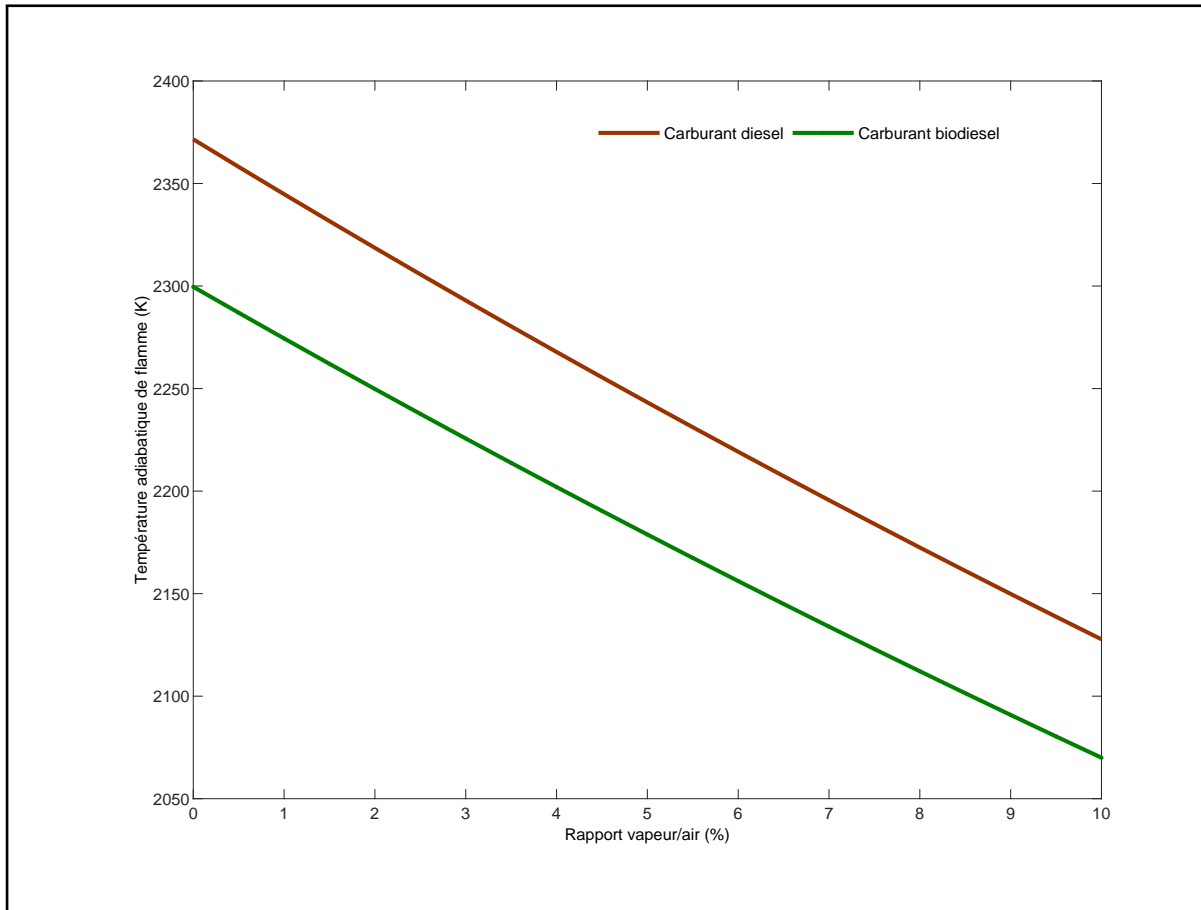


Figure 3.6: Température adiabatique de flamme pour la richesse $\phi = 1$.

La Figure 3.7 illustre les températures adiabatiques de flamme en fonction des pourcentages de la vapeur injectée. On observe clairement que les températures adiabatiques de flamme des combustibles dans les cas de combustion riche sont plus élevées que celles des combustibles dans les cas de combustion pauvre. Le carburant diesel conventionnel a les températures adiabatiques de flamme maximales dans les deux cas de combustion. Comme on peut le voir sur cette figure, la vapeur réduit les températures adiabatiques de flamme car la capacité thermique de la vapeur est supérieure à celle des autres produits de combustion.

Les effets de l'injection de vapeur sur la combustion des carburants biodiesel et des carburants diesel conventionnel est que la formation des produits de combustion tels que CO_2 , N_2 , O_2 , CO , H , O , OH et NO a diminué et les chaleurs spécifiques augmentent au fur et à mesure que le rapport vapeur/air injecté augmente. Lorsque la température augmente, les réactions de dissociation augmentent considérablement. À la température de flamme adiabatique, des quantités substantielles de monoxyde de carbone, d'hydrogène et d'autres produits partiellement oxydés peuvent être présentes même s'il y a suffisamment d'oxygène disponible pour une combustion complète. Lorsque la température diminue, l'équilibre chimique favorise la formation des produits stables, CO_2 , H_2O , N_2 et O_2 , et la destruction des espèces les moins stables, CO , H_2 , NO , O , H , OH , etc. En dessous d'environ 1300 K, seules les espèces les plus stables sont présentes en quantité significative dans les produits de combustion à l'équilibre. Par conséquent, cette méthode réduit les émissions de NO et augmente les performances du moteur à allumage par compression.

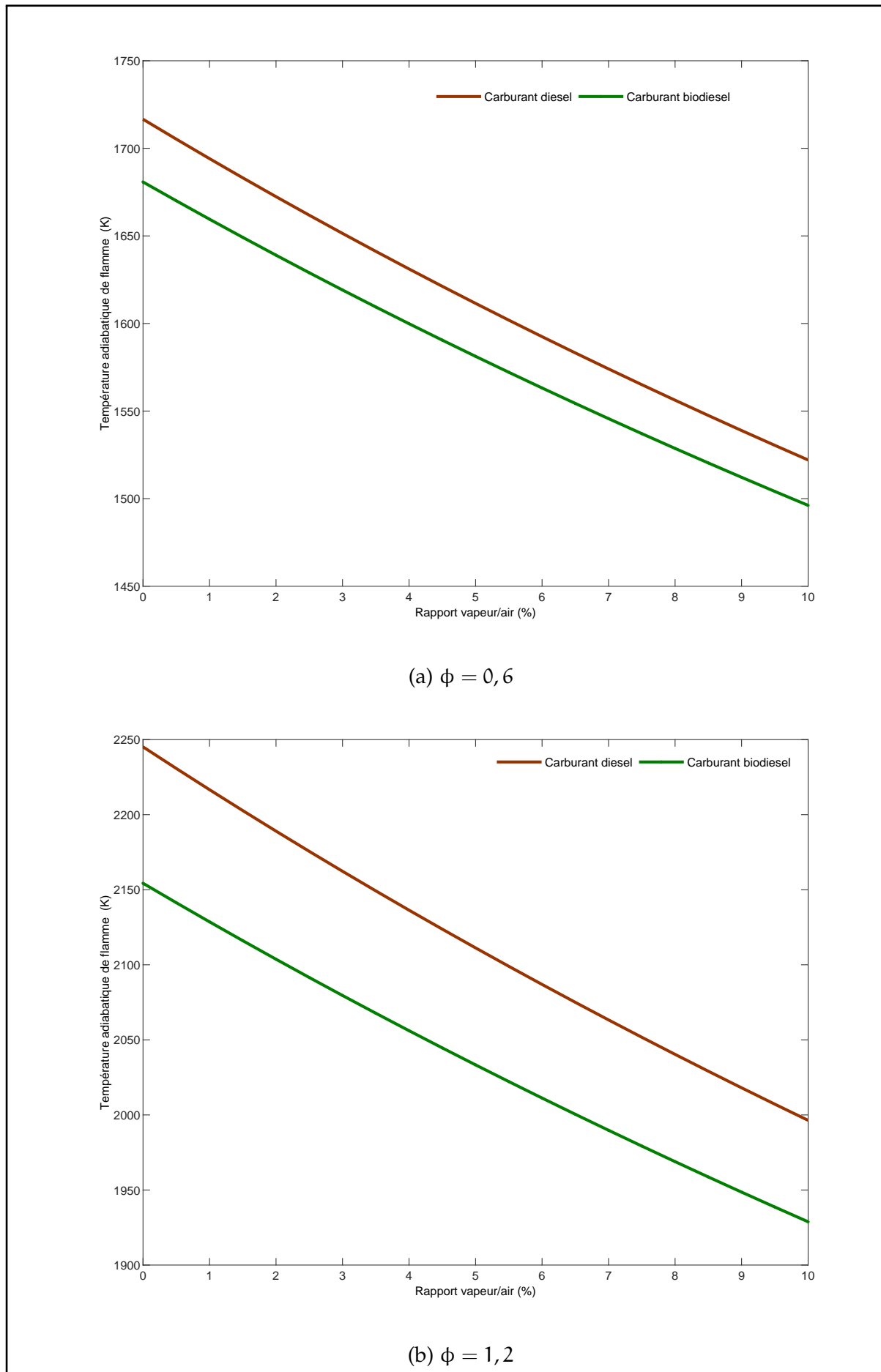


Figure 3.7: Température adiabatique de flamme.

3.4 Optimisation des moteurs à allumage par compression

3.4.1 Effets d'injection de vapeur sur les produits de combustion

La simulation de la flamme adiabatique de combustion avec l'injection de la vapeur a été réalisée pour le carburant biodiesel et les carburants diesel conventionnels afin d'étudier les effets de l'injection de vapeur sur les produits de combustion à l'équilibre et les propriétés thermodynamiques. La température initiale de l'air et du carburant est supposée égale à 300 K et la pression initiale de l'air et du mélange de carburant est égale à la pression de la chambre de combustion. La pression à l'intérieur de la chambre de combustion est de 30 atm., ce qui est supposé être la pression de la vapeur injectée. La température de la vapeur injectée est de 300 °C. La température du mélange imbrûlé est calculée en supposant un équilibre thermique parmi les réactifs. La température initiale est obtenue à partir de l'équilibre thermique du mélange carburant-air et de vapeur. Les résultats ont été présentés comparativement pour les cas de combustion pauvre et de combustion riche avec une augmentation de l'injection de vapeur de 0 % à 10 %.

Les Figures 3.8 et 3.9 montrent la variation des fractions molaires à l'équilibre de CO_2 en fonction des rapports vapeur/air. Ces fractions molaires diminuent remarquablement avec l'augmentation de rapport vapeur/air. Le carburant NBD donne les fractions molaires à l'équilibre les plus élevées tandis que le carburant WCOBD présente les fractions molaires à l'équilibre les plus bas.

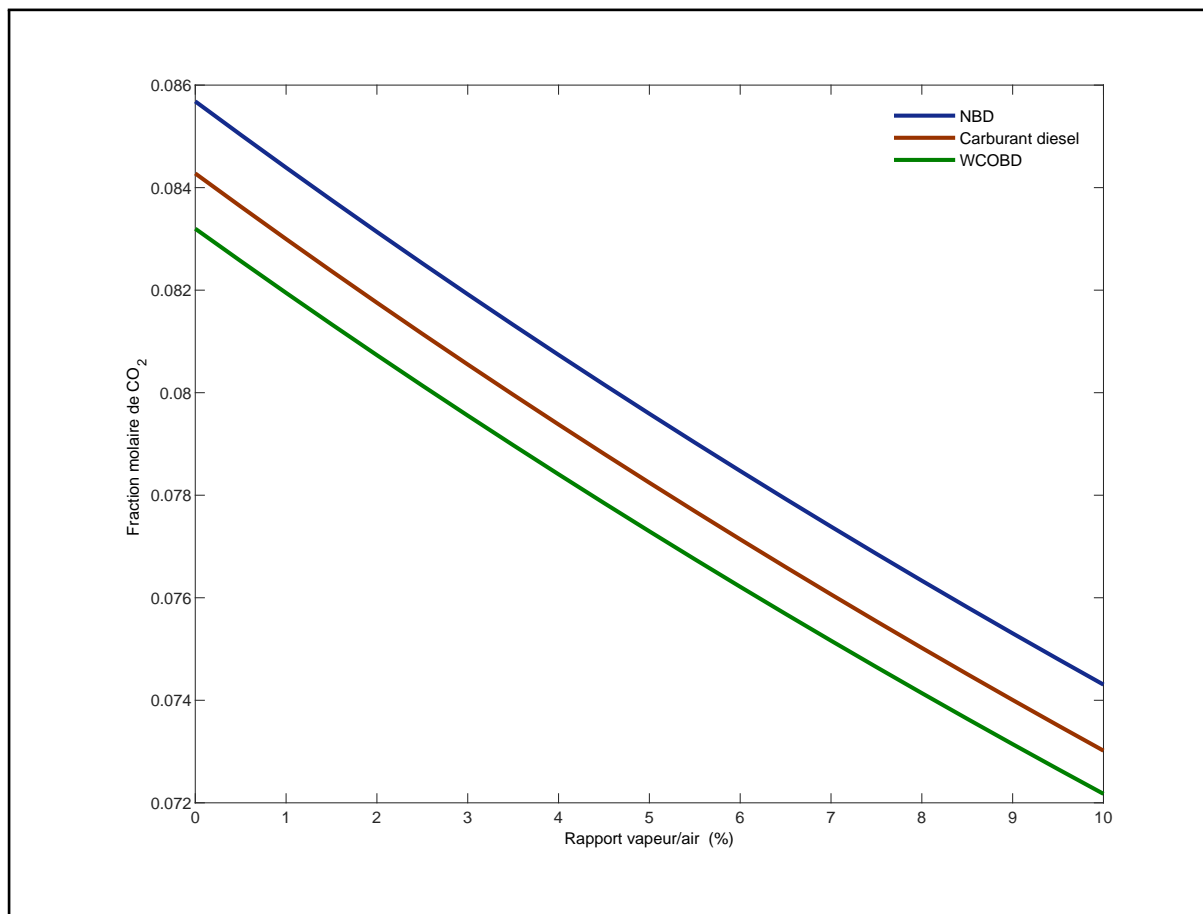


Figure 3.8: Variation de fraction molaire à l'équilibre de CO_2 avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 0,6$.

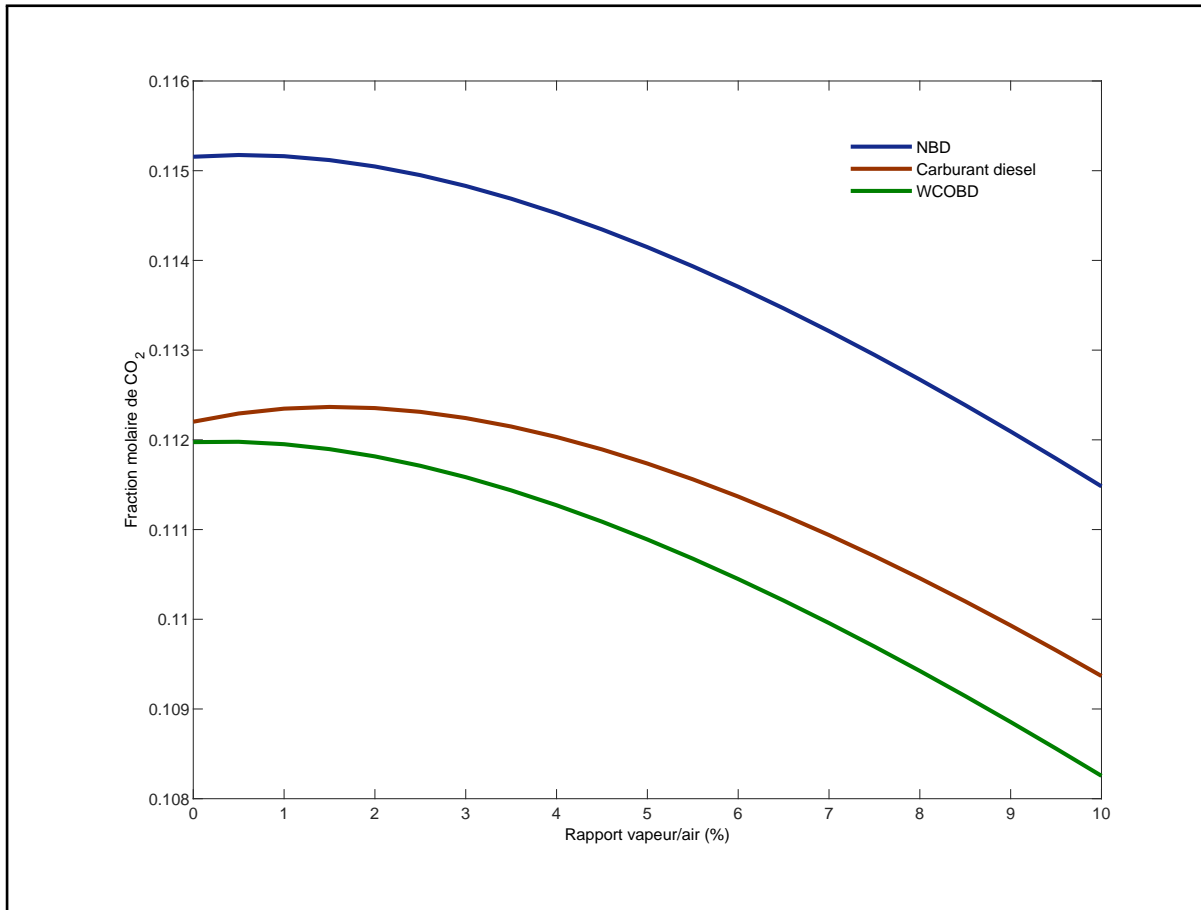


Figure 3.9: Variation de fraction molaire à l'équilibre de CO₂ avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 1,2$.

Les [Figures 3.10a](#) et [3.10b](#) illustrent la variation des fractions molaires à l'équilibre de H₂O avec le rapport vapeur/air. Il est clair que la fraction molaire à l'équilibre de H₂O augmente avec l'augmentation des rapports vapeur/air. La fraction molaire maximale à l'équilibre de H₂O est obtenue avec le carburant WCOBD et la fraction molaire minimale à l'équilibre de H₂O est observée avec le carburant diesel conventionnel. Ceci peut s'expliquer par le fait que le carburant WCOBD a le rapport α/β le plus bas tandis que le carburant diesel conventionnel a le rapport α/β le plus élevé. Plus le rapport α/β est petit, plus la fraction molaire à l'équilibre de H₂O est grande.

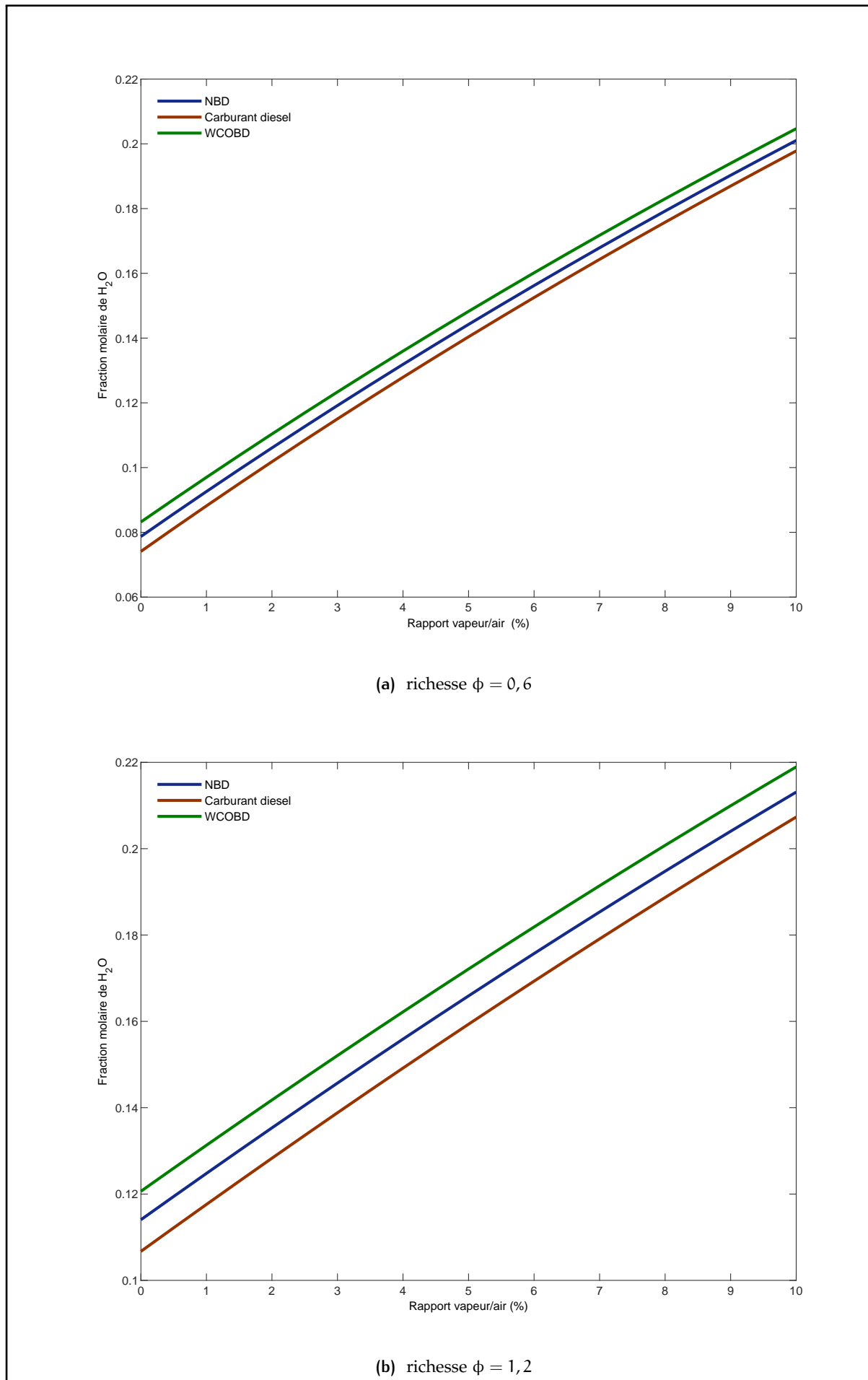


Figure 3.10: Variation de fraction molaire à l'équilibre de H_2O avec le rapport vapeur/air.

Les Figures 3.11 et 3.12 illustrent les fractions molaires à l'équilibre de N_2 en fonction de rapport vapeur/air. Il est clair que la fraction molaire à l'équilibre de N_2 diminue avec l'augmentation de rapport vapeur/air. La fraction molaire maximale à l'équilibre de N_2 est obtenue avec du carburant diesel conventionnel tandis la fraction molaire minimale à l'équilibre de N_2 est observée avec le carburant WCOBD. La raison en est que le carburant WCOBD a le rapport α/β le plus bas tandis que le carburant diesel a le rapport α/β le plus élevé.

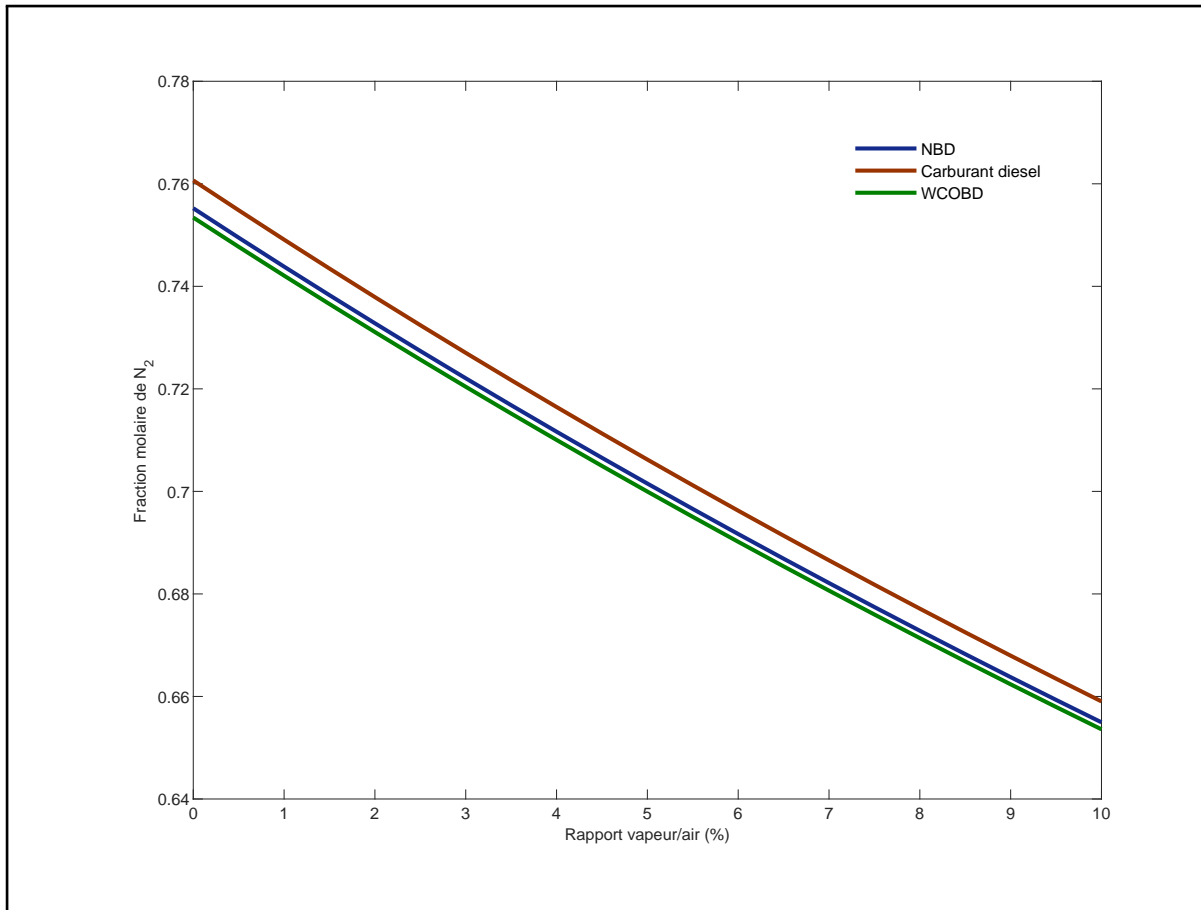


Figure 3.11: Variation de fraction molaire à l'équilibre de N_2 avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 0,6$.

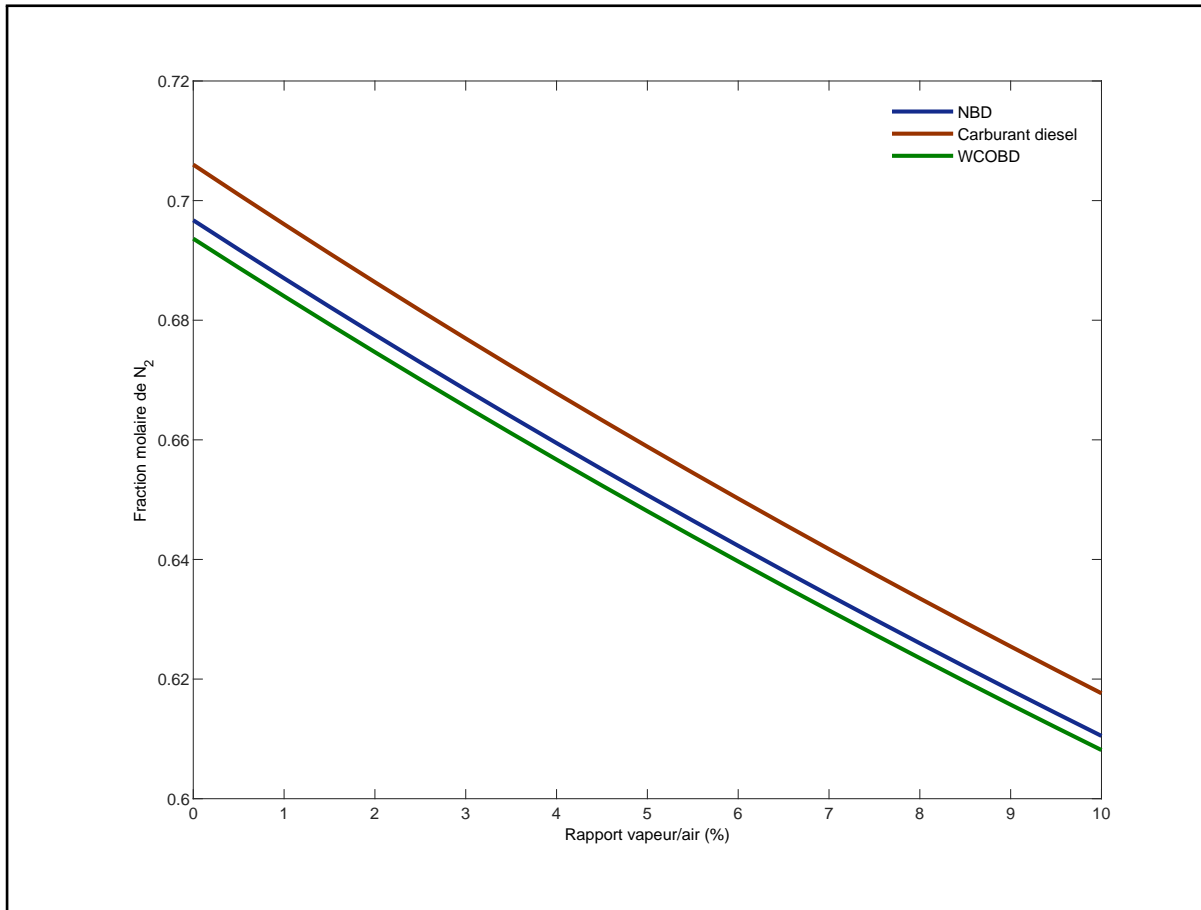


Figure 3.12: Variation de fraction molaire à l'équilibre de N_2 avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 1,2$.

Les Figures 3.13a et 3.13b montrent la variation des fractions molaires à l'équilibre de O_2 en fonction de rapport vapeur/air. Il est clair que la fraction molaire à l'équilibre de O_2 diminue avec l'augmentation de rapport vapeur/air dans le cas d'une combustion pauvre. La fraction molaire maximale à l'équilibre de O_2 est obtenue avec le carburant diesel conventionnel et la fraction molaire minimale à l'équilibre de O_2 est observée avec le carburant WCOBD. Les fractions molaires à l'équilibre de O_2 sont beaucoup plus faibles dans les cas de combustion riche en raison de faibles concentrations en oxygène par rapport aux cas de combustion pauvre. La fraction molaire maximale à l'équilibre de O_2 se produit avec le carburant WCOBD et les fractions molaires minimales à l'équilibre de O_2 se produisent avec le carburant diesel conventionnel dans les cas de combustion riche.

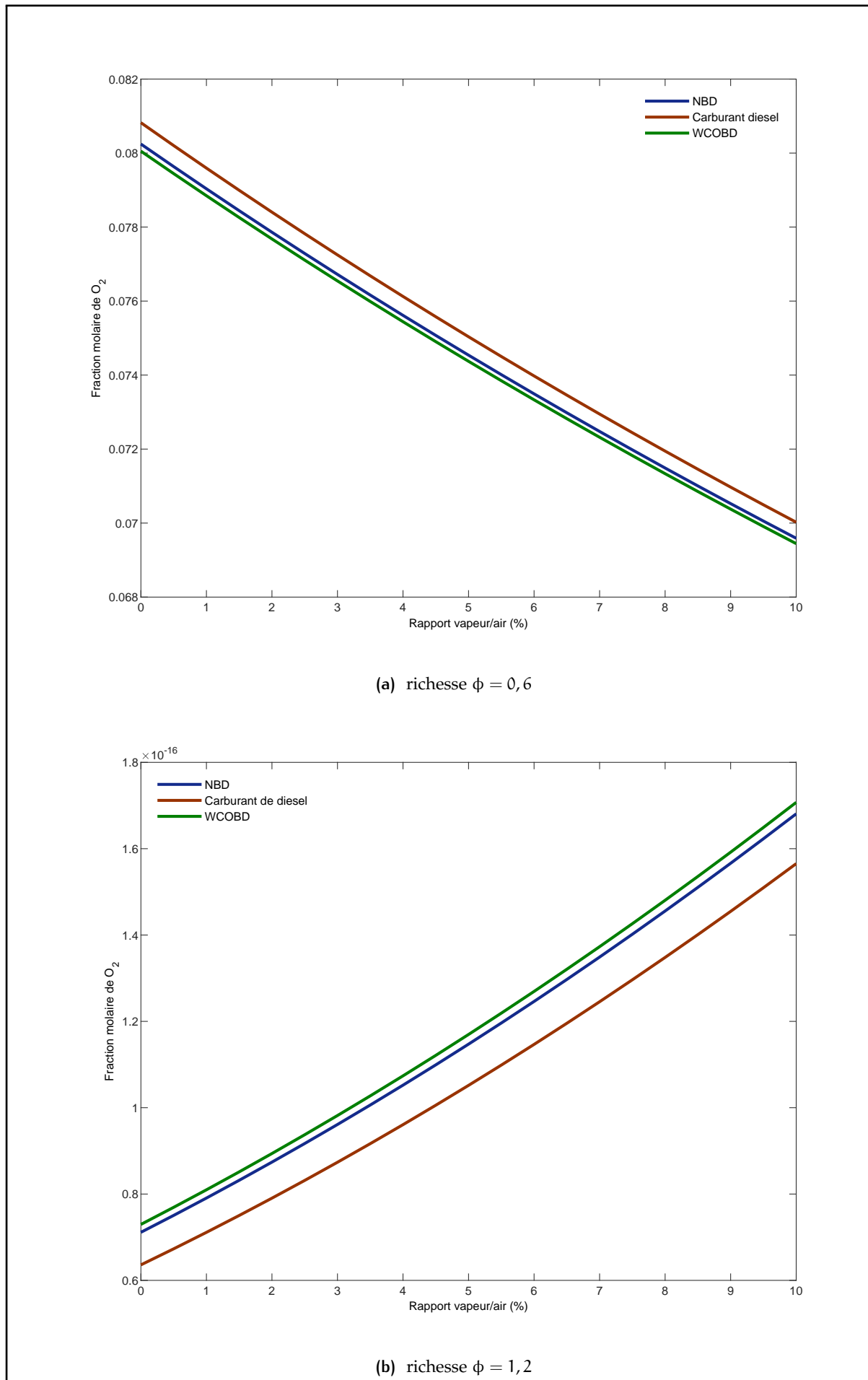


Figure 3.13: Variation des fractions molaires à l'équilibre de O_2 avec le rapport vapeur/air.

Les Figures 3.14 et 3.15 montrent la variation des fractions molaires à l'équilibre de O en fonction de rapport vapeur/air. Il est clair que la fraction molaire à l'équilibre de O diminue avec l'augmentation de rapport vapeur/air dans le cas d'une combustion pauvre. La fraction molaire maximale à l'équilibre de O est obtenue avec le carburant diesel conventionnel et la fraction molaire minimale à l'équilibre de O est observée avec le carburant WCOBD. Les fractions molaires à l'équilibre de O sont beaucoup plus faibles dans les cas de combustion riche en raison de faibles concentrations en oxygène par rapport aux cas de combustion pauvre. La fraction molaire maximale à l'équilibre de O se produit avec le carburant WCOBD et les fractions molaires minimales à l'équilibre de O se produisent avec le carburant diesel conventionnel dans les cas de combustion riche.

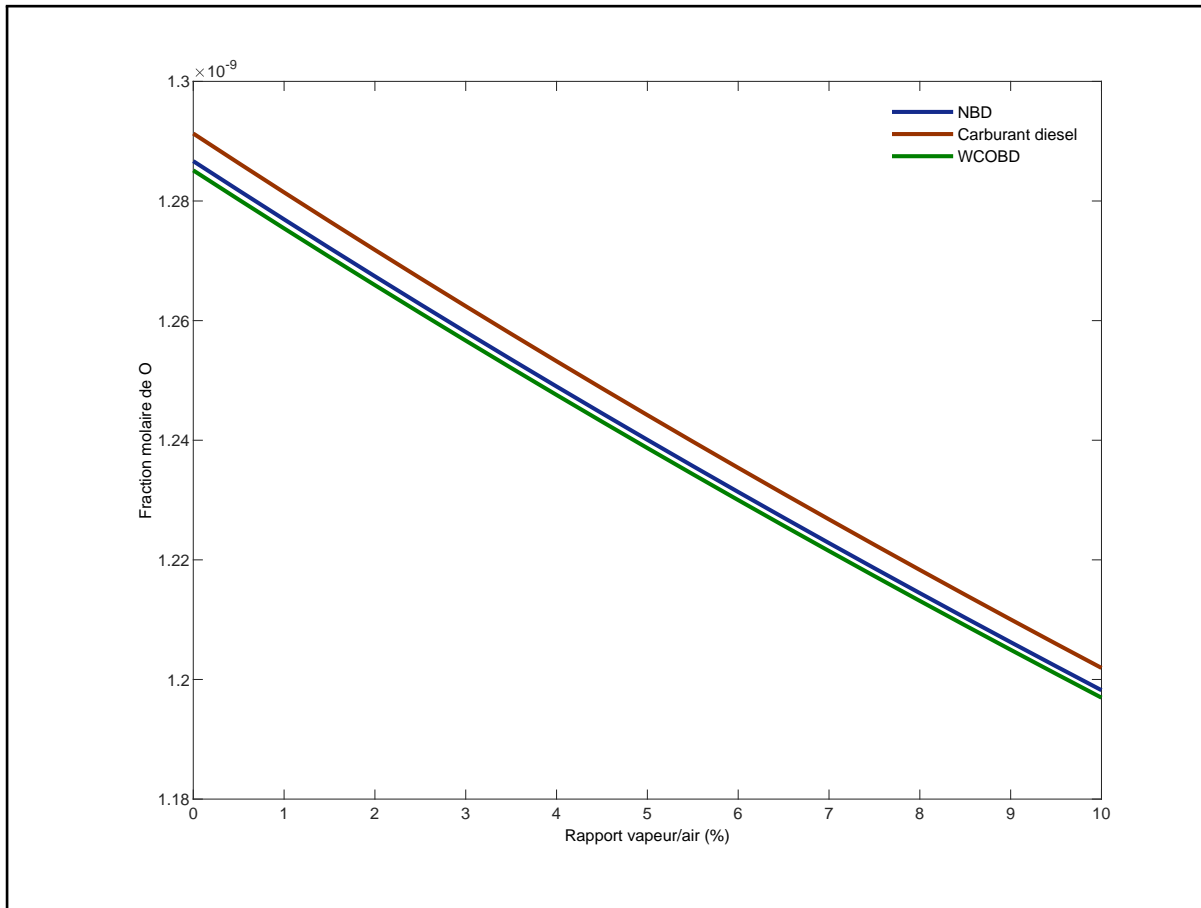


Figure 3.14: Variation des fractions molaires à l'équilibre de O avec le rapport vapeur/air pour richesse $\phi = 0,6$.

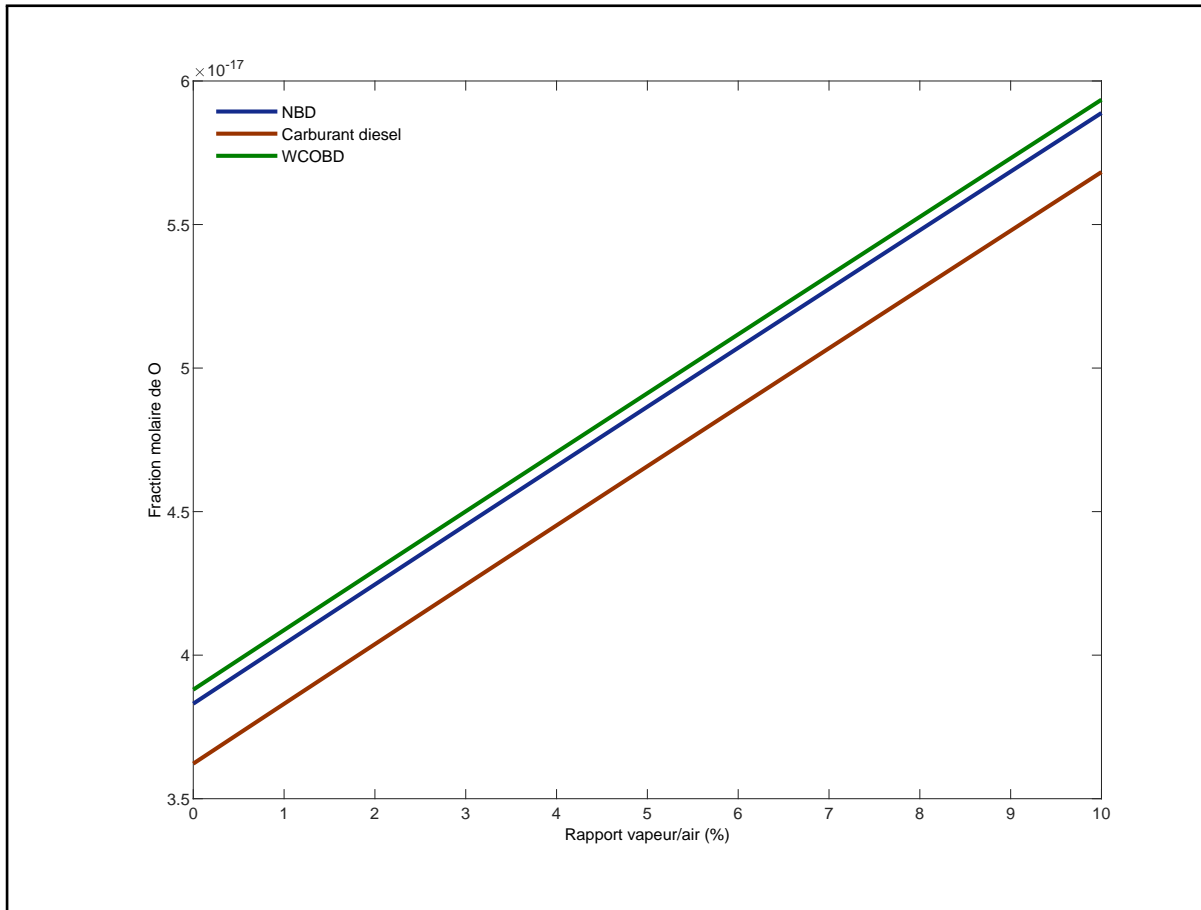


Figure 3.15: Variation de fraction molaire à l'équilibre de O avec le rapport vapeur/air pour richesse $\phi = 1,2$.

La [Figure 3.16](#) montre les variations des fractions molaires à l'équilibre de CO en fonction de rapport vapeur/air pour les richesses $\phi = 0,6$ et $\phi = 1,2$. La fraction molaire à l'équilibre de CO diminue avec l'augmentation de rapport vapeur/air. La fraction molaire maximale à l'équilibre de CO est observée avec le carburant diesel conventionnel et la fraction molaire minimale à l'équilibre de CO est observée avec le carburant WCOBD dans le cas d'une combustion riche. La fraction molaire maximale à l'équilibre de CO est obtenue avec le carburant NBD et la fraction molaire minimale à l'équilibre de CO est observée avec le carburant WCOBD dans le cas d'une combustion pauvre. Les fractions molaires à l'équilibre de CO sont beaucoup plus faibles dans les cas de combustion riche en raison de la concentration inférieure en oxygène par rapport à celle dans les cas de combustion pauvre. Les fractions molaires maximales à l'équilibre de CO se produisent avec le carburant WCOBD et les fractions molaires minimales à l'équilibre de CO se produisent avec le carburant diesel conventionnel.

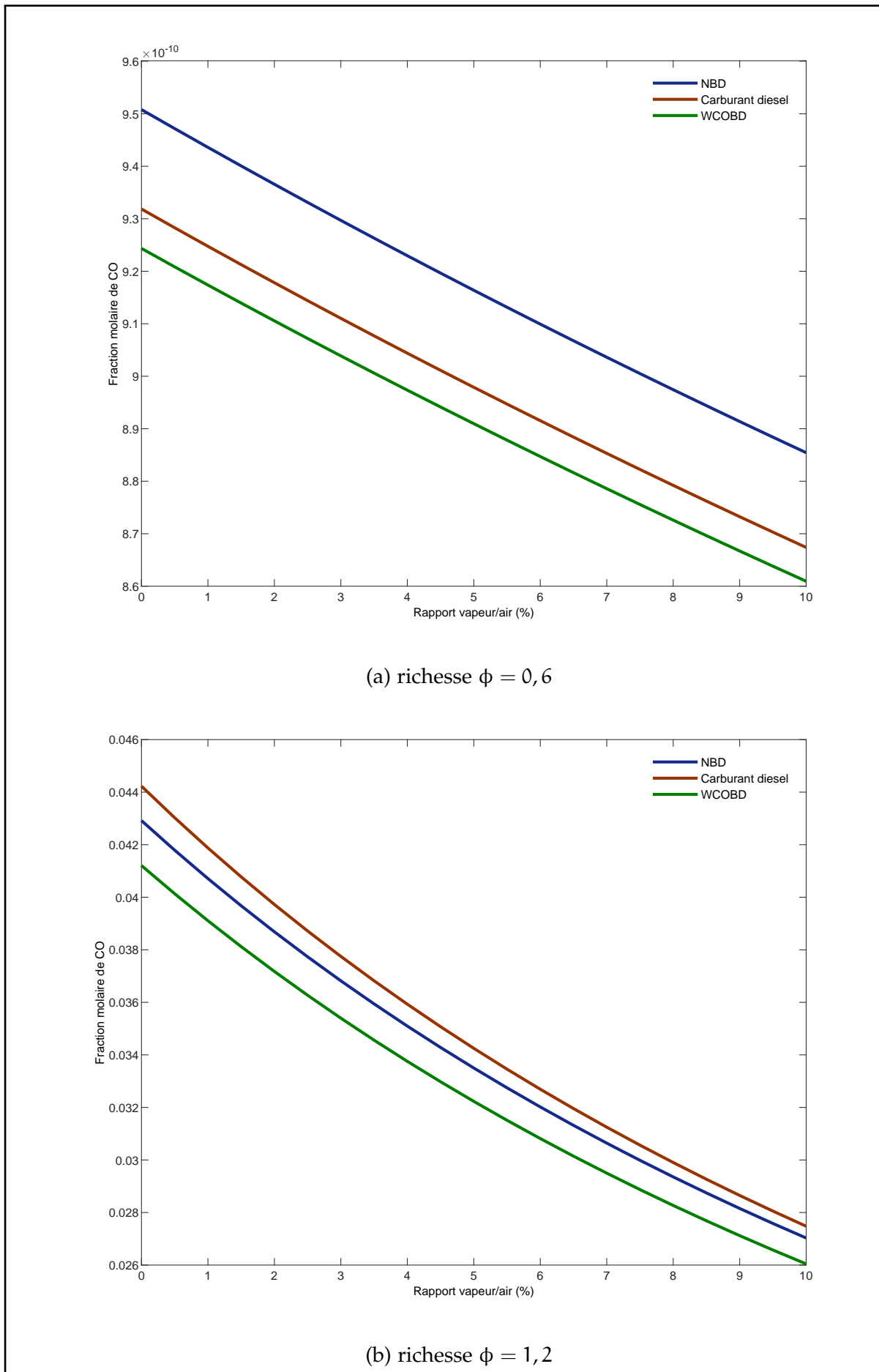


Figure 3.16: Variation des fractions molaires à l'équilibre de CO avec le rapport vapeur/air.

Les Figures 3.17 et 3.18 montrent les fractions molaires à l'équilibre de H_2 en fonction de rapport vapeur/air pour les richesses $\phi = 0,6$ et $\phi = 1,2$. Elles augmentent à la fois dans les cas de combustion riche et de combustion pauvre. La combustion du carburant WCOBD donne la fraction molaire à l'équilibre de H_2 la plus élevée.

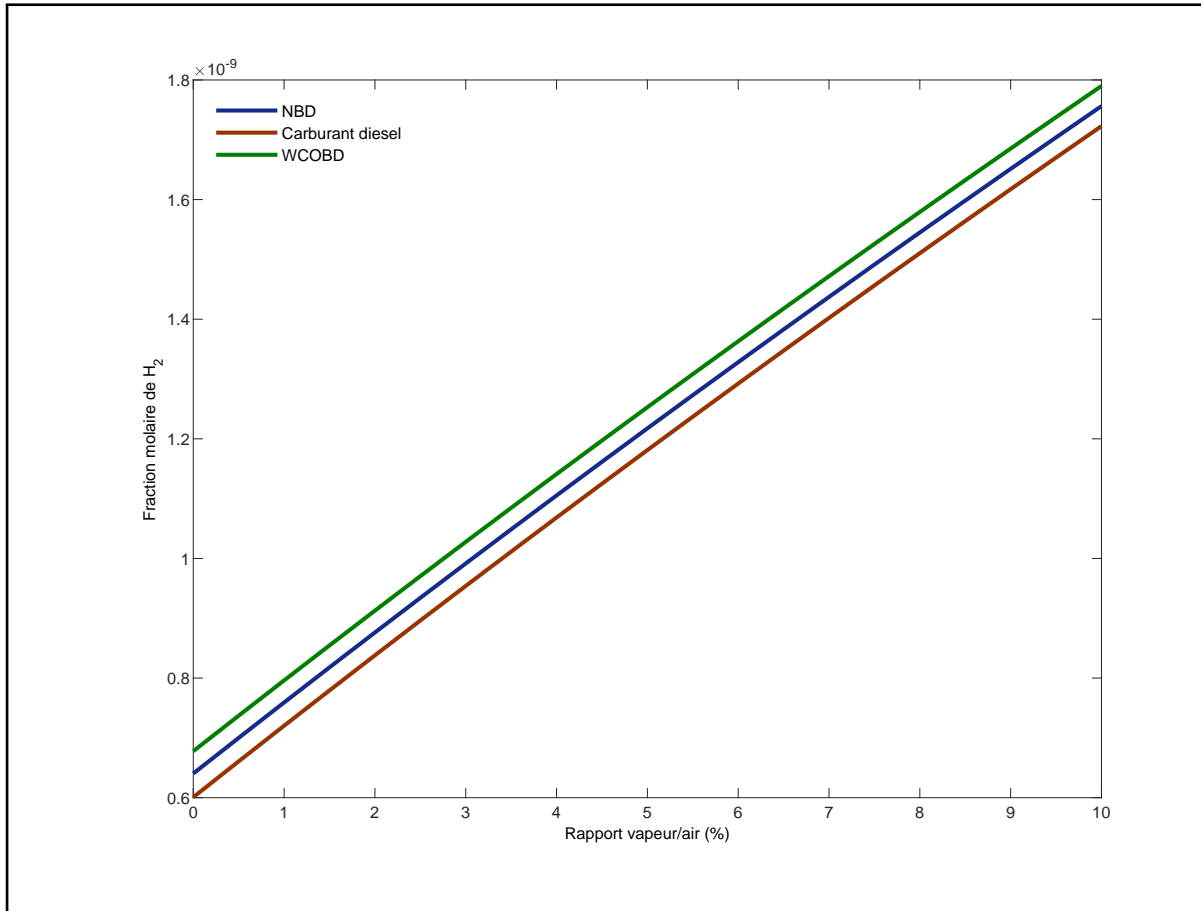


Figure 3.17: Variation des fractions molaires à l'équilibre de H_2 avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 0,6$.

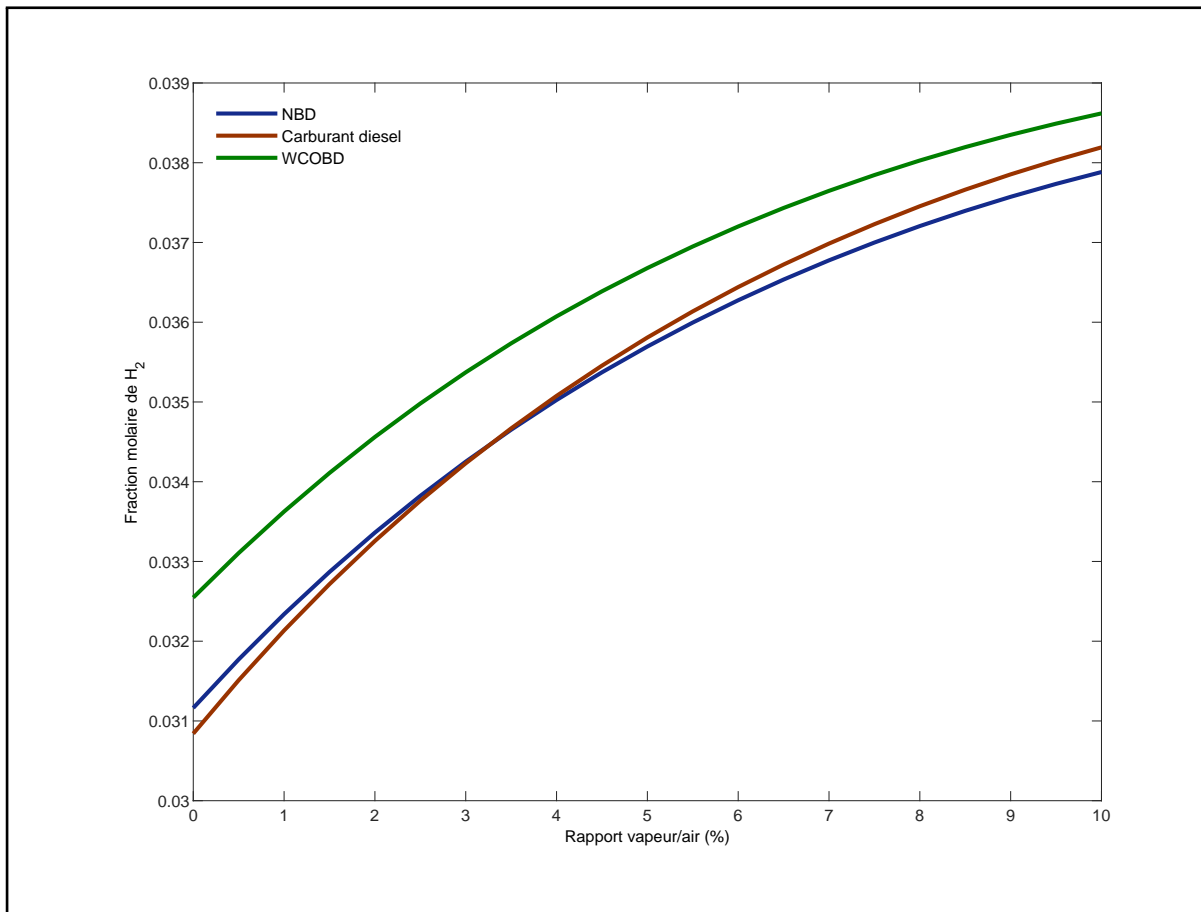


Figure 3.18: Variation des fractions molaires à l'équilibre de H_2 avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 1,2$.

La Figure 3.19 montre les fractions molaires à l'équilibre de H en fonction de rapport vapeur/air pour les richesses $\phi = 0,6$ et $\phi = 1,2$. Elles augmentent à la fois dans les cas de combustion riche et dans les cas de combustion pauvre. La combustion du carburant WCOBD donne la fraction molaire à l'équilibre de H la plus élevée.

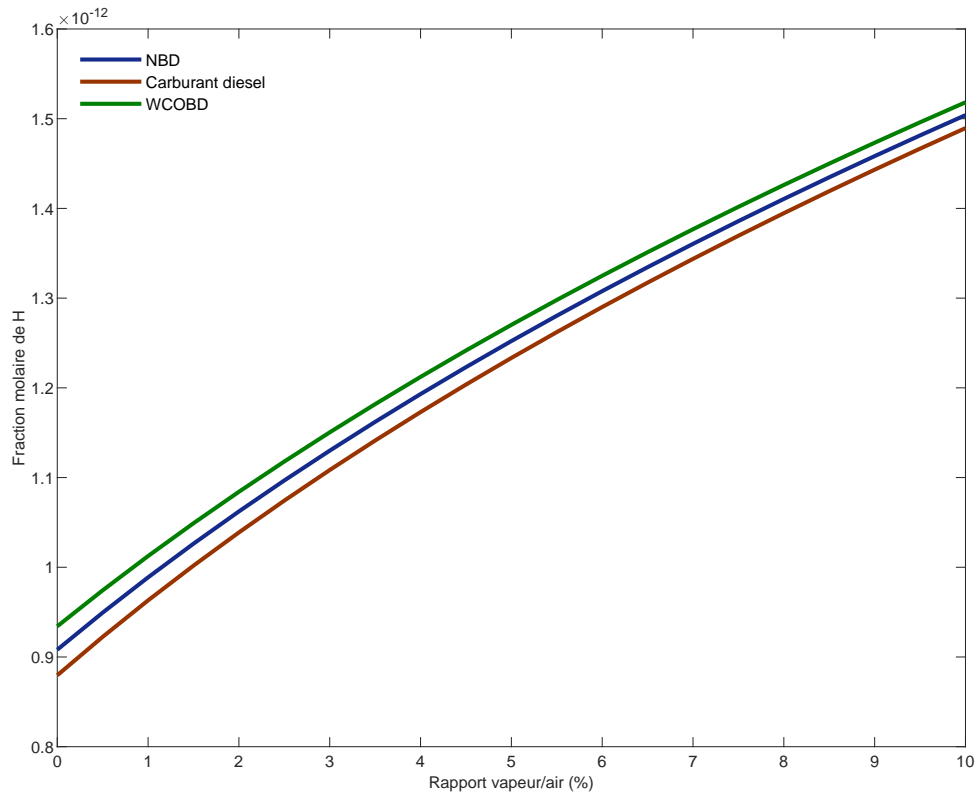
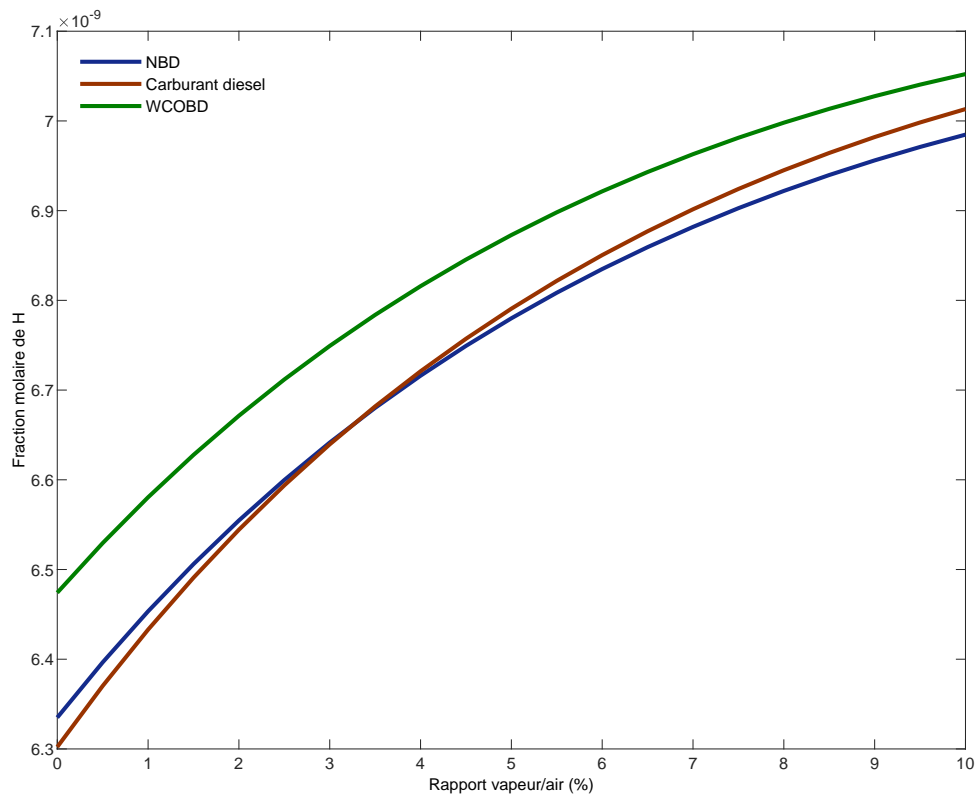
(a) richesse $\phi = 0,6$ (b) richesse $\phi = 1,2$

Figure 3.19: Variation des fractions molaires à l'équilibre de H avec le rapport vapeur/air.

Les Figures 3.20 et 3.21 montrent les variations des fractions molaires à l'équilibre de OH en fonction de rapport vapeur/air pour les richesses $\phi = 0,6$ et $\phi = 1,2$. Les fractions molaires à l'équilibre de OH augmentent légèrement avec l'augmentation de rapport vapeur/air dans les cas de combustion riche et de combustion pauvre. Le carburant WCOBD libère les fractions molaires à l'équilibre de OH les plus élevées tandis que le carburant diesel conventionnel libère les fractions molaires à l'équilibre de OH les plus faibles dans les cas de combustion riche et de combustion pauvre.

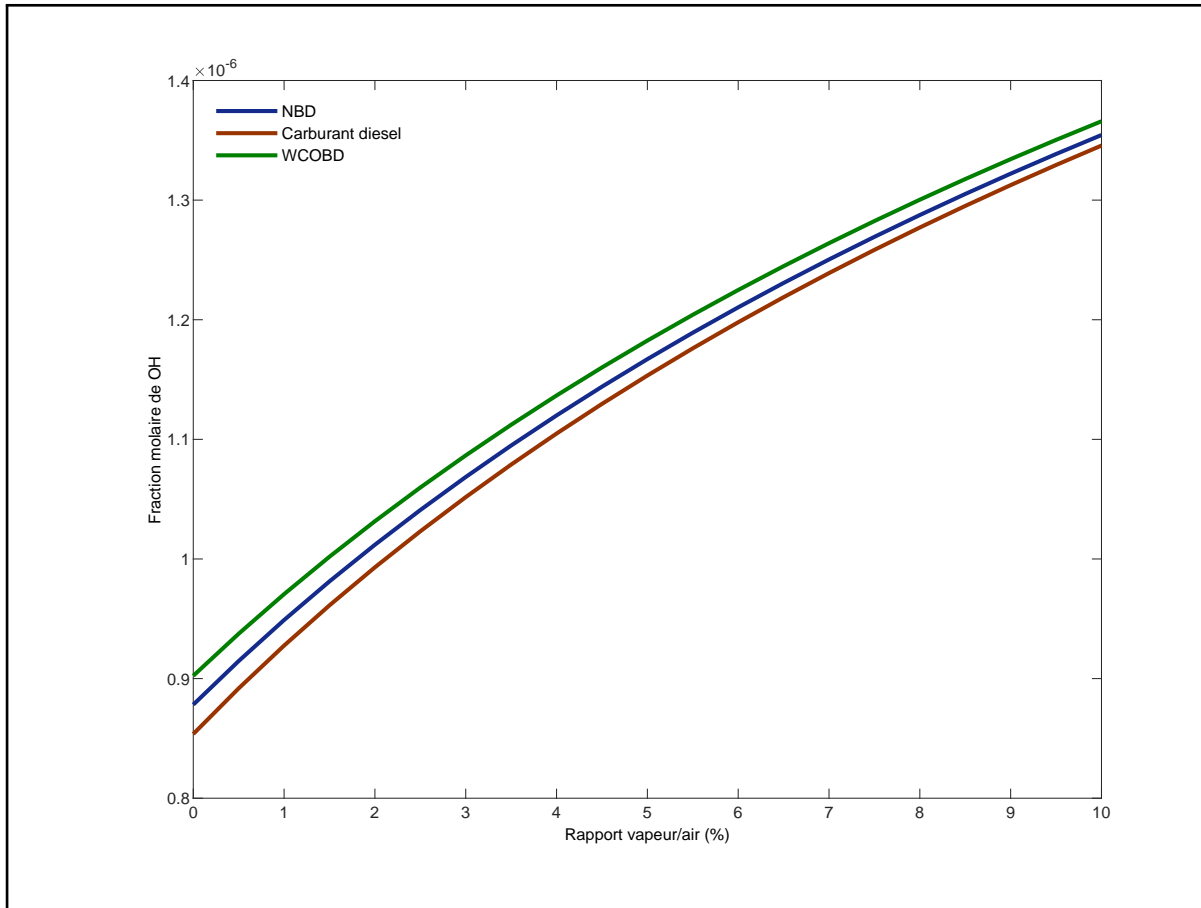


Figure 3.20: Variation des fractions molaires à l'équilibre de OH avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 0,6$.

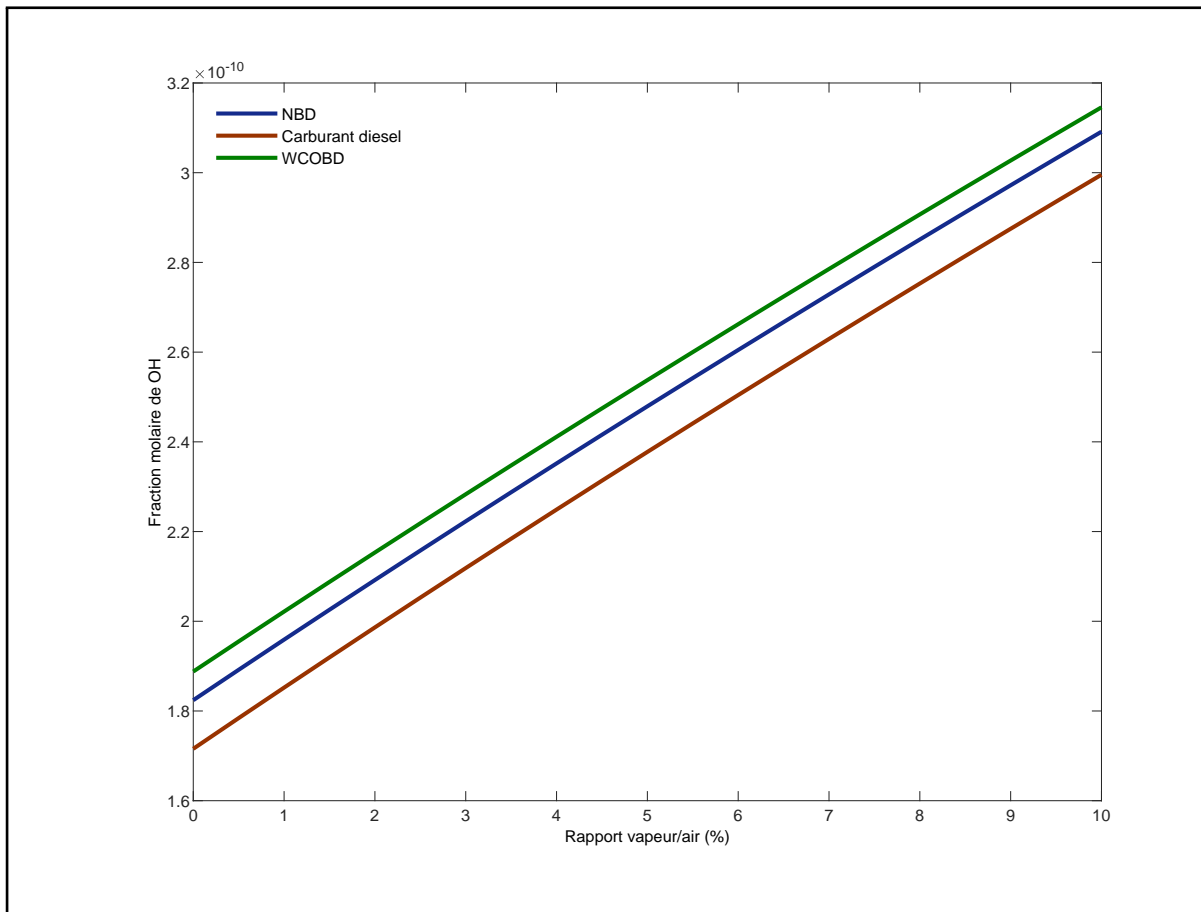


Figure 3.21: Variation des fractions molaires à l'équilibre de OH avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 1,2$.

Les Figures 3.22a et 3.22b montrent les variations des fractions molaires à l'équilibre de NO en fonction de rapport vapeur/air pour les richesses $\phi = 0,6$ et $\phi = 1,2$. Les fractions molaires à l'équilibre de NO diminuent avec l'augmentation de rapport vapeur/air dans les cas de combustion pauvre. Le carburant diesel libère les fractions molaires à l'équilibre de NO les plus élevées tandis que le carburant WCOBD libère les fractions molaires à l'équilibre de NO les plus faibles dans les cas de combustion pauvre.

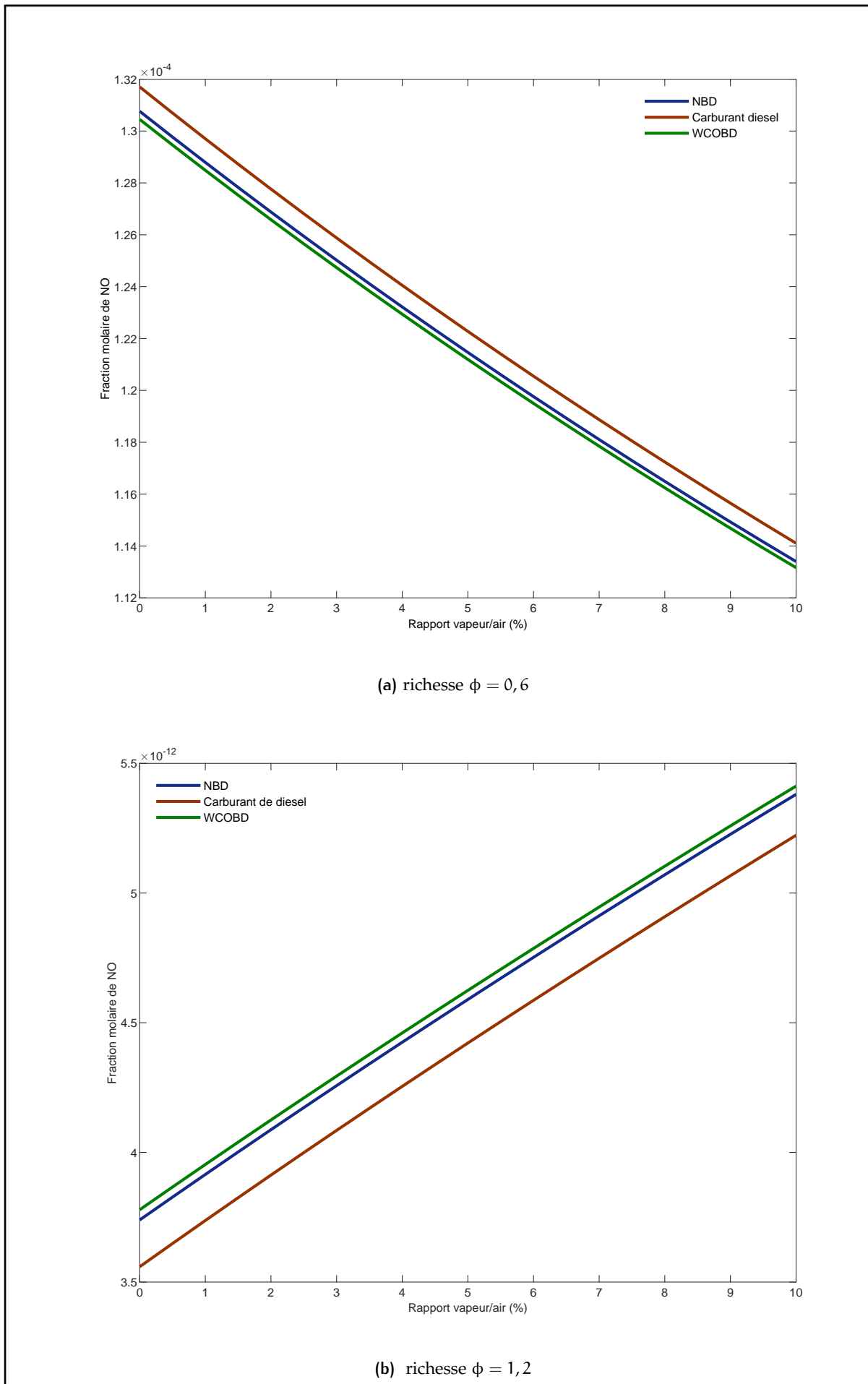


Figure 3.22: Variation des fractions molaires à l'équilibre de NO avec le rapport vapeur/air.

3.4.2 Effets d'injection de vapeur sur la température adiabatique de flamme

Les températures adiabatiques de flamme pour le carburant diesel et pour le carburant biodiesel admis dans la chambre de combustion à la température initiale de 298 K et à la pression initiale de 1 bar sont présentées sur la Figure 3.23 en fonction de la richesse. Il y a peu de dépendance du type de combustible parmi les hydrocarbures qui ont des températures adiabatiques de flamme d'environ 2250 K. Les températures adiabatiques de flamme sont maximales proches de la stœchiométrie. Ceci est cohérent avec l'effet de la richesse sur l'enthalpie illustré sur les Figures 3.23a et 3.23b, puisque les mélanges avec une chaleur spécifique relativement plus faible subiront un changement de température plus important pour un dégagement de chaleur donné. De plus, les calculs montrent que la température adiabatique de flamme diminue avec l'augmentation du pourcentage de vapeur injectée et augmente légèrement avec la pression.

Lorsque 0,716 kg de vapeur est injectée pour chaque kilogramme de carburant diesel conventionnel brûlé à la richesse $\phi = 1$, la température adiabatique de flamme passe de 2305 K à 2202 K soit une réduction de 103 K. Ainsi, les émissions de NO sont réduites de 73 % grâce à l'ajout de 0,716 kg de vapeur pour chaque kilogramme de carburant diesel conventionnel brûlé. La chaleur spécifique c_p passe de 2,353 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ à 2,190 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ soit une réduction de 0,163 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$. Le taux de formation de NO passe de 6,716 $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$ à 1,809 $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$ soit une réduction de 0,163 $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$.

Si 1,145 kg de vapeur est injectée pour chaque kilogramme de carburant diesel conventionnel brûlé à la richesse $\phi = 1$, la température adiabatique de flamme passe de 2305 K à 2143 K soit une réduction de 162 K. Ainsi, les émissions de NO sont réduites de 88 % grâce à l'ajout de 1,145 kg de vapeur pour chaque kilogramme de carburant diesel conventionnel brûlé. La chaleur spécifique c_p passe de 2,353 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ à 2,104 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ soit une réduction de 0,249 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$. Le taux de formation de NO passe de 6,716 $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$ à 0,8042 $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$ soit une réduction de 5,912 $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$.

La réduction de température ralentit le taux de destruction de N_2 conduisant ainsi à la réduction de taux de formation de NO. La température entraîne la réduction des émissions de NO.

Lorsque 0,533 kg de vapeur est injectée pour chaque kilogramme de carburant biodiesel brûlé à la richesse $\phi = 1$, la température adiabatique de flamme passe de 2247 K à 2148 K soit une réduction de 99 K. Ainsi, les émissions de NO sont réduites de 73,5 % grâce à l'ajout de 0,533 kg de vapeur pour chaque kilogramme de carburant biodiesel brûlé. La chaleur spécifique c_p passe de 2,258 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ à 2,107 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ soit une réduction de 0,151 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$. Le taux de formation de NO passe de 3,258 $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$ à 0,8629 $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$ soit une réduction de 2,395 $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$.

Si 0,852 kg de vapeur est injectée pour chaque kilogramme de carburant biodiesel brûlé à la richesse $\phi = 1$, la température adiabatique de flamme passe de 2247 K à 2092 K soit une réduction de 155 K. Ainsi, les émissions de NO sont réduites de 88,2 % grâce à l'ajout de 0,852 kg de vapeur pour chaque kilogramme de carburant biodiesel brûlé. La chaleur spécifique c_p passe de 2,258 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ à 2,031 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ soit une réduction de 0,227 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$. Le taux de formation de NO passe de 3,258 $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$ à 0,3843 $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$ soit une réduction de 2,874 $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$.

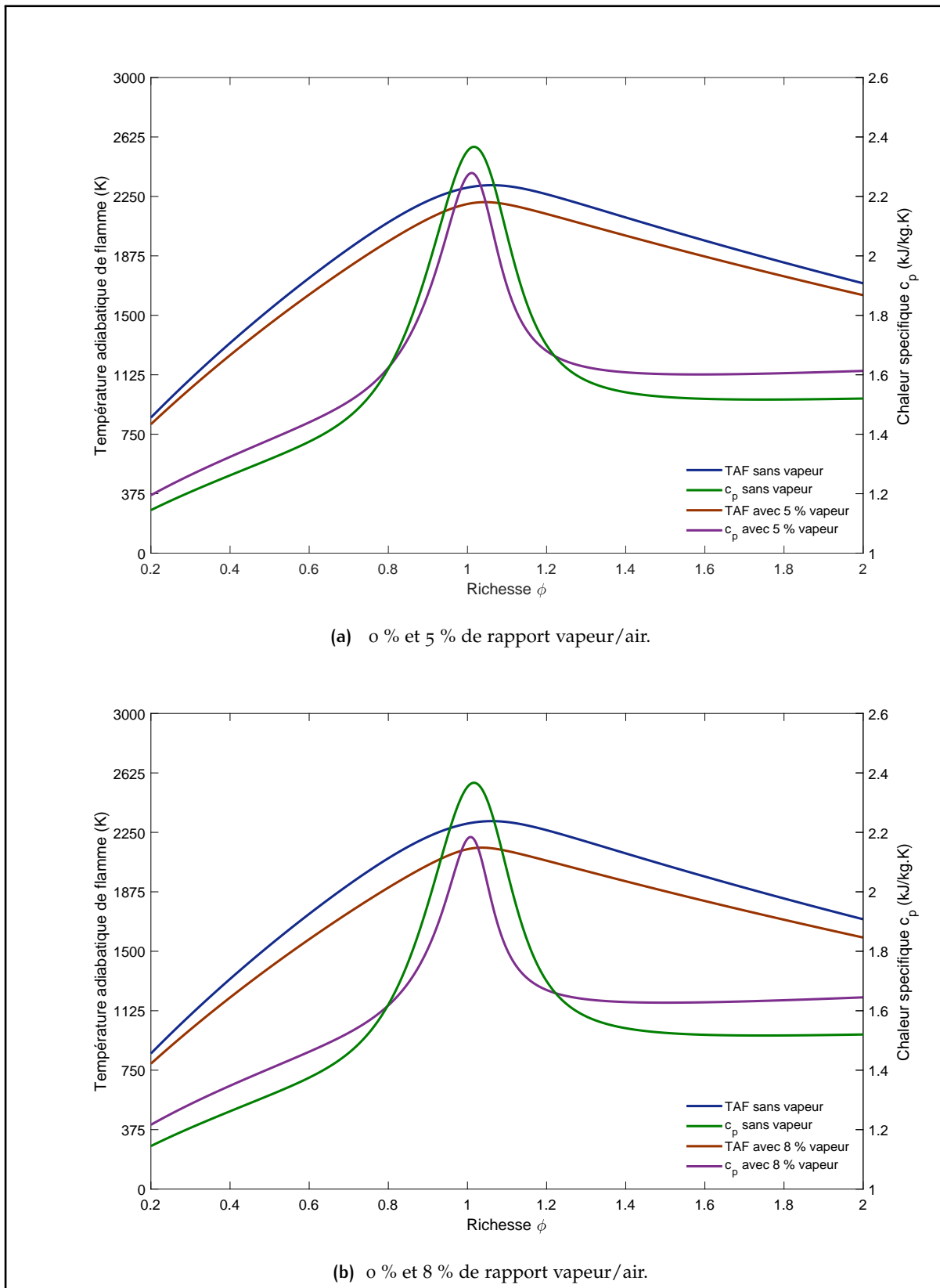


Figure 3.23: Variation de la température adiabatique de flamme et de la chaleur spécifique des produits de combustion du carburant diesel conventionnel avec la richesse.

La réduction de température ralentit le taux de destruction de N_2 conduisant ainsi à la réduction de taux de formation de NO. La température entraîne la réduction des émissions de NO.

Les températures adiabatiques de flamme pour le carburant diesel et pour le carburant biodiesel admis dans la chambre de combustion à la température initiale de 298 K et à la pression initiale de 1 bar sont présentées sur la Figure 3.24 en fonction de la richesse

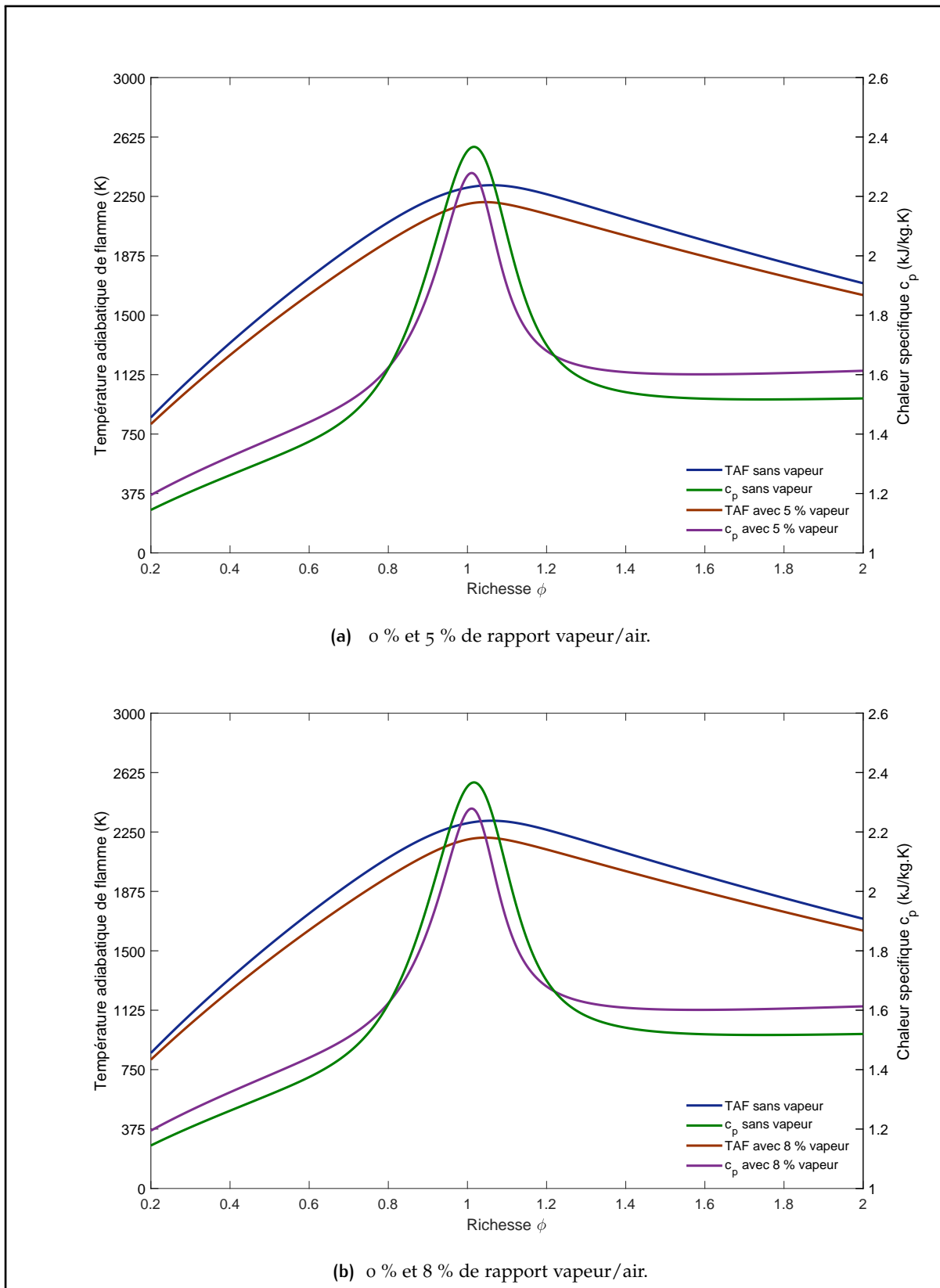


Figure 3.24: Variation de la température adiabatique de flamme et de la chaleur spécifique des produits de combustion du carburant biodiesel avec la richesse.

L'effet de la température sur l'enthalpie des produits de combustion pour différentes richesses est illustré sur la [Figure 3.25](#) pour la combustion des carburants diesel et biodiesel à la pression de 1 atm. L'enthalpie des produits de combustion augmente en fonction de la température et diminue lorsque la richesse du mélange augmente. La [Figure 3.26](#) illustre l'effet de la richesse sur l'enthalpie des produits de combustion à la température de 2000 K et à la pression de 9000 kPa pour différents rapports vapeur/air. La valeur la plus basse d'enthalpie se produit à la stœchiométrie, et que la richesse est rendu pauvre ou riche, en dessous de 2500 K, l'enthalpie augmente. L'enthalpie est minimale proche de la stœchiométrie, la combustion est incomplète. Si le mélange est pauvre, il y a de l'oxygène non brûlé en excès. Si le mélange est riche, il y aura du monoxyde de carbone non brûlé. Une valeur minimale d'enthalpie implique que la chaleur spécifique des produits de combustion est également minimale, ce qui maximisera la température adiabatique de flamme.

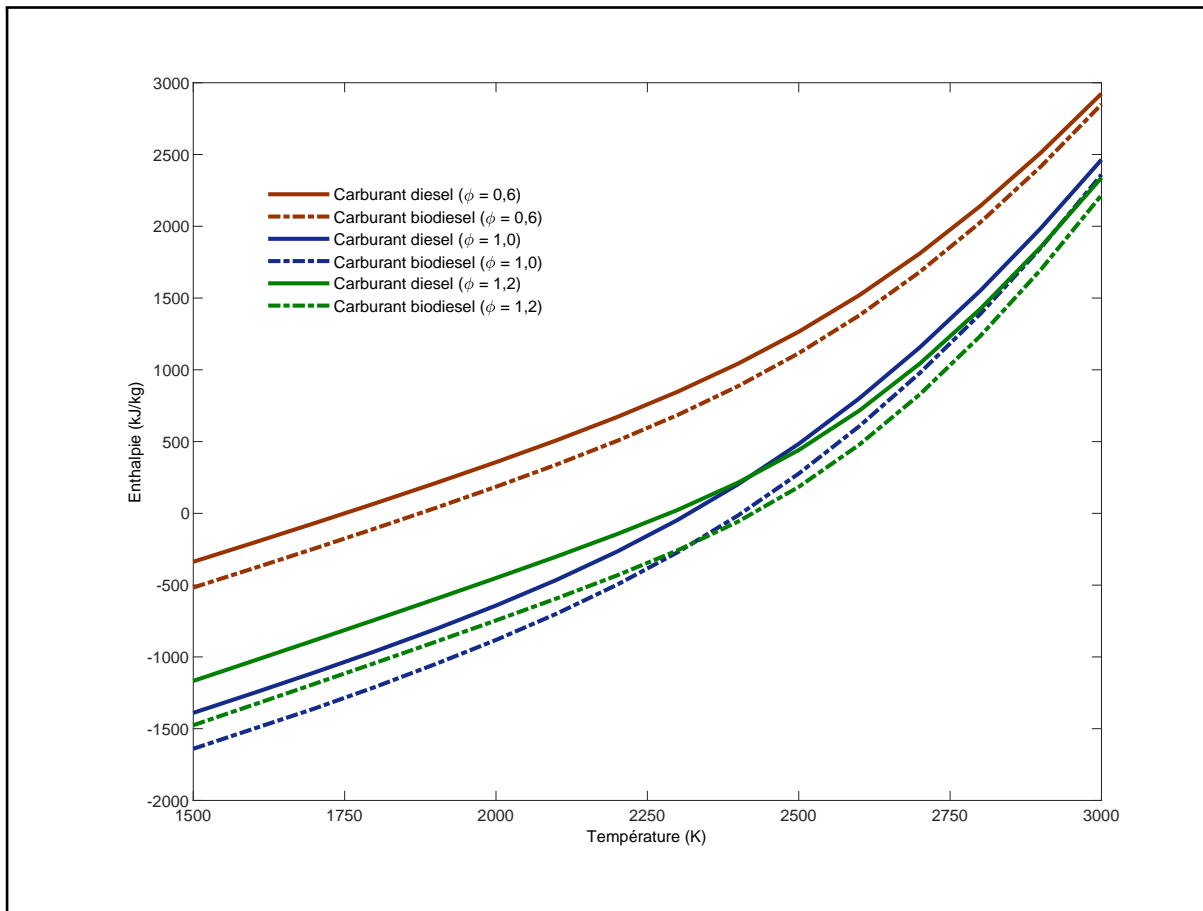


Figure 3.25: Variation de l'enthalpie en fonction de la température.

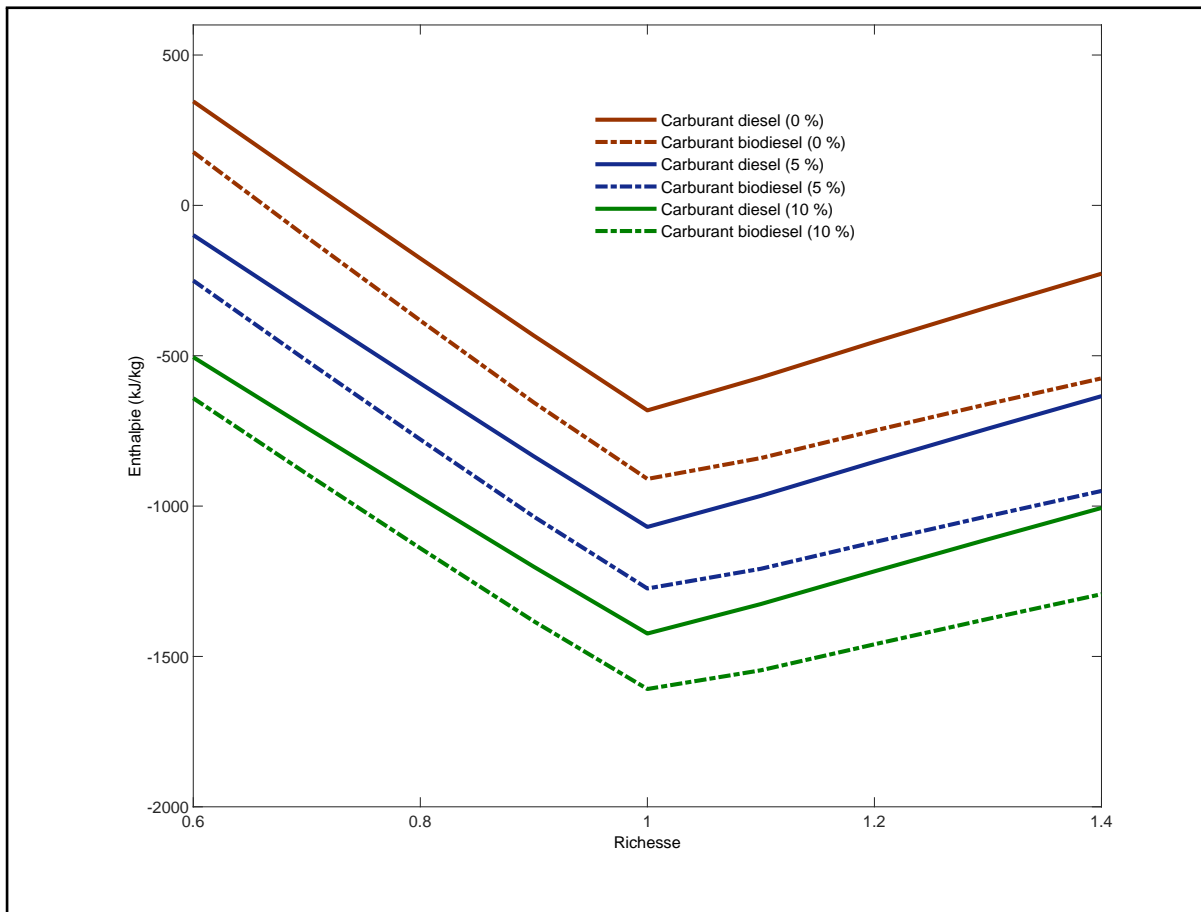


Figure 3.26: Variation de l'enthalpie en fonction de la richesse.

3.4.3 Effets d'injection de vapeur sur les propriétés thermodynamiques des produits de combustion

La chaleur spécifique et l'enthalpie du mélange des gaz augmentent en fonction de rapport vapeur/air en raison de la chaleur spécifique de la vapeur surchauffée qui est supérieure à celle de l'air à cette condition de température. L'enthalpie est l'énergie totale du système c'est-à-dire la somme de tous les types d'énergie qu'il contient à pression constante. L'injection de la vapeur augmente donc l'énergie totale du système.

Les Figures 3.27a et 3.27b montrent la variation des chaleurs spécifiques des produits de combustion en fonction de rapport vapeur/air. Les chaleurs spécifiques les plus élevées sont obtenues dans les cas de combustion riche par rapport aux cas de combustion pauvre. Les chaleurs spécifiques les plus élevées sont observées avec le carburant WCOBD et les chaleurs spécifiques les plus basses sont obtenues avec le carburant diesel conventionnel. Dans les deux cas de combustion, les chaleurs spécifiques augmentent avec l'augmentation de rapport vapeur/air car la chaleur spécifique de la vapeur est bien supérieure à celle des produits de combustion à la même température sauf la chaleur spécifique du CO_2 .

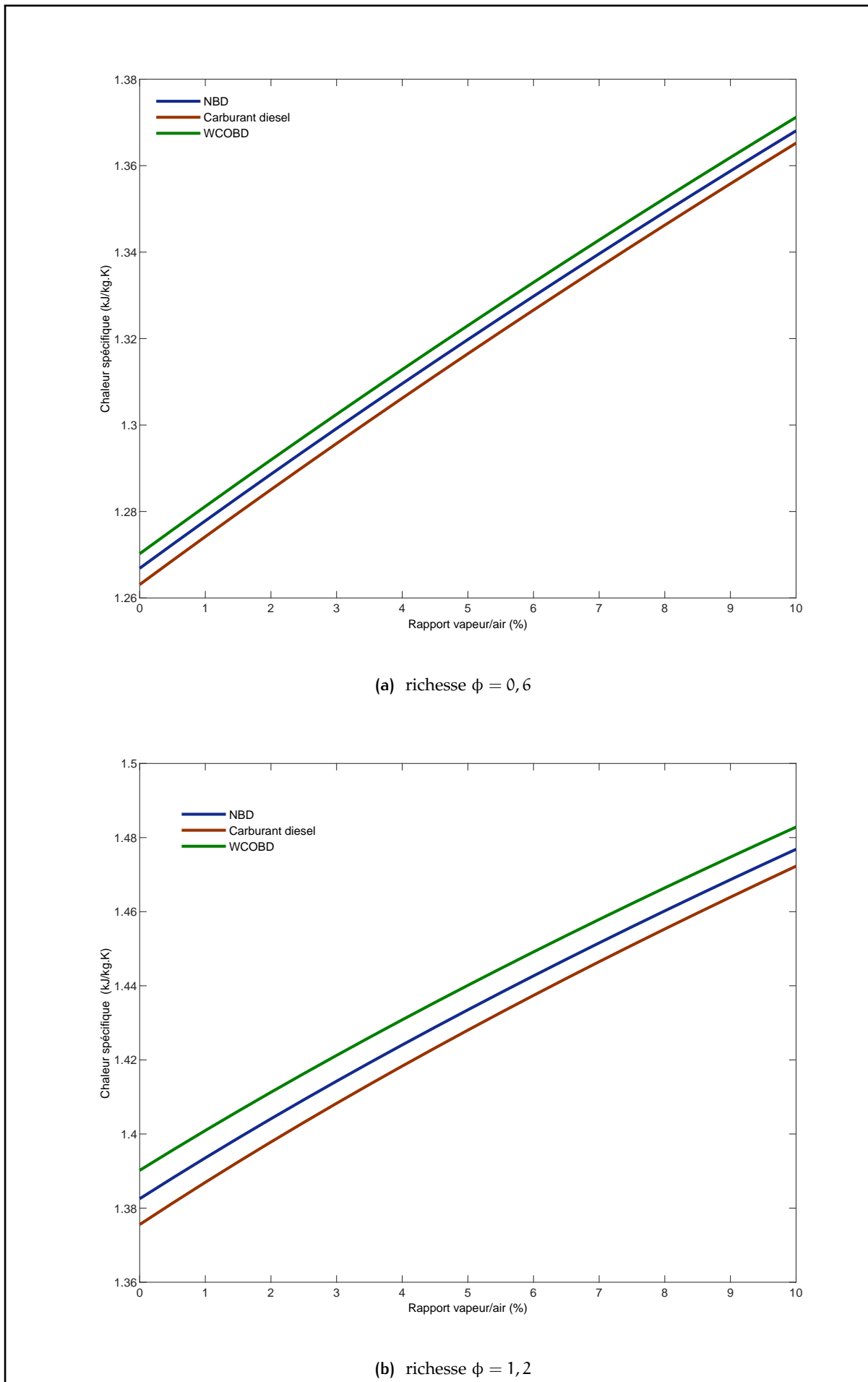


Figure 3.27: Variation de la chaleur spécifique des produits de combustion avec le rapport vapeur/air.

Les Figures 3.28 et 3.29 montrent la variation d'enthalpie des produits de combustion en fonction de rapport vapeur/air. Les enthalpies les plus élevées des produits de combustion sont obtenues dans les cas de combustion pauvre par rapport aux cas de combustion riche. Les enthalpies les plus élevées des produits de combustion sont observées avec le carburant diesel conventionnel et les enthalpies les plus faibles des produits de combustion sont obtenues avec le carburant WCOBD. Dans les deux cas de combustion, l'enthalpie des produits de combustion diminue avec l'augmentation de rapport vapeur/air en raison de l'enthalpie de la vapeur qui est bien inférieure à celles des produits de combustion à la même température.

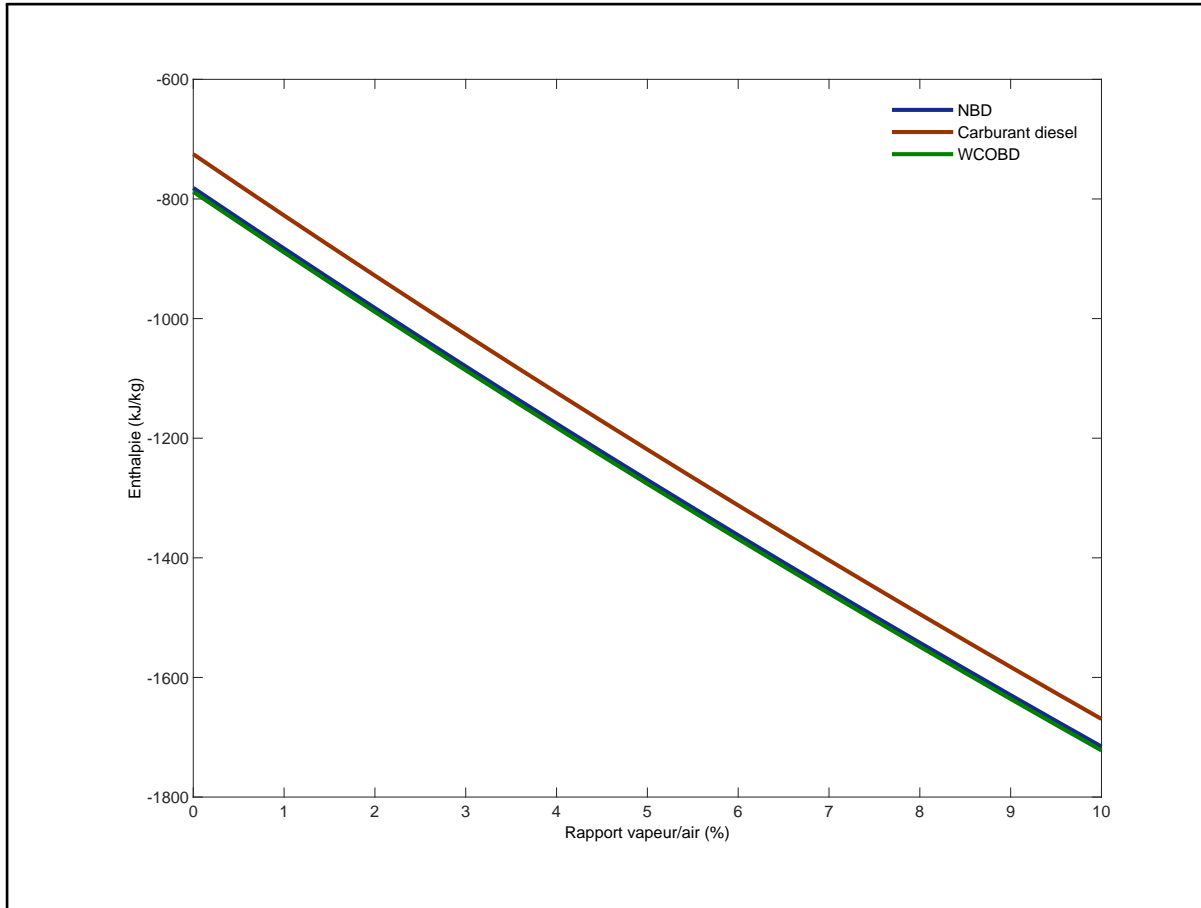


Figure 3.28: Variation de l'enthalpie des produits de combustion avec le rapport vapeur/air.

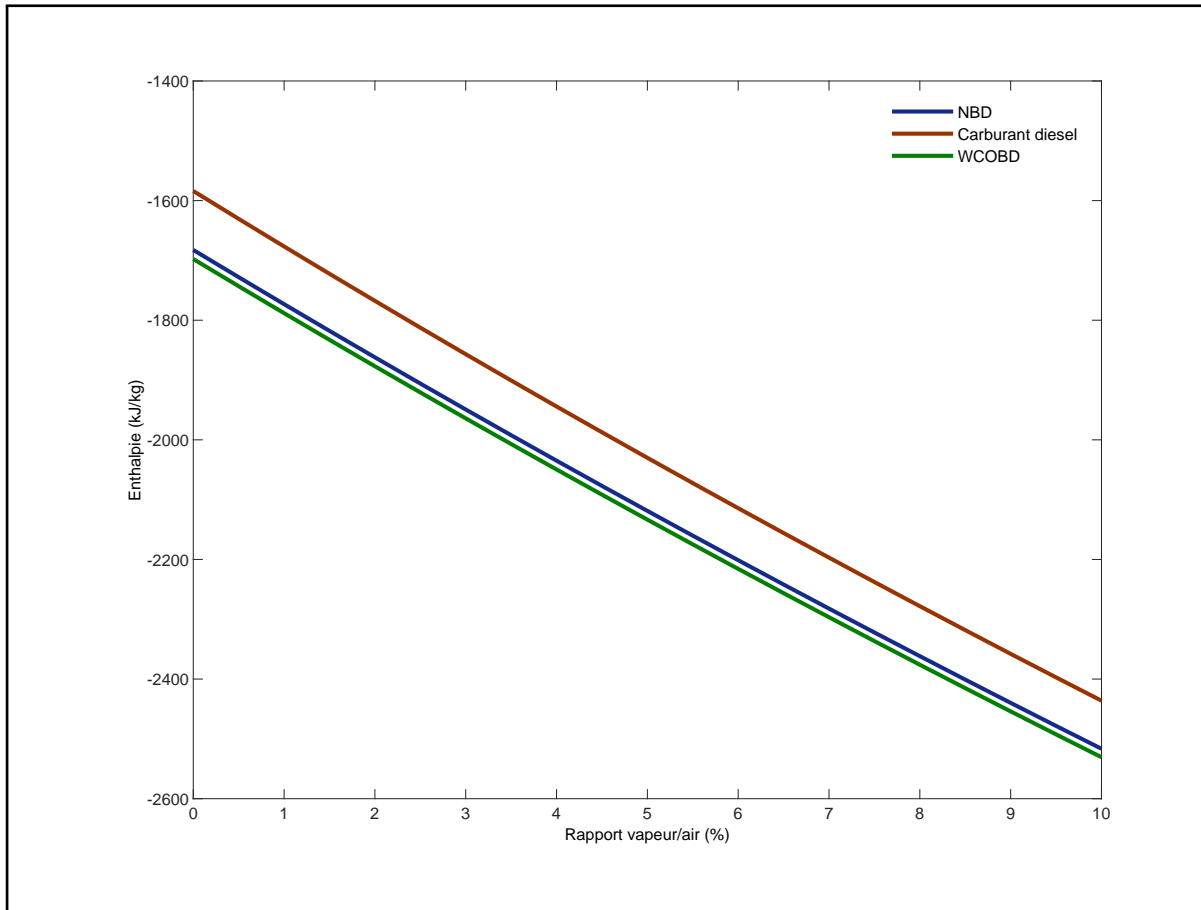


Figure 3.29: Variation de l'enthalpie des produits de combustion avec le rapport vapeur/air.

Les Figures 3.30 et 3.31 montrent la variation de l'entropie des produits de combustion en fonction de rapport vapeur/air. Les entropies les plus élevées des produits de combustion sont obtenues dans les cas de combustion riche par rapport aux cas de combustion pauvre. Les entropies les plus élevées des produits de combustion sont observées avec le carburant WCOBD et les entropies les plus faibles des produits de combustion sont obtenues avec le carburant diesel conventionnel. Dans les deux cas de combustion, l'entropie des produits de combustion augmente avec l'augmentation de rapport vapeur/air.

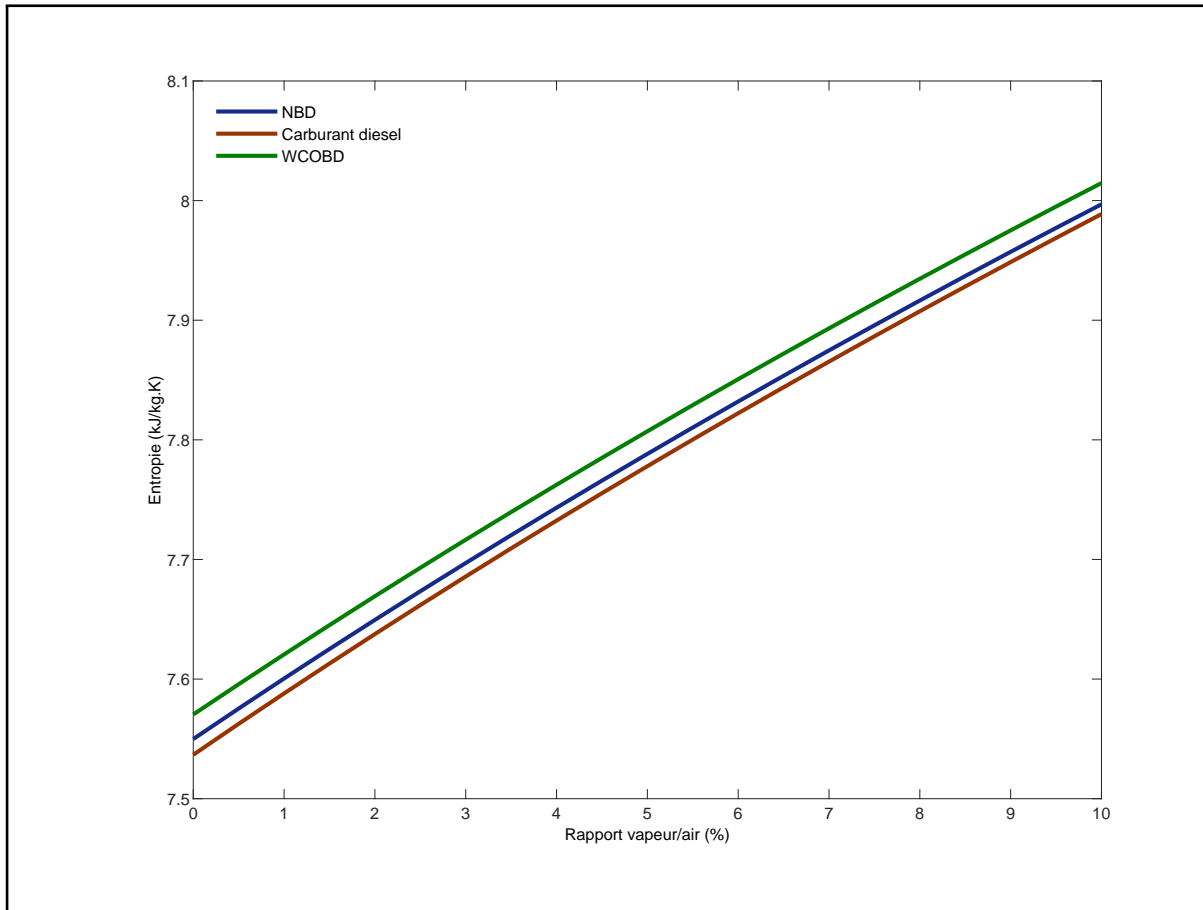


Figure 3.30: Variation de l'entropie des produits de combustion avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 0,6$.

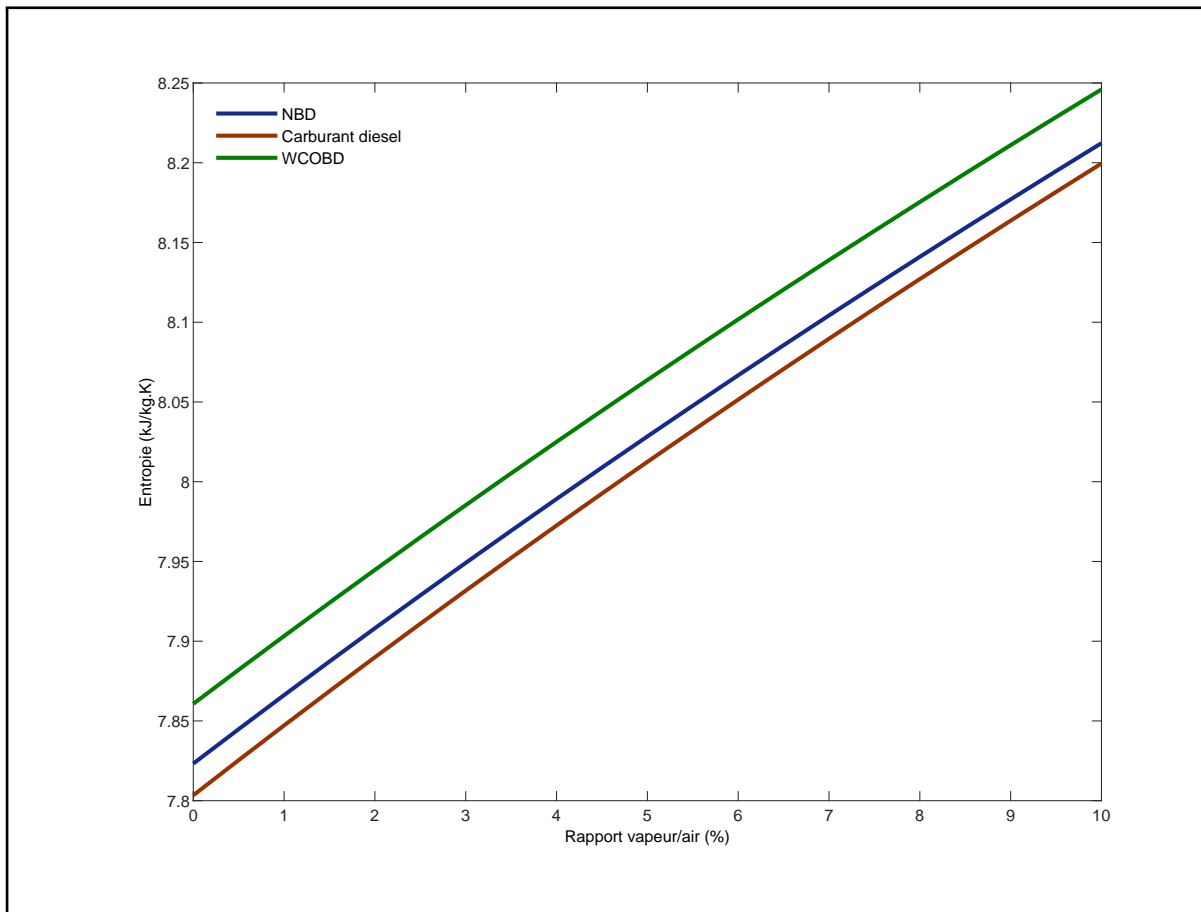


Figure 3.31: Variation de l'entropie des produits de combustion avec le rapport vapeur/air pour la richesse $\phi = 1, 2$.

3.4.4 Vitesse de dégagement de chaleur

On se place dans l'hypothèse selon laquelle la chambre de combustion contient un mélange homogène de gaz parfaits ayant atteint l'équilibre thermodynamique. Pendant la période où les soupapes sont fermées, la vitesse de dégagement de chaleur nette est égale au flux d'énergie libéré par la combustion du carburant ou la vitesse de dégagement de chaleur brute auquel les pertes thermiques sont retranchées.

Les Figures 3.32a et 3.32b montre la vitesse de dégagement de chaleur à 100 % de la charge en fonction de l'angle de vilebrequin pour le carburant biodiesel et pour le carburant diesel conventionnel. Il existe certaines différences entre les courbes de vitesse de dégagement de chaleur. La combustion démarre plus tôt avec le carburant biodiesel par rapport au carburant diesel conventionnel probablement grâce à un nombre de cétane plus élevé pour le carburant biodiesel et à une température de distillation plus basse, un mélange plus rapide et une meilleure vaporisation du carburant biodiesel qui se traduisent par un délai d'auto-inflammation plus court. La vitesse de dégagement de chaleur plus élevée du carburant diesel conventionnel dans la phase de combustion peut être due à son pouvoir calorifique qui est plus élevé. Pendant la phase d'expansion, la vitesse de dégagement de chaleur de carburant diesel conventionnel est légèrement plus élevée, ce qui est dû au délai d'auto-inflammation et à l'extension de l'étage de combustion par diffusion. La teneur en oxygène, la vaporisation et l'indice de cétane des carburants sont considérés comme ayant des impacts sur la fraction de masse de carburant brûlé. Un indice de

cétane plus élevé correspond normalement à un délai d'auto-inflammation court ce qui réduira le temps de prémélange et déplacera la phase de combustion plus tôt vers la phase de compression.

La [Figure 3.32b](#) montre la vitesse de dégagement de chaleur nette à 100 % de la charge par rapport à l'angle de vilebrequin pour le carburant biodiesel et pour le carburant diesel conventionnel. Cette figure montre que la valeur de la vitesse de dégagement de chaleur nette de carburant diesel conventionnel a un pic légèrement plus élevé que celui de carburant biodiesel conventionnel à cause son faible pouvoir calorifique par rapport à celui du carburant biodiesel. Ce comportement de vitesse de dégagement de chaleur nette du carburant biodiesel peut être expliqué par la teneur en oxygène et le début plus précoce de la combustion. La teneur élevée en oxygène conduit à une combustion complète et à une meilleure vaporisation. La combustion complète, la meilleure vaporisation et le nombre de cétane élevé des combustibles sont responsables du début précoce de la combustion.

La combustion de prémélange se produit dans les premiers moments du processus de combustion, où le carburant est vaporisé et mélangé avec de l'air frais. La combustion démarre dans une zone du cylindre où le carburant injecté pendant le délai d'auto-inflammation a eu le temps de se mélanger avec l'air. Pendant cette phase, la vitesse de libération de l'énergie chimique est très importante et on observe un fort gradient de pression. Cette étape s'étale sur la brève période angulaire qui sépare l'auto-inflammation de l'instant où la pression atteint sa valeur maximale. Dès que le mélange homogène est totalement consommé, la vitesse de transformation des réactifs décroît en raison du temps nécessaire à l'apparition de zones propices à la propagation de la flamme (atomisation, vaporisation). Le régime de combustion se modifie, la flamme de prémélange laisse la place à une flamme de diffusion. La vitesse de libération d'énergie dépend alors de la diffusion entre les réactifs. La combustion est essentiellement gouvernée par la loi de débit de l'injecteur, et par les phénomènes aérodynamiques. On considère que la fermeture de l'injecteur marque la fin de cette étape. Une fois que le mélange est consommé, la combustion diffusive prend place et gouverne la majorité de la durée de la combustion.

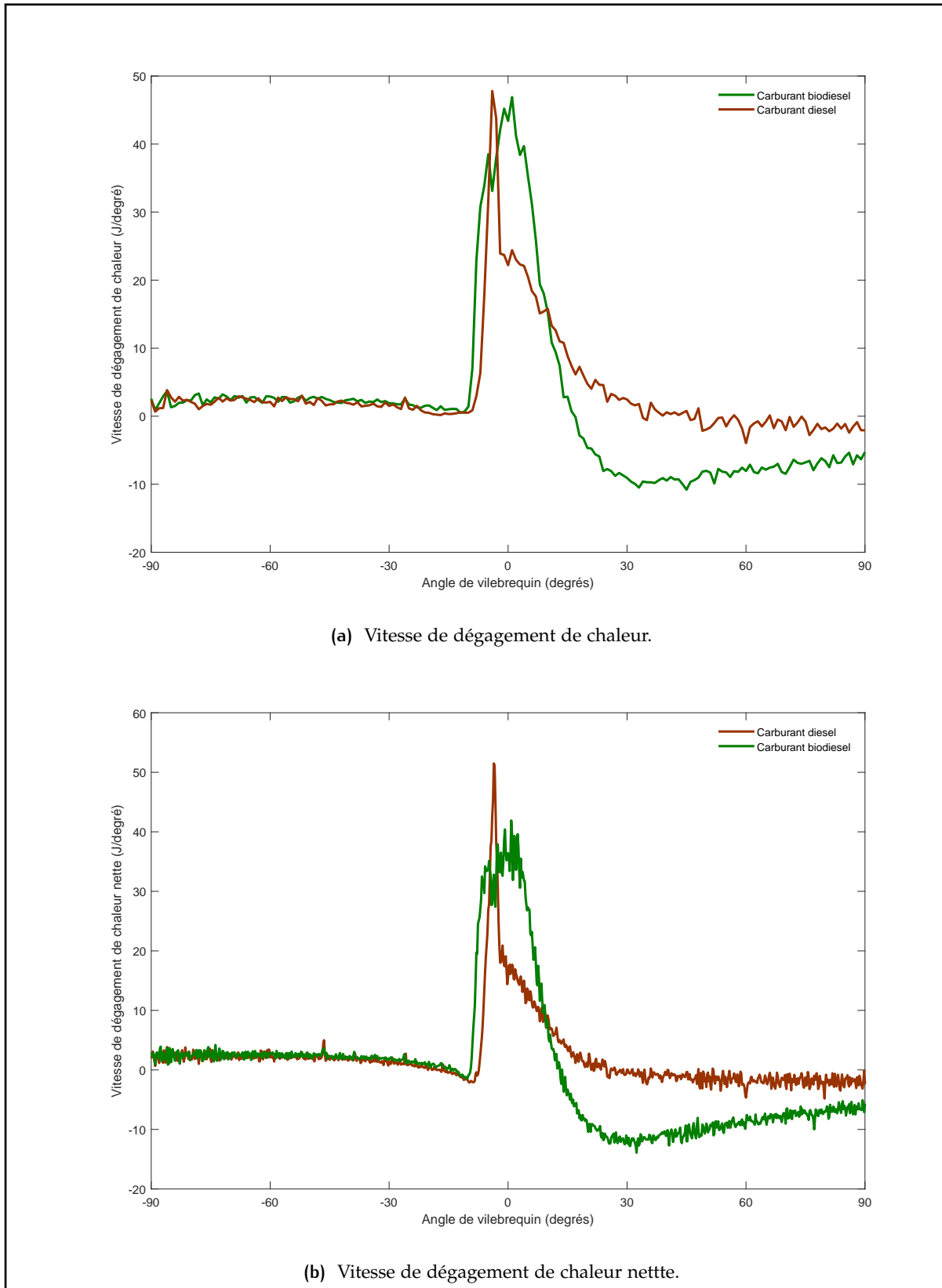


Figure 3.32: Vitesse de dégagement de chaleur.

Les courbes à pleine charge de dégagement de chaleur cumulé et de fraction de masse de carburant brûlé par rapport à l'angle de vilebrequin pour le carburant diesel conventionnel et pour le carburant biodiesel sont représentées sur les Figures 3.33a et 3.33b. Le dégagement de chaleur cumulé et le comportement de la fraction de masse de carburant brûlé dans le moteur indiquent de manière importante le processus de combustion. La teneur élevée en oxygène, la

meilleure vaporisation et le nombre de cétane élevé des carburants biodiesel ont des effets sur les modèles de dégagement de chaleur cumulé et de fraction massique de carburant brûlé. La courbe de dégagement de chaleur cumulé pour le carburant biodiesel montre que les valeurs sont légèrement supérieures à celles du carburant diesel conventionnel dans cette condition de charge élevée, comme le montre la [Figure 3.33a](#). On voit clairement que les valeurs de fraction de masse de carburant brûlé sont légèrement supérieures à celles du carburant diesel conventionnel sous cette condition de charge élevée comme le montre la [Figure 3.33b](#).

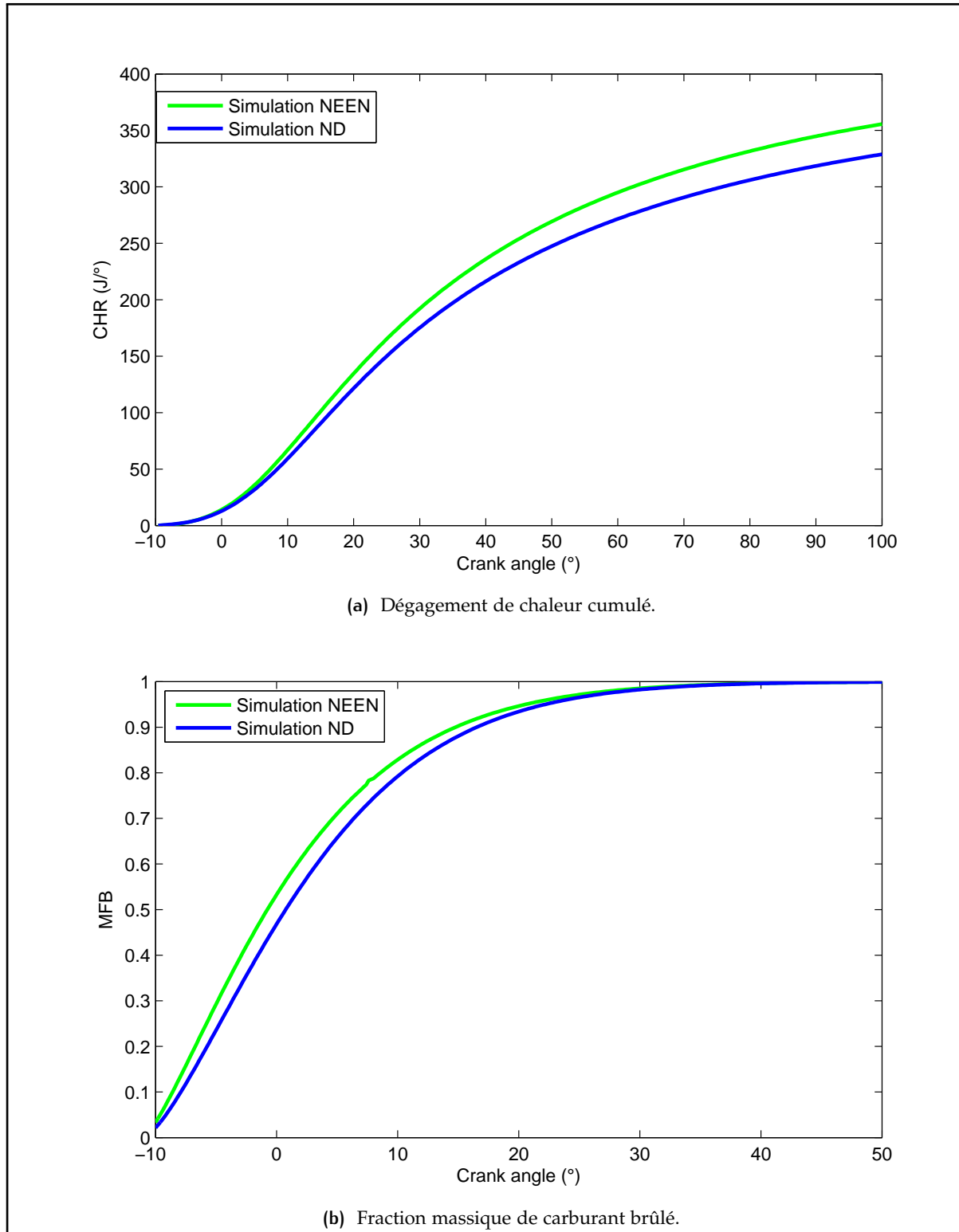


Figure 3.33: Dégagement de chaleur cumulé et fraction massique de carburant brûlé.

3.5 Caractéristiques de performance

3.5.1 Paramètres de performance

A pleine charge (4,5 kW), les valeurs des puissance effective P_{ef} sont trouvées, par simulation, à 4,43 kW et 4,52 kW pour le carburant biodiesel et pour le carburant diesel conventionnel respectivement. Le carburant biodiesel a un pouvoir calorifique inférieur à celui du carburant diesel conventionnel et produit donc un peu moins de puissance effective. Le faible pouvoir calorifique et la viscosité cinématique élevée sont responsables de la mauvaise atomisation des carburants biodiesel dans la chambre de combustion des moteurs à allumage par compression et tendent à réduire la puissance effective. Le carburant diesel conventionnel a la puissance effective la plus élevée, probablement à cause de sa viscosité cinématique plus faible que celle du carburant biodiesel. La viscosité cinématique et la masse volumique élevées du carburant biodiesel affectent l'atomisation de carburant ; il en résulte que le carburant biodiesel a une puissance effective inférieure à celle du carburant diesel conventionnel. La diminution moyenne respective du couple effectif et de puissance effective des moteurs à allumage par compression lorsque le carburant biodiesel est utilisé pour le régime de 1 500 trs/min est de 1,99 % et de 1,98 % en raison de la viscosité plus élevée et de la masse volumique plus élevée (12,39 %) par rapport à celles de carburant diesel conventionnel. On a remarqué qu'il n'y avait pas de différence significative de puissances effective entre le carburant biodiesel et le carburant diesel conventionnel. L'amélioration du couple effectif et de la puissance effective des moteurs à allumage par compression fonctionnant avec le carburant biodiesel par rapport à ceux de carburant diesel conventionnel peut être expliquée par la viscosité plus élevée du carburant biodiesel qui améliore la pénétration et la pulvérisation de carburant et améliore le mélange air-carburant. La consommation spécifique de carburant biodiesel (CSF) et celle du carburant diesel conventionnel sont respectivement 299,17 g/kWh et 240,15 g/kWh. On note la consommation spécifique de carburant diesel conventionnel est inférieure à celle du carburant biodiesel. Le pouvoir calorifique inférieur du carburant biodiesel est inférieur à celui du carburant diesel conventionnel et ce fait explique les résultats des consommations spécifiques de carburants mentionnées ci-dessus.

3.5.2 Température des gaz d'échappement

La Figure 3.5 montre l'évolution de la température à une charge de 100 % dans le cylindre en fonction de l'angle de vilebrequin pour le carburant biodiesel par rapport à celle du carburant diesel conventionnel. L'évolution de la température dans la chambre de combustion dépend du pourcentage d'oxygène du carburant, c'est pourquoi le carburant biodiesel avec une teneur plus élevée en oxygène que celle du carburant diesel conventionnel subit une combustion complète, conduisant à une température des gaz d'échappement plus élevée. Un indice de cétane plus élevé diminue le temps de prémélange. Les combustibles qui ne sont pas brûlés dans la première phase de combustion qui est la phase la plus importante continuent de brûler dans la phase de combustion tardive, indiquant la vitesse de dégagement de chaleur de carburant biodiesel plus élevée que celle de carburant diesel conventionnel. Cela est une autre raison pour laquelle le carburant biodiesel a une température des gaz d'échappement plus élevée que celle du carburant diesel conventionnel.

La Figure 3.34 montre l'historique température-temps du premier élément à brûler. Au moment où un élément brûle, sa concentration en monoxyde d'azote est proche de zéro en raison du gaz résiduel présent. Étant donné que la cinétique chimique n'est pas assez rapide pour supposer que le processus est quasi-statique, il est contrôlé en vitesse. Une fois l'élément brûlé, la concentration à l'équilibre chimique est élevée, alors que la concentration qui n'est pas à l'équilibre chimique est faible. Chaque élément essaie de s'équilibrer ; si la concentration à l'équilibre est supérieure à la concentration qui n'est pas en équilibre chimique, alors des monoxydes d'azote se forment, alors qu'ils se décomposent si la concentration à l'équilibre est inférieure à la concentration qui n'est pas en équilibre chimique.

Les vitesses de réaction chimique augmentent fortement avec la température. En conséquence, il existe de grandes différences entre les concentrations des monoxydes d'azote dans le premier et le dernier élément. De plus, on peut voir que lorsque les températures chutent à environ 2000 K, la vitesse de décomposition devient très lente et on peut dire que les monoxydes d'azote gèlent à une concentration supérieure aux valeurs de concentration à l'équilibre. La quantité totale de monoxydes d'azote qui apparaît à l'échappement est calculée en additionnant les fractions massiques gelées pour tous les éléments fluides.

La comparaison des valeurs de concentration en monoxyde d'azote calculées et expérimentales à l'échappement pour les deux carburants montre une coïncidence très satisfaisante. Les valeurs de concentration des monoxydes d'azote calculées et mesurées du carburant biodiesel sont respectivement 927,7 ppm et 954,4 ppm. Les valeurs de concentration des monoxydes d'azote calculées et expérimentales du carburant diesel sont respectivement 1 004,4 ppm et 1 019,4 ppm.

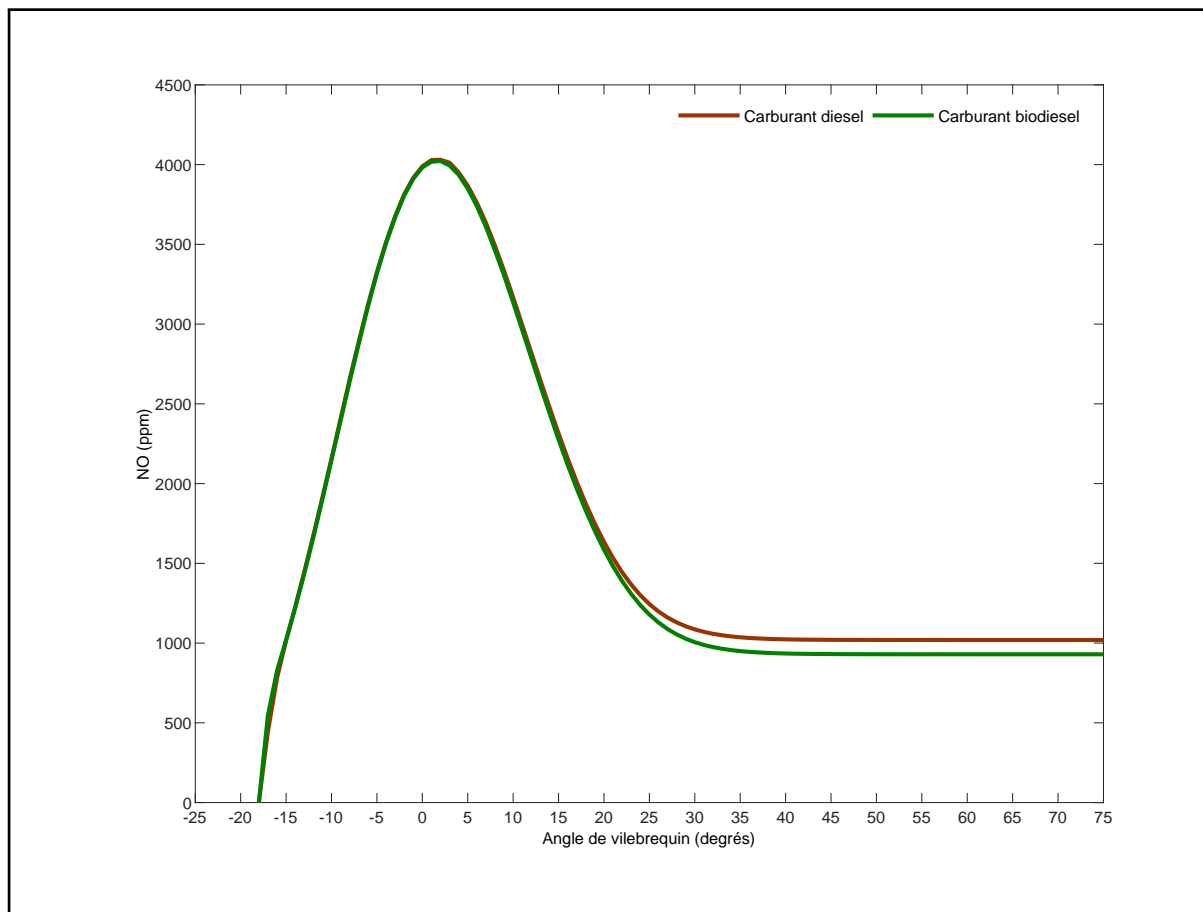


Figure 3.34: Évolution de la concentration en monoxyde d'azote en fonction de l'angle de vilebrequin.

3.6 Conclusion

La comparaison des valeurs de concentration en monoxyde d'azote calculées et expérimentales à l'échappement pour les deux carburants montre une coïncidence très satisfaisante. Les valeurs de concentration des monoxydes d'azote calculées et mesurées du carburant biodiesel sont respectivement 927,7 ppm et 954,4 ppm. Les valeurs de concentration des monoxydes d'azote calculées et expérimentales du carburant diesel sont respectivement 1 004,4 ppm et 1 019,4 ppm.

À pleine charge, les valeurs des puissance effective P_{ef} sont trouvées, par simulation, à 4,43 kW et 4,52 kW pour le carburant biodiesel et pour le carburant diesel conventionnel respectivement. Le carburant biodiesel a un pouvoir calorifique inférieur à celui du carburant diesel conventionnel et produit donc un peu moins de puissance effective. Le faible pouvoir calorifique et la viscosité cinématique élevée sont responsables de la mauvaise atomisation des carburants biodiesel dans la chambre de combustion des moteurs à allumage par compression et tendent à réduire la puissance effective. Le carburant diesel conventionnel a la puissance effective la plus élevée, probablement à cause de sa viscosité cinématique plus faible que celle du carburant biodiesel. La viscosité cinématique et la masse volumique plus élevées du carburant biodiesel affectent l'atomisation de carburant ; il en résulte que le carburant biodiesel a une puissance effective inférieure à celle du carburant diesel conventionnel. La diminution moyenne respective du couple effectif et de puissance effective des moteurs à allumage par compression lorsque le carburant biodiesel est utilisé pour le régime de 1 500 trs/mn est de 1,99 % et 1,98 % en raison de la viscosité plus élevée et de la masse volumique plus élevée (12,39 %) par rapport à celles du carburant diesel conventionnel. On a remarqué qu'il n'y avait pas de différence significative de puissances effective entre le carburant biodiesel et le carburant diesel conventionnel. L'amélioration du couple effectif et de la puissance effective des moteurs à allumage par compression fonctionnant avec le carburant biodiesel par rapport à ceux du carburant diesel conventionnel peut être expliquée par la viscosité cinématique plus élevée du carburant biodiesel qui améliore la pénétration et la pulvérisation de carburant et améliore le mélange air-carburant. La consommation spécifique de carburant biodiesel (CSF) et celle du carburant diesel conventionnel sont respectivement 299,17 g/kWh et 240,15 g/kWh. On note que la consommation spécifique de carburant diesel conventionnel est inférieure à celle du carburant biodiesel.

Le modèle de combustion à deux zones de Ferguson et Olikara utilisé est précis et bien adapté pour la prédiction des polluants à l'instar des monoxydes d'azote. Ces coïncidences très satisfaisantes observées renforcent la conviction que le modèle utilisé fonctionne correctement.

CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES

CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES

Conclusion générale

L'objectif est d'élaborer deux modèles thermodynamiques des moteurs à allumage par compression. Ces modèles thermodynamiques sont basés sur le premier principe de la thermodynamique et des relations semi-empiriques décrivant la vitesse de combustion du carburant injecté.

Du point de vue technique, le carburant biodiesel peut être produit à base de n'importe quelle huile végétale mais des considérations de prix, de rendement de cultures et de bilans économiques excluent un bon nombre d'huiles végétales comme l'huile d'olive caractérisée par un prix de revient exorbitant. Le choix était basé sur des considérations humaines et climatiques car les huiles de cuisson usagées ne peuvent en aucun cas concurrencer les denrées alimentaires destinées à la consommation humaine ou animale. L'utilisation de carburant biodiesel comme carburant diesel dans les moteurs à allumage par compression n'est pas une innovation mais ses propriétés physicochimiques font qu'il est délicat à utiliser.

Les propriétés physiques et chimiques de carburant biodiesel comme le pouvoir calorifique inférieur, l'indice de cétane et la masse volumique sont très proches de celles du carburant diesel conventionnel mais sa viscosité est supérieure à celle de ce dernier. La forte fraction d'acides gras insaturés fait que l'huile ne soit pas solide à la température ambiante et les faibles fractions, en terme d'acide gras saturé et polyinsaturé, tendent à donner un carburant biodiesel avec une bonne stabilité à l'oxydation.

Afin d'adapter l'huile végétale, la pyrolyse, les micro-émulsions et la transestérification peuvent être utilisés. La transestérification semblait être la plus adéquate puisqu'elle offre plus d'avantages que les autres techniques. Les esters obtenus avec la transestérification de l'huile présentent des propriétés physiques et chimiques intéressantes pour constituer un substitut du carburant diesel conventionnel.

Une fois les caractéristiques physiques et chimiques des carburants connues pour une utilisation sur les moteurs à allumage par compression, des simulations numériques ont été effectuées sur un moteur à allumage par compression monocylindre à quatre temps et à aspiration naturelle à vitesse constante sous une charge de 100 % de la puissance nominale en utilisant le carburant diesel conventionnel et le carburant biodiesel.

En ce qui concerne la simulation de la combustion, un modèle thermodynamique à deux zones a été mis en œuvre afin de prédire la pression, la température et les différentes performances énergétiques du moteur. Afin de reproduire la phénoménologie, plusieurs sous-modèles ont été pris en compte :

- Les transferts de chaleur pariétaux sont déterminés en utilisant la corrélation de Woschni et cette dernière a été sélectionnée grâce à son adéquation avec notre modèle ;

- L'écoulement à travers les soupapes lors des phases d'admission et d'échappement a été considéré en fonction de la section de passage ;
- Pour prédire les délais d'auto-inflammation des différents carburants, une corrélation de la forme de la loi Arrhenius a été proposée à partir des délais d'auto-inflammation expérimentaux.
- Pour bien décrire la combustion de prémélange et la combustion de diffusion, une corrélation de Wiebe en double fonction superposées a été utilisée ;
- Comme les gaz dans la chambre de combustion ont été supposés parfaits, leurs propriétés thermodynamiques, telles que la chaleur spécifique, l'enthalpie et l'énergie interne, ont été estimées suivant une régression polynomiale en fonction de la température ;

Le premier modèle thermodynamique utilisé est le modèle à une zone de Krieger et Borman qui est basé sur le premier principe de la thermodynamique, de la conservation de masse et la loi des gaz parfaits. Ce modèle calcule les variations de l'énergie interne massique dans la chambre de combustion en utilisant des coefficients correctifs qui correspondent à la variation de température par rapport à une température de référence. Le rapport de chaleur spécifique est déterminé en fonction de la température à l'aide de polynômes lissés à partir des données expérimentales tabulées. Dans le cadre de ce travail la composition, la température et la pression des gaz sont identiques en tout point de la chambre de combustion.

Le second modèle est le modèle de combustion à deux zones de Ferguson et Olikara. Ce modèle divise la chambre de combustion en deux zones constituées d'une zone des gaz brûlés et d'une autre zone des gaz imbrûlés. Les propriétés thermodynamiques des gaz de combustion se calculent en utilisant les hypothèses d'équilibre chimique lors des réactions chimiques qui ont lieu au cours de la combustion.

Ces modèles se subdivisent en sous-modèles zéro dimensionnels couplés les uns aux autres qui chacun modélise un des phénomènes ayant cours à chaque cycle. Les principaux sous-modèles sont l'injection et la pulvérisation, l'évaporation, le délai d'auto-inflammation et les sous-modèles d'émissions.

Perspectives

- faire les tests de combustion de carburant biodiesel sur le banc moteur ;
- utiliser un moteur à allumage par compression disposant des systèmes de réglage de l'avance à l'injection et de suralimentation pour contrôler les émissions de NO_x ;
- simuler la combustion de carburant biodiesel dans les moteurs à allumage par compression en utilisant la mécanique des fluides numérique (CFD) ;
- modéliser l'équilibre chimique des produits de combustion pour trouver des molécules modèles des carburants biodiesel (surrogates).

BIBLIOGRAPHIE

BIBLIOGRAPHIE

- [1] Yusuf NNAN, Kamarudin SK, Yaakub Z. Overview on the current trends in biodiesel production. *Energy Convers. Manag.* 2011 ; 52(7):2741–51. (Cité à page 7.)
- [2] Ambat I, Srivastava V, Sillanpaa M. Recent advancement in biodiesel production methodologies using various feedstock : a review. *Renew. Sust. Energ. Rev.* 2018 ; (90):356–69. (Cité à page 7.)
- [3] Rajalingam A, Jani SP, Kumar AS, Khan MA. Production methods of biodiesel. *J Chem Pharm Res* 2016 ; 8(3):170–3. (Cité à page 7.)
- [4] Ma F, Hanna MA. Biodiesel production : a review. *Bioresour Technol* 1999 ; 70(1) :1–15. (Cité à page 7.)
- [5] Fukuda H, Kondo A, Noda H. Biodiesel fuel production by transesterification of oils. *J Biosci Bioeng.* 2001 ; 92(5):405–16. (Cité à page 7.)
- [6] Srivastava A, Prasad R. Triglycerides-based diesel fuels. *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 2000 ; 4:111–33. (Cité aux pages 7 et 10.)
- [7] Pinto AC, Guarieiro LL, Rezende MJ, Ribeiro NM, Torres EA, Lopes WA, Pereira PAP, Andrade JB. Biodiesel : an overview. *J Braz Chem Soc* 2005 ; 16(6B) : 1313–30. (Cité à page 7.)
- [8] Manzano-Agugliaro F, Sanchez-Muros MJ, Barroso FG, Martínez-S anchez A, Rojo S, Perez-Banon C. Insects for biodiesel production. *Renew. Sust. Energ. Rev.* 2012 ; 16(6):3744–53. (Cité à page 7.)
- [9] Kojima Y, Takai S. Transesterification of vegetable oil with methanol using solid base catalyst of calcium oxide under ultrasonication. *Chem Eng Process Process Intensification* 2019 ; 136:101–6. (Cité à page 7.)
- [10] E. Ozturk. Performance, emissions, combustion and injection characteristics of a diesel engine fuelled with canola oilhazelnut soapstock biodiesel mixture. *Fuel Process. Technol.*, 129:183–191, 2015. (Cité à page 7.)
- [11] H. Oguz, H. Duzcukluoglu, and S. Ekinci. The investigation of lubrication properties performance of euro-diesel and biodiesel. *Tribol. Trans.*, 54:449–456, 2011. (Cité aux pages 7 et 11.)
- [12] A.E. Atabani, T.M.I. Mahlia, H.H. Masjuki, I. Anjum Badruddin, H.W. Yussof, W.T. Chong, and K.T. Lee. A comparative evaluation of physical and chemical properties of biodiesel synthesized from edible and non-edible oils and study on the effect of biodiesel blending. *Energy*, 58:296–304, 2013. (Cité aux pages 7 et 11.)
- [13] Yan S, Kim M, Salley SO, Ng K. Oil transesterification over calcium oxides modified with lanthanum. *Appl Catal, A : Gen* 2009 ; 360:163–70. (Cité à page 7.)

- [14] Nouredini H, Zhu D. Kinetics of transesterification of soybean oil. *J Am Oil Chem Soc* 1997 ; 74:1457–63. (Cit      page 7.)
- [15] Stephenson A, Dennis J, Scott S. Improving the sustainability of the production of biodiesel from oilseed rape in the UK. *Process Saf Environ Prot* 2008 ; 86:427–40. (Cit      page 7.)
- [16] Utlu Z, Ko  ak MS. The effect of biodiesel fuel obtained from waste frying oil on direct injection diesel engine performance and exhaust emissions. *Renewable Energy* 2008 ; 33 : 1936–41. (Cit   aux pages 7 et 13.)
- [17] Diya  ddeen BH, Abdul Aziz A, Daud W, Chakrabarti M. Performance evaluation of biodiesel from used domestic waste oils : a review. *Process Saf Environ Prot* 2012 ; 90:164–79. (Cit      page 7.)
- [18] A.E. Atabani, A.S. Silitonga, H.C. Ong, T.M.I. Mahlia, H.H. Masjuki, I.A. Badruddin, and H. Fayaz. Non-edible vegetable oils : a critical evaluation of oil extraction, fatty acid compositions, biodiesel production, characteristics, engine performance and emissions production. *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 18:211–245, 2013. (Cit      page 7.)
- [19] W.N.M.V. Ghazali, R. Mamat, H.H. Masjuki, and G. Najafi. Effects of biodiesel from different feedstocks on engine performance and emissions : a review. *Renew. Sustain. Energy Rev.*, 51:585–602, 2015. (Cit   aux pages 7 et 13.)
- [20] M.A. Kalam, H.H. Masjuki, M.M.K. Bhuiya, and M. Mofijur. An experimental investigation into biodiesel stability by means of oxidation and property determination. *Energy*, 44(1) : 616–622, 2012. (Cit   aux pages 7 et 13.)
- [21] Abdullah B, Syed Muhammad SAF, Shokravi Z, Ismail S, Kassim KA, Mahmood AN, et al. Fourth generation biofuel : a review on risks and mitigation strategies. *Renew Sustain Energy Rev*, 2019;107 :37–50. (Cit      page 8.)
- [22] Anto S, Mukherjee SS, Muthappa R, Mathimani T, Deviram G, Kumar SS, et al. Algae as green energy reserve : technological outlook on biofuel production. *Chemosphere* 2020 ;242 :125079. (Cit      page 8.)
- [23] Saini R, Hegde K, Brar SK, Vezina P. Advanced biofuel production and road to commercialization : An insight into bioconversion potential of *Rhodospiridium* sp. *Biomass Bioenergy*, 2020 ;132 :105439. (Cit      page 8.)
- [24] G  l  m M and Bilgin A. Density, flash point and heating value variations of corn oil biodiesel-diesel fuel blends. *Fuel Process Technol*, 134:456–64, 2015. (Cit      page 10.)
- [25] Rocabruno-Valdes CI, Ramirez-Verduzco LF, and Hernandez JA. Artificial neural network models to predict density, dynamic viscosity, and cetane number of biodiesel. *Fuel*, 147:9–17, 2015. (Cit      page 10.)
- [26] Giakoumis EG and Sarakatsanis CK. Estimation of biodiesel cetane number, density, kinematic viscosity and heating values from its fatty acid weight composition. *Fuel*, 222:574–85, 2018. (Cit      page 10.)
- [27] Ozcanli M, Gungor C, and Aydin K. Biodiesel fuel specifications : a review. *Energy Sources, Part A* 35(7):635–47, 2013. (Cit      page 11.)
- [28] Van Gerpen J. Biodiesel processing and production. *Fuel Process Technol.*, 86 : 1097–107, 2005. (Cit      page 11.)
- [29] Ors I. Performance, combustion and emission analysis of a diesel engine using biofuel. PhD thesis. Konya, Turkey : Selcuk University, 2014. (Cit      page 11.)

- [30] Benjumea P, Agudelo J, and Agudelo A. Basic properties of palm oil biodiesel-diesel blends. *Fuel*, 87:2069–75, 2008. (Cité à page 11.)
- [31] Cheikh K, Sary A, Khaled L, Abdelkrim L, and Mohand T. Experimental assessment of performance and emissions maps for biodiesel fueled compression ignition engine. *Appl Energy*, 161:320–9, 2016. (Cité à page 11.)
- [32] Attia AMA and Hassaneen AE. Influence of diesel fuel blended with biodiesel produced from waste cooking oil on diesel engine performance. *Fuel*, 167:316–28, 2016. (Cité à page 11.)
- [33] Atabani AE, Silitonga AS, Ong HC, Mahlia TMI, Masjuki HH, Badruddin IA, and Fayaz H. Non-edible vegetable oils : a critical evaluation of oil extraction, fatty acid compositions, biodiesel production, characteristics, engine performance and emissions production. *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 18:211–45, 2013. (Cité à page 11.)
- [34] Habibullah M, Masjuki HH, Kalam MA, Rahman SA, Mofijur M, Mobarak HM, and Ashraf AM. Potential of biodiesel as a renewable energy source in Bangladesh. *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 50:819–34, 2015. (Cité à page 11.)
- [35] Altun S and Gur MA. Use of vegetable oils as alternative fuel in diesel engines. Faculty of Harran University J Agric, 9:35–42, 2005. (Cité à page 11.)
- [36] Dabi M and Saha UK. Application potential of vegetable oils as alternative to diesel fuels in compression ignition engines : a review. *Journal of the Energy Institute*, 2019. (Cité à page 11.)
- [37] Capuano D, Costa M, Di Fraia S, Massarotti N, and Vanoli L. Direct use of waste vegetable oil in internal combustion engines. *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 69 : 759–70, 2017. (Cité à page 11.)
- [38] Ramadhas AS, Jayaraj S, and Muraleedharan C. Biodiesel production from high ffa rubber seed oil. *Fuel*, 84(4):335–40, 2005. (Cité à page 11.)
- [39] Tesfa B, Mishra R, Gu F, and Powles N. Prediction models for density and viscosity of biodiesel and their effects on fuel supply system in CI engines. *Renew Energy*, 35:2752–60, 2010. (Cité à page 11.)
- [40] Arbab MI, Masjuki HH, Varman M, Kalam MA, Imtenan S, and Sajjad H. Fuel properties, engine performance and emission characteristic of common biodiesels as a renewable and sustainable source of fuel. *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 22:133–47, 2015. (Cité à page 13.)
- [41] Xue J, Grift TE, and Hansaen AC. Effect of biodiesel on engine performances and emissions. *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 15:1098–116, 2015. (Cité à page 13.)
- [42] Monyem A, Van Gerpen JH, and Canakci M. The effect of timing and oxidation on emissions from biodiesel-fueled engines. *Trans ASAE*, 44:35–42, 2001. (Cité à page 13.)
- [43] Oner C and Altun S. Biodiesel production from inedible animal tallow and an experimental investigation of its use as alternative fuel in a direct injection diesel engine. *Appl Energy*, 86:2114–20, 2009. (Cité à page 13.)
- [44] Lin BF, Huang JH, and Huang DY. Experimental study of the effects of vegetable oil methyl ester on diesel engine performance characteristics and pollutant emissions. *Fuel*, 88:1779–85, 2009. (Cité à page 13.)
- [45] Aydin H and Bayindir H. Performance and emission analysis of cottonseed oil methyl ester in a diesel engine. *Renew Energy*, 35:588–92, 2010. (Cité à page 13.)

- [46] Al-Hamamre Z and Al-Salaymeh A. Physical properties of (jojoba oil + biodiesel), (jojoba oil + diesel) and (biodiesel + diesel) blends. *Fuel*, 123:175–88, 2014. (Cité à page 13.)
- [47] Arbab MI, Masjuki HH, Varman M, Kalam MA, Imtenan S, and Sajjad H. Fuel properties, engine performance and emission characteristic of common biodiesels as a renewable and sustainable source of fuel. *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 22:133–47, 2013. (Cité à page 13.)
- [48] Atadashi IM, Aroua MK, Abdul Aziz AR, and Sulaiman NMN. Production of biodiesel using high free fatty acid feedstocks. *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 16:3275–85, 2012. (Cité à page 13.)
- [49] Dwivedi G and Sharma MP. Prospects of biodiesel from pongamia in India. *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 32:114–22, 2014. (Cité à page 13.)
- [50] Jain S and Sharma MP. Prospects of biodiesel from jatropha in india : a review. *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 14:763–71, 2010. (Cité à page 13.)
- [51] Aksoy L. Biodiesel as a alternative energy source and its production process. *Electron J Veh Technol*, 2(3):45–52, 2010. (Cité à page 14.)
- [52] Sanchez M, Bergamin F, Pena E, Martínez M, and Aracil J. A comparative study of the production of esters from jatropha oil using different short-chain alcohols : optimization and characterization. *Fuel*, 143:183–8, 2015. (Cité à page 14.)
- [53] Kumar BR and Saravanan S. Use of higher alcohol biofuels in diesel engines : a review. *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 60:84–115, 2016. (Cité à page 14.)
- [54] Banapurmath NR, Tewari PG, Hosmath RS. Performance and emission characteristics of a DI compression ignition engine operated on Honge, Jatropha and sesame oil methyl esters. *Renew Energy* 2008 ; 33(9):1982–8. (Cité à page 14.)
- [55] Rao PV. Effect of properties of Karanja methyl ester on combustion and NO_x emissions of a diesel engine. *J Petrol Technol Altern Fuels* 2011 ; 2(5):63–75. (Cité à page 14.)
- [56] Jindal S. Experimental investigation of the effect of compression ratio and injection pressure in a direct injection diesel engine running on Karanj methyl ester. *Int J Sustain Energy* 2011 ; 30:91–105. (Cité à page 14.)
- [57] Selvan T, Nagarajan G. Combustion and emission characteristics of a diesel engine fueled with biodiesel having varying saturated fatty acid composition. *Int J Green Energy* 2013 ; 10:952–65. (Cité à page 14.)
- [58] Kwanchareon P, Luengnaruemitchai A, Jai-In S. Solubility of a diesel–biodiesel–ethanol blend, its fuel properties, and its emission characteristics from diesel engine. *Fuel* 2007 ; 86(7):1053–61. (Cité à page 14.)
- [59] Yadav PKS, Singh O, Singh RP. Performance test of palm fatty acid biodiesel on compression ignition engine. *J Petrol Technol Altern Fuels* 2010 ; 1(1):1–9. (Cité à page 14.)
- [60] Nehdi IA, Sbihi HM, Al-Resayes SI. Rhazya stricta Decne seed oil as an alternative, non-conventional feedstock for biodiesel production. *Energy Convers. Manag.* 2014 ; 81 :400–6. (Cité à page 14.)
- [61] Ozener O, Yüksek L, Ergenç AT, Ozkan M. Effects of soybean biodiesel on a DI diesel engine performance, emission and combustion characteristics. *Fuel* 2014 ; (Cité à page 14.)
- [62] Qi DH, Lee CF. Influence of soybean biodiesel content on basic properties of biodiesel-diesel blends. *J Taiwan Inst Chem Eng* 2014 ; 45:504–7. (Cité à page 14.)

- [63] Hoekman SK, Broch A, Robbins C, Cenicerros E, Natarajan M. Review of biodiesel composition, properties, and specifications. *Renew. Sust. Energ. Rev.* 2012; 16:143–69. (Cité à page 14.)
- [64] Oliveira LE, Silva DMLC. Comparative study of calorific value of rapeseed, soybean, jatropha curcas and crambe biodiesel. *Renew Energy Power Qual J* 2013;1(11):679–82. (Cité à page 14.)
- [65] M.M. Azam, A. Waris, N.M. Nahar, Prospects and potential of fatty acid methyl esters of some non-traditional seed oils for use as biodiesel in India, *Biomass Bioenergy* 29(2005)293–302. (Cité aux pages 14 et 16.)
- [66] P.K. Devan, N.V. Mahalakshmi, Study of the performance, emission and combustion characteristics of a diesel engine using poon oil-based fuels, *Fuel Process. Technol.* 90(2009)513–519. (Cité à page 14.)
- [67] A.E. Atabani, I.A. Badruddin, H.H. Masjuki, W.T. Chong, K.T. Lee, Pangium edule Reinw : a promising non-edible oil feedstock for biodiesel production, *Arabian J. Sci. Technol.* 40(2015)583–594. (Cité aux pages 14 et 16.)
- [68] E.F. Aransiola, T.V., Ojumu, O.O., Oyekola, T.F., Madzimbamuto, D.I.O., Ikhu-Omoregbe A, review of current technology for biodiesel production : State of the art, *Biomass and bioenergy*, 61-276-277-2014. (Cité à page 15.)
- [69] Bala, B. K. Studies on biodiesel from transformation of vegetable oils for diesel engine, *Energy Edu Sci Technol* 15:1–43, 2005. (Cité à page 15.)
- [70] Sarin A. Biodiesel : production and properties. *Royal Society of Chemistry* ; 2012. (Cité à page 16.)
- [71] P.K. Devan, N.V. Mahalakshmi, Study of the performance, emission and combustion characteristics of a diesel engine using poon oil-based fuels, *Fuel Process. Technol.* 90(2009)513–519. (Cité à page 16.)
- [72] Aleme HG, Barbeira PJS. Determination of flash point and cetane index in diesel using distillation curves and multivariate calibration. *Fuel* 2012; 102:129–34. (Cité à page 16.)
- [73] Force TT. White paper on internationally compatible biofuel standards. Tripartite Task Force Brazil. European Union & United State of America ; 2007. (Cité à page 16.)
- [74] Kumar M, Sharma MP. Assessment of potential of oils for biodiesel production. *Renew. Sust. Energ. Rev.* 2015; 44:814–23. (Cité à page 16.)
- [75] Al-Samarrae RR, Atabani AE, Uguz G, Kumar G, Arpa O, Ayanoglu A, Mohammed MN, Farouk H. Perspective of safflower (*Carthamus tinctorius*) as a potential biodiesel feedstock in Turkey : characterization, engine performance and emissions analyses of butanol–biodiesel–diesel blends. *Biofuels*. 2017. (Cité à page 16.)
- [76] Chuah LF, Yusup S, Aziz ARA, Klemeš JJ, Bokhari A, Abdullah MZ. Influence of fatty acids content in non-edible oil for biodiesel properties. *Clean Technol Environ Policy*. 2016; 18(2):473–82. (Cité à page 17.)
- [77] Ramos MJ, Fernández CM, Casas A, Rodríguez L, Pérez Á. Influence of fatty acid composition of raw materials on biodiesel properties. *Bioresour Technol Bioresour Technol*. 2009; 100(1):261–8. (Cité à page 17.)

- [78] Barradas Filho AO, Barros AKD, Labidi S, Viegas IMA, Marques DB, Romariz AR, de Sousa RM, Marques ALB, Marques EP. Application of artificial neural networks to predict viscosity, iodine value and induction period of biodiesel focused on the study of oxidative stability. *Fuel* 2015; 145:127–35. (Cité à page 17.)
- [79] Bouaid A, Martinez M, Aracil J. Long storage stability of biodiesel from vegetable and used frying oils. *Fuel* 2007; 86:2596–602. (Cité à page 17.)
- [80] Schober S, Mittelbach M. Iodine value and biodiesel : is limitation still appropriate? *Lipid Technol* 2007; 19:281–4. (Cité à page 17.)
- [81] Prankl H, Worgetter M, Rathbauer J. Technical performance of vegetable oil methyl esters with a high iodine number vol. 1. Oakland, California, USA : Fourth Biomass Conference of the Americas; 1999. p. 805–10. August 29-September 2. (Cité à page 17.)
- [82] Rao PV, Clarke S, Brown R. Influence of iodine value on combustion and NO_x emission characteristics of a DI diesel engine. In : Chemeca 2010 : the 40th australasian chemical engineering conference. Adelaide, South Australia : Engineers Australia; 2010. (Cité à page 17.)
- [83] Drapcho CM, Nhuan NP, Walker TH. Biofuels engineering processing technology. New York, NY, USA : McGraw-Hill Companies; 2008. (Cité à page 18.)
- [84] Azad A, Uddin SA, Alam M. Experimental study of DI diesel engine performance using biodiesel blends with kerosene. *www IJEE IEEFoundation org. J Homepage* 2013; 4:265–78. (Cité à page 18.)
- [85] Nabi MN, Hoque SMN, Akhter MS. Karanja (*Pongamia Pinnata*) biodiesel production in Bangladesh, characterization of karanja biodiesel and its effect on diesel emissions. *Fuel Process Technol* 2009; 90:1080–6. (Cité à page 18.)
- [86] Hossain MA, Chowdhury SM, Rekhu Y, Faraz KS, Islam MU. Biodiesel from coconut oil : a renewable alternative fuel for diesel engine. In : *International conference on aerospace, mechanical, automotive and materials engineering (ICAMAME 2012)*, Kuala Lumpur, Malaysia; 2012. (Cité à page 18.)
- [87] Hasib ZM, Hossain J, Biswas S, Islam A. Biodiesel from mustard oil : a renewable alternative fuel for small diesel engines. *Mod Mech Eng* 2011; 1:77–83. (Cité aux pages 19 et 21.)
- [88] Mhia Md, Zaglul Shahadat MHH. Making biodiesel and performance test of a diesel engine using diesel-biodiesel blends as a fuel with inlet air preheating attachment. *Int Conf Mech Eng* 2007:1–6. (Cité à page 19.)
- [89] Nabi MN, Akhter MS, Zaglul Shahadat MM. Improvement of engine emissions with conventional diesel fuel and diesel–biodiesel blends. *Bioresour Technol* 2006; 97:372–8. (Cité à page 19.)
- [90] Rahman MS, Beg MRA, Nabi MN. Emission characteristics of a DI diesel engine with biofuel. (Cité à page 19.)
- [91] Nabi MN, Hustad JE, Kannan D. First generation biodiesel production from non-edible vegetable oil and its effect on diesel emissions. In : *International conference on thermal engineering*; 2008. (Cité à page 19.)
- [92] Azad A, Islam M. A renewable alternative bio-fuel source from *Jatropha Curcus* seeds oil : performance and emission study for DI diesel engine. *Int J Adv Renewable Energy Res* 2012; 1:126–32. (Cité à page 19.)

- [93] Nabi Md Nurun, Najmul Hoque SM. Biodiesel production from linseed oil and performance study of a diesel engine with diesel biodiesel fuels. *Mech Eng* 2008 ; ME39(1):40–4. (Cité à page 20.)
- [94] Mohon Roy M, Tomita E, Kawahara N, Harada Y, Sakane A. Performance and emission comparison of a supercharged dual-fuel engine fueled by producer gases with varying hydrogen content. *Int J Hydrog Energy* 2009 ; 34:7811–22. (Cité à page 20.)
- [95] Roy MM, Uddin MS. Performance and emission comparison of a DI diesel engine fueled by diesel and diesel-biodiesel blend without and with EGR condition. (Cité à page 20.)
- [96] Demirbas A. Political, economic and environmental impacts of biofuels : a review. *Appl Energy* 2009 ; 86:S108–17. (Cité à page 21.)
- [97] Rahman K, Mashud M, Roknuzzaman M, Galib AA. Biodiesel from Jatropha oil as an alternative fuel for diesel engine. *Int J Mech Mech (IJMME-IJENS)* 2010 ; 10:1–6. (Cité à page 21.)
- [98] JP. Degobert. Automobile et Pollution. Technip, 1992. (Cité à page 21.)
- [99] J.A. Miller, M. Pilling, and J. Troe. *Proc. Combust. Inst*, 30:43–88, 2005. (Cité à page 22.)
- [100] P. Glarborg. Hidden interactions—trace species governing combustion and emissions. *Proc. Combust. Inst.*, 31:77–98, 2007. (Cité à page 22.)
- [101] J.B. Heywood. Internal Combustion Engines Fundamentals. *McGraw-Hill*, New York, 1988. (Cité aux pages 22, 27, 40, 45, 46, 48, 49, 50, 56 et 68.)
- [102] G. De Soete. Overall reaction rates of no and n2 formation from fuel nitrogen. 15th Symp. (Int.) on Comb., pages 1093–110, 1974. (Cité à page 23.)
- [103] L. Pillier, A. El Bakali, X. Mercier, A. Rida, J.-F. Pauwels, and P. Desgroux. Influence of C2 and C3 compounds of natural gas on NO formation : an experimental study based on lif/crds coupling. *Proc. Combust. Inst.*, 30:1183–1191, 2005. (Cité à page 23.)
- [104] N. Lamoureux, A. El-Bakali, L. Gasnot, J.-F. Pauwels, and P. Desgroux. Promptno formation in methane/oxygen/nitrogen flames seeded with oxygenated volatile organic compounds : Methyl ethylketone or ethyl acetate. *Combust. Flame*, 153:186–201, 2008. (Cité à page 23.)
- [105] T. K. Gogoi and D. C. Baruah. A cycle simulation model for predicting the performance of a diesel engine fuelled by diesel and biodiesel blends. *Energy*, 35:1317–1323, 2010. (Cité à page 27.)
- [106] R. P. Rodriguez, R. Sierens, and S. Verhelst. Ignition delay in a palm oil and rapeseed oil biodiesel fuelled engine and predictive correlations for the ignition delay period. *Fuel*, 90:766–772, 2011. (Cité à page 27.)
- [107] D. Bibiç, I. Filipovic, A. Hribernik, and B. Pikula. Investigation into the effect of different fuels on ignition delay of m type diesel combustion process. *Thermal Science*, 12:103–114, 2008. (Cité à page 27.)
- [108] D. Descieux. Modélisation et comparaison thermo-énergétique de système de cogénération. Thèse de Doctorat. Université Henri Poincaré, Nancy, 2007. (Cité à page 29.)
- [109] Can O, Celikten I, Usta N. Effects of ethanol addition on performance and emissions of a turbocharged indirect injection diesel engine running at different injection pressures. *Energy Convers. Manag.* 2004 ; 45:2429–40. (Cité à page 31.)

- [110] Sayin C. Engine performance and exhaust gas emissions of methanol and ethanol–diesel blends. *Fuel* 2010 ; 89:3410–5. (Cité à page 31.)
- [111] Sayin C, Canakci M. Effects of injection timing on the engine performance and exhaust emissions of a dual-fuel diesel engine. *Energy Convers. Manag.* 2009 ; 50:203–13. (Cité à page 31.)
- [112] Huang J, Wang Y, Li S, Roskilly AP, Hongdong Y, Li H. Experimental investigation on the performance and emissions of a diesel engine fuelled with ethanol–diesel blends. *Appl Therm Eng* 2009 ; 29(11–12):2484–90. (Cité à page 31.)
- [113] Rakopoulos DC, Antonopoulos KA, Rakopoulos CD. Experimental heat release analysis and emissions of a HSDI diesel engine fueled with ethanol–diesel fuel blends. *Energy* 2007 ; 32:1791–808. (Cité à page 31.)
- [114] Ajav EA, Singh B, Bhattacharya TK. Experimental study of some performance parameters of a constant speed stationary diesel engine using ethanol–diesel blends as fuel. *Biomass Bioenergy* 1999 ; 17:357–65. (Cité à page 31.)
- [115] Li D, Zhen H, Xingcai L. Physico-chemical properties of ethanol–diesel blend fuel and its effect on performance and emissions of diesel engines. *Renew Energy* 2005 ; 30:967–76. (Cité à page 31.)
- [116] Bilgin A, Durgun O, Sahin Z. The effects of diesel–ethanol blends on diesel engine performance. *Energy Sources* 2002 ; 24:431–40. (Cité à page 31.)
- [117] Selim MYE. Effect of exhaust gas recirculation on some combustion characteristics of dual fuel engine. *Energy Convers. Manag.* 2003 ; 44:707–21. (Cité à page 31.)
- [118] Abd-Alla GH, Soliman HA, Badr OA, Abd-Rabbo MF. Effects of diluent admissions and intake air temperature in exhaust gas recirculation on the emissions of an indirect injection dual fuel engine. *Energy Convers. Manag.* 2001 ; 42:1033–45. (Cité à page 31.)
- [119] Kökkülünk G. Analysis of the effects of exhaust gas recirculation (EGR) on diesel engine with steam injection system to performance and emission parameters. MSc Thesis. Yildiz Technical University ; 2012. (Cité à page 31.)
- [120] Samec N, Breda K, Dibble RW. Numerical and experimental study of water/oil emulsified fuel combustion in a diesel engine. *Fuel* 2002 ; 81:2035–44. (Cité à page 31.)
- [121] Bedford F, Rutland C, Dittrich P, Raab A, Wirbelit F. Effects of direct water injection on DI diesel engine combustion. SAE paper 2000-01-2938. (Cité à page 31.)
- [122] Gonca G. Investigation of the effects of steam injection into the supercharged diesel engine with running miller cycle on performance and emissions. PhD Thesis Prog Rep. 2012. (Cité à page 31.)
- [123] Gonca G, Sahin B, Ust Y, Parlak A, Safa A. Comparison of steam injected diesel engine and miller cycled diesel engine by using two zone combustion model. 12. *Int Combust Symp* 2012 ; 16:115–25. (Cité à page 31.)
- [124] Parlak A, Ayhan V, Üst Y, Sahin B, Cesur I, Boru B, et al. New method to reduce NO_x emissions of diesel engines : electronically controlled steam injection system. *J Energy Inst* 2012 ; 85:135–9. (Cité à page 31.)
- [125] Cesur I, Parlak A, Ayhan A, Gonca G, Boru B. The effects of electronic controlled steam injection on spark ignition engine. *Appl Therm Eng* 2013 ; 55 :61–8. (Cité aux pages 31 et 32.)

- [126] Kökkülünk G, Gonca G, Ayhan V, Cesur I, Parlak A. Theoretical and experimental investigation of diesel engine with steam injection system on performance and emission parameters. *Appl Therm Eng* 2013 ; 54:161–70. (Cit  aux pages 31 et 32.)
- [127] Gonca G, Sahin B, Ust Y, Parlak A. Determination of the optimum temperatures and mass ratios of steam injected into turbocharged internal combustion engines. *J Renew Sustain Energy* 2013 ; 023119(5):1–13. (Cit  aux pages 31 et 32.)
- [128] K. G rkem, G. Gonca, V. Ayhan, I. Cesur, and Adnan Parlak. Theoretical and experimental investigation of diesel engine with steam injection system on performance and emission parameters. *Applied thermal Engineering*, vol. 54, pp. 161–170, 2013. (Cit    page 32.)
- [129] K kk l nk G, Parlak A, Ayhan V, Cesur I, Gonca G, Boru B. Theoretical and experimental investigation of steam injected diesel engine with EGR. *Energy* 2014 ; 74 :331-9. (Cit    page 31.)
- [130] K kk l nk G, Gonca G, Parlak A. The effects of design parameters on performance and NO emissions of steam-injected diesel engine with exhaust gas recirculation. *Arab J Sci Eng* 2014 ; 39(5):4119-29. (Cit    page 31.)
- [131] Gonca G. Investigation of the effect of steam injection on performance and emissions in a turbocharged diesel engine running with the Miller cycle. PhD Thesis. 2013. (Cit    page 31.)
- [132] Gonca G, Sahin B, Ust Y, Parlak A, Safa A. Comparison of steam injected diesel engine and Miller cycled diesel engine by using two zone combustion model. *J Energy Inst* 2015 ;88(1): 43-52. (Cit  aux pages 31 et 32.)
- [133] Gonca G, Sahin B, Parlak A, Ust Y, Ayhan V, Cesur I, et al. The effects of steam injection on the performance and emission parameters of a Miller cycle diesel engine. *Energy* 2014 ; 78:266-75. (Cit    page 32.)
- [134] Gonca G. Investigation of the effects of steam injection on performance and NO emissions of a diesel engine running with ethanol-diesel blend. *Energy Convers. Manag.* 2014 ;77:450-7. (Cit    page 32.)
- [135] Gonca G, Sahin B. Simulation of performance and nitrogen oxide formation of a hydrogen-enriched diesel engine with the steam injection method. *Therm Sci* 2015 ; 19(6) : 1985-94. (Cit    page 32.)
- [136] Gonca G, Sahin B. The influences of the engine design and operating parameters on the performance of a turbocharged and steam injected diesel engine running with the Miller cycle. *Appl Math Model* 2016 ; 40:3764-82. (Cit    page 32.)
- [137] Parlak A, Ayhan V, Cesur I, K kk l nk G. Investigation of the effects of steam injection on performance and emissions of a diesel engine fuelled with tobacco seed oil methyl ester. *Fuel Process Technol* 2013 ; 116:101-9. (Cit    page 32.)
- [138] R. B. Krieger and G. L. Borman. The computation of apparent heat release for internal combustion engines. *Proceedings of Diesel Gaz Power*, ASME, 1966. (Cit  aux pages 38 et 39.)
- [139] N. Bordet. Mod lisation 0D/1D de combustion diesel : du mode conventionnel au mode homog ne. Universit  de Orl ans. Th se de Doctorat. Orl ans, 2011. (Cit  aux pages 39 et 49.)

- [140] C. D. Rakopoulos, D. C. Rakopoulos, E. G. Giakoumis, and D. C. Kyritsis. Validation and sensitivity analysis of a two zone diesel engine model for combustion and emissions prediction. *Energy Convers. Manag.* 2004 ; 45, 2004. (Cit      page 49.)
- [141] Varde KS. Spray cone angle and its correlation in a high pressure fuel spray. *Can J Chem Eng*, 63:183–7, 1985. (Cit      page 50.)
- [142] P. A. Lakshminarayanan and Y. V. Modelling diesel combustion. *Springer*, 2010. (Cit      page 51.)
- [143] H.Hiroyazu. Spray breakup mechanism from the hole-type nozzle and its applications. *Technical report*, 2000. (Cit      page 51.)
- [144] D. L. Siebers and J. L. Naber. Effects of gas density and vaporization on penetration and dispersion of diesel sprays. *SAE technical paper* 960034, 1996. (Cit   aux pages 52 et 53.)
- [145] D.L.Siebers. Scaling liquid-phase fuel penetration in diesel sprays based on mixing-limited vaporization. *SAE Technical Paper* 1999-01-0528, 1999. (Cit      page 52.)
- [146] D. L. Siebers. Liquid-phase fuel penetration in diesel sprays. *SAE technical paper* 980809, 1998. (Cit      page 52.)
- [147] H. A. Lefebvre. Atomization and Sprays. Combustion : An International Series Series. *Taylor & Francis*, 1989. (Cit      page 52.)
- [148] H.Hiroyasu and M.Arai. Structures of fuel sprays in diesel engines. *SAE Technical Paper* 900475, 1990. (Cit      page 53.)
- [149] Y. Wakuri, M. Fujii, T. Amitani, and R. Tsuneya. Studies of the penetration of a fuel spray in a diesel engine. *Bull. J.S.M.E*, 9:123–130, 1960. (Cit      page 53.)
- [150] S. S. Sazhin, G. Feng, and M. R Heikal. A model for fuel spray penetration. , 80:2171–2180, 2001. (Cit      page 53.)
- [151] Elkotb MM. Fuel atomization for spray modelling. *Prog Energy Combust Sci*, 8 : 61–91, 1982. (Cit      page 54.)
- [152] Ejim CE, Fleck BA, and Amirfazli A. Analytical study for atomization of biodiesels and their blends in a typical injector : surface tension and viscosity effects. *Fuel*, 86:1534–44, 2007. (Cit      page 54.)
- [153] A. E. Godsavel. Studies of the combustion of drops in a fuel spray-the burning of single drops of fuel," in fourth symposium (international) on combustion. in : The standing committee of combustion symposia. Baltimore, pages 818–830, 1953. (Cit      page 55.)
- [154] D. B. Spalding. *The Combustion of Liquid Fuels*. Cambridge, 1953. (Cit      page 55.)
- [155] A. S. Kuleshov. Multi-zone di diesel spray combustion model for thermodynamic simulation of engine with pcci and high egr level. *SAE Int. J. Engines*, 2 : 1811–1834, 2009. (Cit      page 55.)
- [156] E. Sher. *Air Pollution from Internal Combustion Engines Pollutant Formation and Control*. San Diego : ACADEMIC PRESS, 1998. (Cit      page 55.)
- [157] G. A. Lavoie, J. B. Heywood, and J. C. Keck. Experimental and theoretical study of nitric oxide formation in internal combustion engines. *Combustion Science and Technology*, 1:13–326, 1970. (Cit      page 56.)
- [158] Ferguson. *Internal combustion engines : applied thermosciences*. New York : John Wiley, 1986. (Cit   aux pages 58 et 60.)

- [159] Olikara C and Borman GL. A computer program for calculating properties of equilibrium combustion products with some applications to I.C. engines. Warrendale, Pa. : Society of Automotive Engineers, 1975. (Cit      page 58.)
- [160] Turns SR. An introduction to combustion : concepts and applications. second ed. Boston : WCB/McGraw-Hill, 2000. (Cit      page 64.)
- [161] Y. H. Zweiri, J. F. Whidborne, and L. D. Seneviratne. A mathematical transient model for the dynamics of a single-cylinder diesel engine. *In Proceedings of the International Conference on Simulation, IEE*, pages 145–151, 1998. (Cit      page 72.)
- [162] B. W. Millington and E. R. Hartles. Frictionnal losses in diesel engines. *SAE Paper, (680590)*, 1968. (Cit      page 72.)
- [163] Z.M. Ayissi, A.O.L.M., C. Salem, G.J., and M. Obounou. Experimental studies on the combustion characteristics and performance of a direct injection engine fuelled with neem methyl ester biodiesel. Proceeding of the national symposium CCSSE2014. University of Douala, Douala, 2014. (Cit      page 74.)

PUBLICATIONS SCIENTIFIQUES

Research Article

Combustion Characteristics and NO Formation Characteristics Modeling in a Compression Ignition Engine Fuelled with Diesel Fuel and Biofuel

Jean Paul Gram Shou ¹, Marcel Obounou,¹ Rita Enoh Tchame,¹
Mahamat Hassane Babikir ¹ and Timoléon Crépin Kofané²

¹Laboratory of Energy and Electronics and Electrical Systems, Department of Physics, Faculty of Science, University of Yaoundé I, P.O.Box 812, Yaoundé, Cameroon

²Laboratory of Mechanics, Materials and Structures, Department of Physics, Faculty of Science, University of Yaoundé I, P.O.Box 812, Yaoundé, Cameroon

Correspondence should be addressed to Jean Paul Gram Shou; jpgram1085s@yahoo.fr

Received 18 June 2021; Revised 15 October 2021; Accepted 23 October 2021; Published 18 November 2021

Academic Editor: Kalyan Annamalai

Copyright © 2021 Jean Paul Gram Shou et al. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Compression ignition engine modeling draws great attention due to its high efficiency. However, it is still very difficult to model compression ignition engine due to its complex combustion phenomena. In this work, we perform a theoretical study of steam injection being applied into a single-cylinder four-strokes direct-injection and naturally aspirated compression ignition engine running with diesel and biodiesel fuels in order to improve the performance and reduce NO emissions by using a two-zone thermodynamic combustion model. The results obtained from biodiesel fuel are compared with the ones of diesel fuel in terms of performance, adiabatic flame temperatures, and NO emissions. The steam injection method could decrease NO emissions and improve the engine performances. The results showed that the NO formation characteristics considerably decreased and the performance significantly increased with the steam injection method. The relative errors for computed nitric oxide concentration values of biodiesel fuel and diesel fuel in comparison to the measured ones are 2.8% and 1.6%, respectively. The experimental and theoretical results observed show the highly satisfactory coincidences.

1. Introduction

Engine simulation has been extensively used to improve the engine performance. Experimental work which is aimed at fuel economy and low pollutant emission for compression ignition engine requires change in input parameters which is not cost-effective. Thus, simulating the performance of internal combustion engines using mathematical models and powerful computers reduces the cost and time of experimental tests. In these simulation models, the effect of various design structures like design of combustion chamber input parameters and operational changes can be estimated in a fast and cheap way provided that main mechanism are recognized and modeled perfectly to meet the experimental results.

Petroleum products are the main sources of energy for internal combustion engines. However, rising prices for petroleum products, uncertain supplies, and even growing demand due to increasing population, improving living conditions, and stricter emission standards have triggered intensive research for biofuels [1, 2]. The continuous demand of finding alternative fuels and reducing emissions has motivated the development of numerical models to provide predictive tools for designers. Engine simulation has therefore become an important part of the internal combustion engine design process to improve engine performance [3–10].

Zheng et al. [11] used a single-zone model with detailed kinetics in order to determine the general trends of auto-ignition characteristics, engine performance, and nitric

oxides emission as functions of major operating parameters for a natural gas-fuelled HCCI engine. In their study, the chemical kinetics employed is GRI-Mech 3.0, which includes 53 species and 325 elementary reactions, and it has been developed for gas phase natural reactions and includes hydrocarbon species up to C_3 and the problem with natural gas; it is hard to autoignite and therefore requires a higher compression ratio, some amount of intake heating, or some type of preignition. Huanhuan et al. [12] conducted a theoretical study on the effects of H_2O and CO_2 dilution in the oxidizer or fuel stream on counterflow methane diffusion flames, emphasizing NO formation kinetics. Their results showed that the impact of different radiation heat transfer models on NO emissions diminishes with increase in the dilution ratio. Dhana Raju et al. [13] examined the engine characteristics by focusing on the effect of various oxygenated additives such as diethyl ether, dimethyl ether, and dimethyl carbonate on 20% tamarind seed methyl ester biodiesel blend of different concentrations (6% and 12%) in volume basis. Their results showed that 12% diethyl ether added to 20% tamarind seed methyl ester shows considerable enhancement in brake thermal efficiency, which is 4.22% higher than of tamarind biodiesel blend. Dhana Raju et al. [14] examined the viability of tamarind biodiesel as an alternative fuel for diesel engine applications. They investigated the influence of nanoparticles as fuel-borne catalysts on 20% tamarind biodiesel blend and concluded that significant enhancement in brake thermal efficiency and considerable reduction in engine harmful exhaust emissions can be achieved.

The performance of compression ignition engines could be reduced and NO_x emissions could be increased with the addition of ethanol to diesel fuel [15–22]. Some techniques can be used such as EGR, water, and steam injection into combustion chamber to reduce these adverse effects of the ethanol mixtures on diesel engines [23–28]. Although, EGR is commonly used to minimize NO_x emissions, performance is dramatically decreased [23, 24]. Water injection into the engine combustion chamber with different methods is another NO_x reduction technique [25, 26]. One of the substantial handicaps of water injection techniques is that condensed water in the cylinder downgrades the quality of lubrication oil and raises the attrition rate of moving parts of the engine [28]. Recently, one of the developed techniques to reduce NO_x emissions and improve the engine performance is the steam injection method [28–31]. Gonca et al. [26, 27] conducted a theoretical study on the steam injected diesel engine and miller cycle diesel engine using a two-zone combustion model. The results of the study showed that steam injection could minimize NO_x emissions from diesel engines and improve effective efficiency and effective power. Parlak et al. [28] developed an electronically controlled steam injection method for a diesel engine. When this technique was implemented to diesel engine, NO_x emissions decreased up to 33%, effective power and torque increased up to 3%, and specific fuel consumption minimized up to 5% at full-load tests. Cesur et al. [29] and Kökkülünk et al. [30] applied the electronically controlled steam injection system into gasoline and diesel engines, and they obtained similar

results to those of Parlak et al.'s study [28]. In these studies, the optimum steam ratio was determined as 20% of injected fuel by mass in terms of NO_x reduction and performance improvement. Therefore, the steam injection method could be implemented to a diesel engine fuelled with ethanol-diesel mixture so as to improve performance and reduce NO_x emissions.

Conventional fuels like diesel fuels, aviation fuels, and biodiesel fuels are composed of many different classes of hydrocarbons, and hence, it would be impossible to conduct meaningful experiments and simulation with such a vast number of chemicals contained in one mixture. In order to overcome this problem, surrogate fuels are used. These are well-defined mixtures of a small number of hydrocarbon compounds whose relative concentrations can be adjusted so that the physical and chemical properties of their combustion approximate those of a fuel that is difficult to study theoretically and experimentally.

Equilibrium mole fractions and adiabatic flame temperature are necessary for not only estimating thermodynamic properties of exhaust NO but also providing key data to obtain the nonequilibrium concentrations. The model used in this study is based on a recourse to identify convenient surrogate fuels, and it can simulate steam injection. In addition, it used computed thermodynamic properties of combustion products more accurately than the existing combustion, which are used in thermodynamic analysis of internal combustion engines. Methyl butyrate thermodynamic data were used as the surrogate for biodiesel fuel. In this study, the effects of steam injection into a diesel engine fuelled with diesel and biodiesel fuels have been studied in terms of performance and NO emissions using a two-zone thermodynamic model.

2. Materials and Methods

2.1. Specifications of the Diesel Engine. Tests were carried out on a four-stroke single-cylinder naturally aspirated direct-injection stationary compression ignition engine at constant speed. The specifications of the engine are given in Table 1.

The physical and chemical properties of the fuels are presented in Table 2.

The injected steam should not be regarded as an ideal gas since its specific heat strongly depends on pressure. In our case, the temperature of unburned mixture is found by assuming a thermal equilibrium among the reactants and the pressure inside the combustion chamber is taken as 30 atm. which is assumed equal to the pressure of injected steam. The temperature of injected steam at 30 atm. is 300°C corresponding to steam phase. The water should be heated by the engine coolant and exhaust gas in order to obtain the injected steam. The schematic diagram of the steam injection method is shown in Figure 1.

2.2. Theoretical Model

2.2.1. Heat Transfer Submodel. The heat transfer into the system is expressed in terms of heat loss from the burned and unburned gas, respectively.

TABLE 1: Specifications of the diesel engine.

Power output at 1500 rpm	4.5 kW
Engine cooling system	Air cooled
Intake system	Naturally aspirates
Bore and stroke (mm)	95.3/88.9
Displacement volume (cm ³)	630
Number of cylinders	1
Compression ratio	18:1

TABLE 2: Chemical and physical properties of test fuels.

Fuel properties	Diesel fuel	Biodiesel fuel
Density at 15°C (kg m ⁻³)	853.7	865.19
Kinematic viscosity at 40°C (mm ² s ⁻¹)	2.8271	3.5
LHV (kJ.kg ⁻¹)	42640	37000
Oxygen (wt.%)	0.00	11.27
Cetane number	42.6	54
Chemical formula	C _{14.09} H _{24.78}	C ₁₈ H ₃₆ O ₂

$$\frac{dQ_h}{d\theta} = \frac{\dot{Q}_l}{\omega} = -\frac{\dot{Q}_b + \dot{Q}_u}{\omega}, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \dot{Q}_b &= h_c A_b (T_b - T_W), \\ \dot{Q}_u &= h_c A_u (T_u - T_W), \end{aligned} \quad (2)$$

where h_c is the convective heat transfer coefficient between the gas mixture and cylinder walls and A_b and A_u are the areas of burned and unburned gas in contact with the combustion chamber walls at temperature T_W . The convective heat transfer coefficient is determined using Woschni correlation given by

$$\begin{aligned} h_c &= 3.26b^{-0.2} p^{0.8} (xT_b + (1-x)T_u)^{-0.55} \omega^{0.8}, \\ \omega &= C_1 V_p + C_2 \frac{V_d T_r}{P_r V_r} (p - P_{motored}), \end{aligned} \quad (3)$$

where b is the bore diameter of the cylinder, ω is the mean gas velocity in the cylinder, and x is mass fraction burned. C_1 and C_2 are constants that depend on the stroke of the cycle. V_p is the mean piston speed, p_r , T_r , and V_r , are pressure, temperature, and cylinder volume at intake valve closing, and $P_{motored}$ is the pressure of the engine at the motored cycle.

The fraction of cylinder area contacted by burned gas is assumed to be proportional to the square root of the mass fraction burned to reflect the fact that burned gas occupies a larger volume fraction of the cylinder than the unburned gas due to the density difference between burned and unburned gas. The areas of burned and unburned gas are calculated using the following relations:

$$A_b = \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) \sqrt{x}, \quad (4)$$

$$A_u = \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) (1 - \sqrt{x}),$$

2.2.2. Fuel Injection Submodel. The fuel injection rate \dot{m}_{fi} is determined empirically from the fuel injection rate [32].

$$\frac{\dot{m}_{fi}}{m_{fi}} = \frac{\omega}{\theta_d \Gamma(n)} \left(\frac{\theta - \theta_s}{\theta_d} \right)^{n-1} \exp\left(-\frac{(\theta - \theta_s)}{\theta_d} \right), \quad (5)$$

where $\Gamma(n)$, θ_s , θ_d , and \dot{m}_{fi} are the gamma function, the start angle of injection, the injection duration, and the total mass of fuel to be injected, respectively. The gamma function and the total injected fuel mass are expressed as [32]

$$\begin{aligned} \ln \Gamma(n) &= \left(n - \frac{1}{2} \right) \ln(n) - n + \frac{1}{2} \ln(2\pi) + \frac{1}{12n} - \frac{1}{360n^3} \\ &+ \frac{1}{1260n^5} - \frac{1}{1680n^7}, \end{aligned} \quad (6)$$

where n is an integer and its value could be taken for the diesel engine with open chamber as $1 \leq n \leq 2$ and for close chamber as $3 \leq n \leq 5$.

$$m_{fi} = \phi FA_s (1 - \text{RGF}) m_a. \quad (7)$$

2.2.3. Ignition Delay Submodel. The correlation proposed by Hardenberg and Hase [31] is used to calculate the ignition delay in crank angle degrees, and it is given by

$$\begin{aligned} \tau_{ig} &= (0.36 + 0.22V_p) \\ &\times \exp \left[E_A \left(\frac{1}{RT} - \frac{1}{17,190} \right) + \left(\frac{21.2}{p - 12.4} \right)^{0.63} \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

The value of the apparent activation energy was determined using the following expression:

$$E_A = \frac{618,840}{\text{CN} + 25}. \quad (9)$$

2.2.4. Mass Change in the Cylinder. The rates of change of burned fuel and air in the cylinder are determined as follows:

$$\begin{aligned} \frac{dm_f}{d\theta} &= \frac{1}{\omega} \left(\dot{m}_{fi} - \frac{\dot{m}_l \phi FA_s}{1 + \phi FA_s} \right), \\ \frac{dm_a}{d\theta} &= -\frac{\dot{m}_l}{\omega (1 + \phi FA_s)}, \end{aligned} \quad (10)$$

where \dot{m}_l , ϕ , and FA_s are the gas leak rate, equivalence ratio, and stoichiometric fuel/air ratio by mass, respectively.

The burned gas leaking through the rings is expressed as

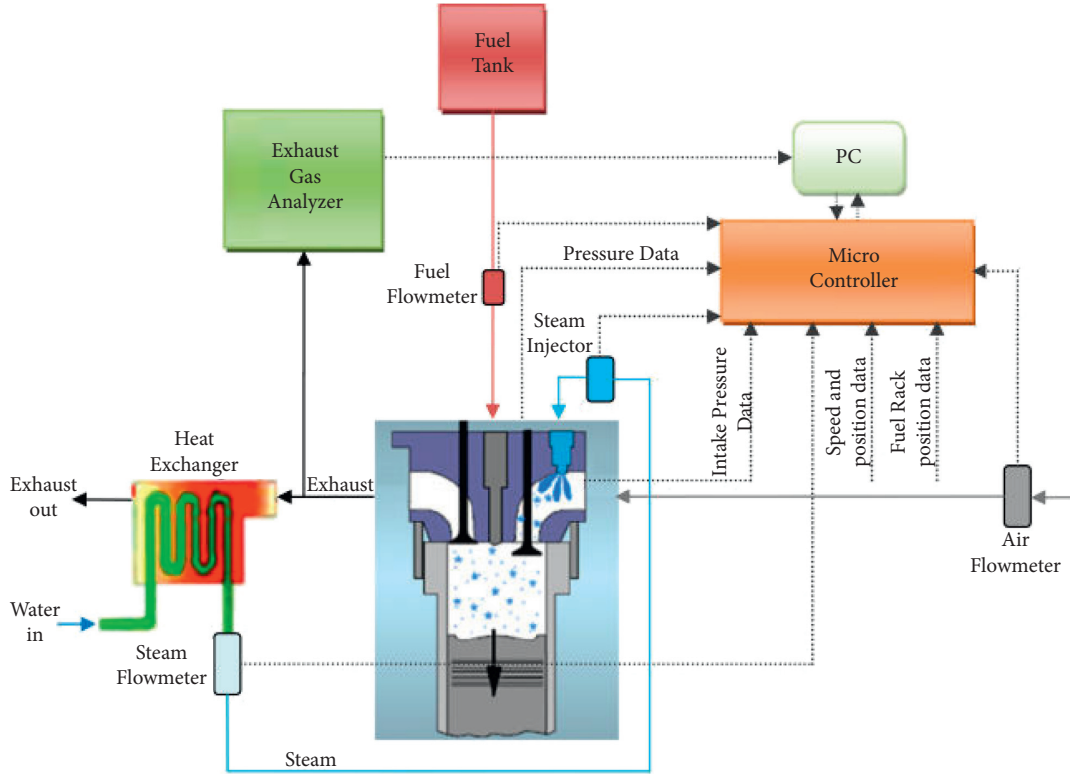


FIGURE 1: Schematic diagram of the steam injection method [32].

$$\frac{dm_l}{d\theta} = \frac{mC_b}{\omega}, \quad (11)$$

where C_b and ω are the blowby coefficient and angular velocity, respectively.

The total mass inside the cylinder at any time can be expressed as

$$m = m_{fi} + m_a. \quad (12)$$

2.2.5. Energy Equation. Combustion simulation of diesel engine fuelled by diesel and biodiesel is carried out by using a two-zone combustion model in order to calculate NO emissions, effective efficiency, and power. The burned and unburned zones are divided by the region border. In the combustion chamber, the equation of the energy conservation in differential form is given by

$$m \frac{du}{d\theta} + u \frac{dm}{d\theta} = -\frac{dQ_b}{d\theta} - \frac{dQ_u}{d\theta} - p \frac{dV}{d\theta} + \frac{dm_f}{d\theta} h_f - \frac{dm_l}{d\theta} h_l, \quad (13)$$

where m_l is the leak mass, m_f is the mass of injected fuel, and h_f and h_l are the enthalpies of injected fuel and leak mass per cycle, respectively.

The mass fraction burned x is defined using dual Wiebe function, and it is used to express the heat release from the combustion.

The differential equation used to calculate the pressure is given by

$$\frac{dp}{d\theta} = \frac{A + B + C}{D + E}. \quad (14)$$

The temperatures in the burned and unburned zones are calculated using the following differential equations:

$$\begin{aligned} \frac{dT_b}{d\theta} = & \frac{-h_c(\pi b^2/2 + 4V/b)(T_b - T_W)}{m\omega c_{pb}\sqrt{x}} \\ & + \frac{v_b}{c_{pb}} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \left(\frac{A + B + C}{D + E} \right) \\ & + \frac{h_u - h_b}{xc_{pb}} \left[\frac{dx}{d\theta} - (x - x^2) \frac{C_b}{\omega} \right], \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_u}{d\theta} = & \frac{-h_c(\pi b^2/2 + 4V/b)(T_u - T_W)}{m\omega c_{pu}(1 + \sqrt{x})} \\ & + \frac{v_u}{c_{pu}} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \left(\frac{A + B + C}{D + E} \right), \end{aligned} \quad (16)$$

where

$$A = \frac{1}{m} \left(\frac{dV}{d\theta} + \frac{VC_b}{\omega} \right),$$

$$B = \frac{h_c(\pi b^2/2 + 4V/b)}{m\omega} \left[\begin{array}{l} \frac{v_b}{c_{pb}} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \sqrt{x} \frac{T_b - T_W}{T_b} \\ + \frac{v_u}{c_{pu}} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} (1 - \sqrt{x}) \frac{T_u - T_W}{T_u} \end{array} \right],$$

$$C = -(v_b - v_u) \frac{dx}{d\theta} - v_b \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{h_u - h_b}{c_{pb} T_b} \left[\frac{dx}{d\theta} - (x - x^2) \frac{C_b}{\omega} \right],$$

$$D = x \left[\frac{v_b^2}{c_{pb} T_b} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right)^2 + \frac{v_b}{p} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln p} \right],$$

$$E = (1 - x) \left[\frac{v_u^2}{c_{pu} T_u} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + \frac{v_u}{p} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln p} \right],$$

$$\frac{dW}{d\theta} = p \frac{dV}{d\theta},$$

$$\frac{dH_l}{d\theta} = \frac{mC_b}{\omega} ((1 - x^2)h_u + x^2h_b),$$

$$\frac{dQ_l}{d\theta} = \frac{h_c(\pi b^2/2 + 4V/b)}{\omega} [\sqrt{x}(T_b - T_W) + (1 - \sqrt{x})(T_u - T_W)]. \quad (17)$$

2.2.6. *Zeldovich Mechanism.* NO emissions are calculated using Zeldovich mechanism [33] which takes into account 10 combustion products provided by the chemical equilibrium model [34], and it is given as follows:

$$N_2 + O \rightleftharpoons NO + N; k_{1f} = 1.8 \times 10^8 \exp\left(\frac{-38,370}{T}\right), \quad (18)$$

$$N + O_2 \rightleftharpoons NO + O; k_{2f} = 1.8 \times 10^4 T \exp\left(\frac{-4,680}{T}\right), \quad (19)$$

$$N + OH \rightleftharpoons NO + H; k_{3f} = 7.1 \times 10^7 \exp\left(\frac{-450}{T}\right). \quad (20)$$

Three assumptions are applied to chemical reaction equations (18)–(20) to result in equation (21). The first assumption applied is that the nitrogen chemistry is decoupled from the combustion reactions, the second assumption applied is that O, H, and OH radicals are at their equilibrium concentration at equilibrium temperature, and finally, the third assumption is that nitrogen radical (N) is at pseudo-steady state; the free nitrogen atoms are consumed as rapidly as they are generated. The rate of NO formation can be determined by using the differential equation given as

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{1}{[NO]_e} \frac{2R_1(1 - \alpha^2)}{1 + K\alpha}, \quad (21)$$

where α stands for equilibrium concentration ratio, and it is given as

$$\alpha = \frac{[NO]}{[NO]_e}. \quad (22)$$

The other constants used in equation (21) are expressed as follows:

$$K = \frac{R_1}{R_2 + R_3},$$

$$R_1 = k_{1f} [N_2]_e [O]_e = k_{1r} [NO]_e [N]_e, \quad (23)$$

$$R_2 = k_{2f} [N]_e [O_2]_e = k_{2r} [NO]_e [O]_e,$$

$$R_3 = k_{3f} [N]_e [OH]_e = k_{3r} [NO]_e [H]_e.$$

Equation (21) is integrated at each mass fraction burned x from the crank angle at which that element initially burns to a crank at which the reaction rates are negligible. At this crank angle, the diminished value of the NO mole fraction y_{NO_d} is achieved. The overall mole fraction of NO is given by

$$y_{NO} = \int_0^1 y_{NO_d}(x) dx. \quad (24)$$

2.3. *Engine Performance Parameters.* The engine performance parameters are determined from the relations as follows. The composite Simpson's rule approximates the integral of IMEP by

$$\text{IMEP} = \sum_{i=0}^n \frac{(V_{i+1} - V_i)(p_{2i} + 4p_{2i+1} + p_{2i+2})}{3V_d}. \quad (25)$$

The BMEP is defined as

$$\text{BMEP} = \text{IMEP} - \text{FMEP}. \quad (26)$$

Here, FMEP is determined the following correlation [31]:

$$\text{FMEP} = \frac{\tau - 4}{14.5} + 4.83 \times 10^{-4} N + 0.103 \left(\frac{V_p}{5.05} \right)^2. \quad (27)$$

where τ is the volumetric compression ratio.

Brake torque is defined as

$$\tau_e = \frac{\text{BMEP} \times V_d}{4\pi}. \quad (28)$$

The BTE expresses the percentage of fuel energy converted to useful power output:

$$\eta_e = \frac{P_e}{\dot{m}_f \times \text{LHV}_f}. \quad (29)$$

The BSFC represents the ratio of mass fuel injection to the combustion chamber per unit brake power output, and it is expressed as follows:

$$\text{BSFC} = \frac{3600 \times \dot{m}_f}{P_e}. \quad (30)$$

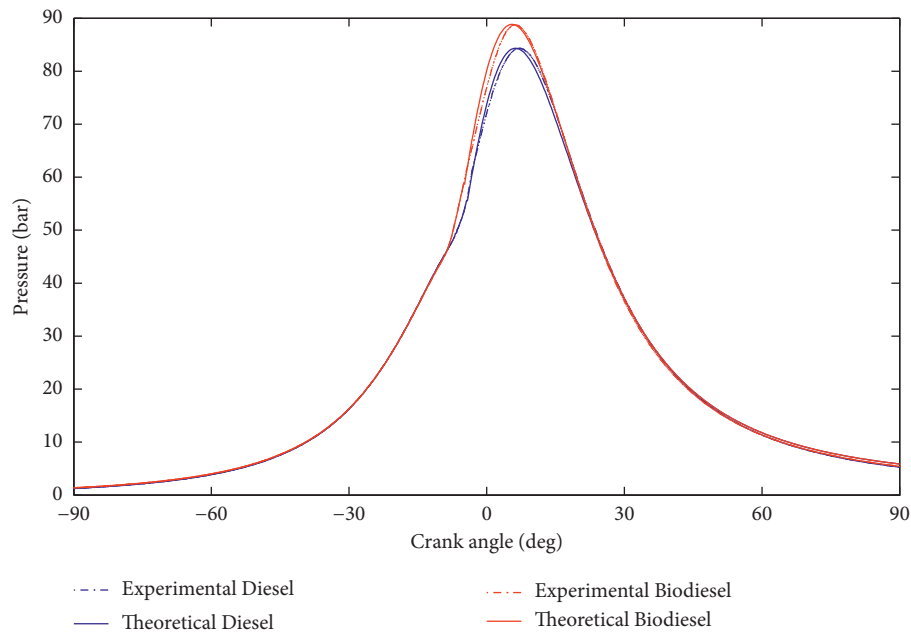


FIGURE 2: Comparison of experimental and theoretical pressures for biodiesel and diesel fuels.

3. Results and Discussion

3.1. Combustion Characteristics

3.1.1. In-Cylinder Pressure. The comparison of numerical and experimental pressures against the crank angle for biodiesel fuel with the ones for diesel fuel at full-load conditions is indicated in Figure 2. The peak pressure for the biodiesel fuel exceeds the one for diesel fuel due to the higher oxygen contents and CN of the biodiesel. The oxygen content, vaporization, and CN of fuels may influence the mass fraction burned. CN is one of the most important factors that influence the peak pressure. A higher CN normally corresponds to reducing the ignition delay period, reducing the premixing time, and moving the combustion phase earlier to the compression stroke as shown in Figures 3 and 4. In a compression ignition engine, the peak pressure in the combustion chamber depends on the burned fuel fraction during the premixed burning phase in the initial combustion stages and a longer ignition delay may lead to a higher maximum peak pressure in the combustion chamber.

3.1.2. Heat Release Rate. Figure 5 shows the heat leakage rate against the crank angle for biodiesel fuel compared to the one for diesel fuel at 100% of load. There are differences in heat leakage rate curves. The higher heat leakage rate of biodiesel fuel in the combustion stroke can be due to its higher equivalence ratio and its higher mass injected per cycle.

Figure 6 shows the heat transfer against the crank angle for biodiesel fuel compared to the one for diesel fuel at 100% of load. The picture shows that the value of heat transfer rate of biodiesel fuel is slightly higher than the one of diesel fuel despite its lower calorific value. This heat transfer rate of biodiesel fuel can be explained by the oxygen content and the

earlier start of combustion. The oxygen content leads to complete combustion and vaporization and CN which are responsible for the earlier start of combustion. The heat transfer of biodiesel fuel in the combustion stroke can be also due to its higher equivalence ratio and its higher mass injected per cycle.

Figure 7 shows the work against the crank angle for biodiesel fuel compared to the one for diesel fuel at 100% of load. The work remains constant during the compression stroke and increases during combustion stroke due to the combustion. As a fluid element burns, its expansion compresses both unburned and burned gases. Because the volume per unit mass of the hot burned gas is larger than the one of the cooler unburned gas, the increase in the mass specific internal energy due to the compression work is higher for burned gas than for unburned gas. The slightly higher predicted value of cumulative work done by biodiesel fuel than the one by diesel fuel is due to increase in the heat release rate and peak pressure.

3.2. Performance Characteristics

3.2.1. Performance Parameters. At full-load condition (4.5 kW), the brake power values are found, by simulation, to be 4.43 kW and 4.52 kW for biodiesel fuel and diesel fuel, respectively. Biodiesel fuel has lower heating value than diesel fuel and hence produces slightly less power.

The lower calorific value and the higher kinematic viscosity are responsible for the poor atomization of biodiesel in the combustion chamber of the engine and tend to reduce BTE [29]. The diesel fuel has the highest BTE, which is probably because of its lower viscosity than the biodiesel fuel. Higher viscosities and densities of biodiesel affect fuel atomization; this results in biodiesel having a lower BTE than diesel fuel.

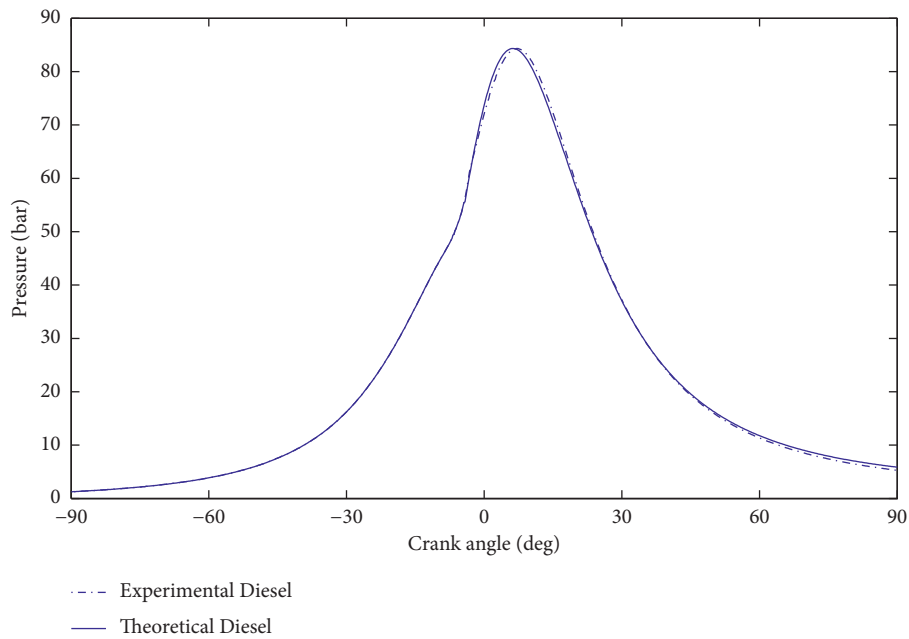


FIGURE 3: Comparison of experimental and theoretical pressures for diesel fuel.

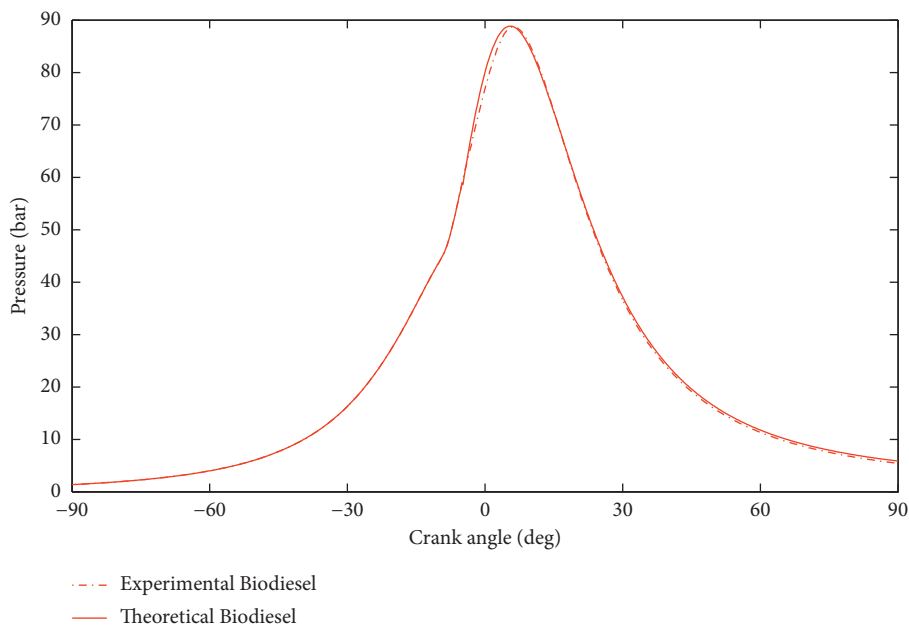


FIGURE 4: Comparison of experimental and theoretical pressures for biodiesel fuel.

The respective average decrease in brake torque and engine power values of the biodiesel fuel at 1500 rpm is 1.99% and 1.98% because of the higher viscosity, higher density, and lower heating (12.39%) as compared to pure diesel fuel. It was noticed that there was no significant difference in engine power between biodiesel fuel and diesel fuel. The recovery in brake torque and engine power for biodiesel fuel related to diesel fuel can be explained by the higher viscosity of biodiesel fuels which ameliorate fuel spray penetration and improve air-fuel mixing.

The BSFC for the biodiesel fuel and diesel fuel are 299.17 g/kWh and 240.15 g/kWh, respectively. It was seen that BSFC for the diesel fuel was less than the one for biodiesel fuel. The calorific value of biodiesel fuel is lower than the one of diesel fuel, and this fact explains the abovementioned results of BSFC.

3.2.2. Exhaust Gas Temperature. The comparison of theoretical in-cylinder temperatures at full-load conditions for the engine speed rate tested is given in Figure 8. The

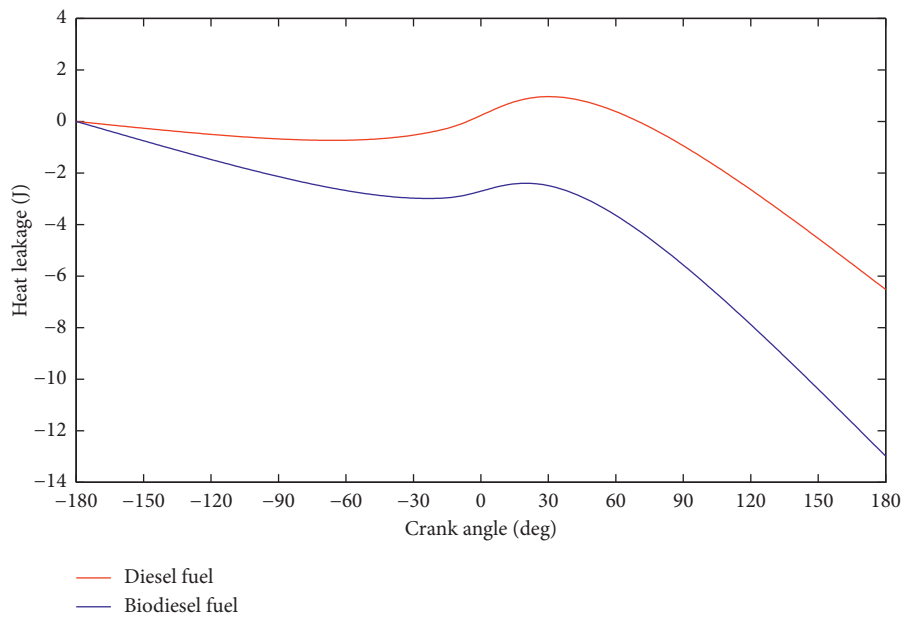


FIGURE 5: Heat leakage comparison of biodiesel and diesel fuels.

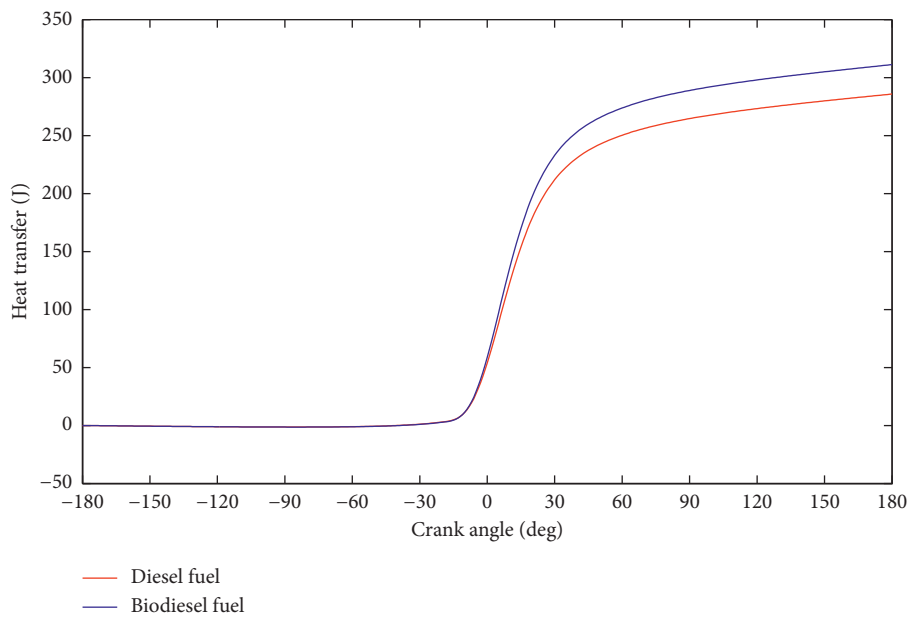


FIGURE 6: Heat transfer comparison of biodiesel and diesel fuels.

unburned gas is quite uniform in temperature, but the burned gas is not. Due to the progressive burning, a temperature gradient develops in the burned gas. The in-cylinder temperature evolution depends on the oxygen percentage of the fuel, which is why the biodiesel fuel with higher oxygen content than diesel fuel experiences complete combustion, leading to a higher peak and exhaust gas temperature. A higher cetane number decreases the pre-mixing time. Contents which are not burned in the most important combustion phase continue to burn in the late combustion phase indicating the higher heat release rate curve of biodiesel fuels. This can be another reason that the

biodiesel fuel has a higher exhaust gas temperature than diesel fuel. It is seen from Figure 8 that the influence of the cetane number and oxygen concentration on temperature are more dominant than the one of lower heating value and latent heat of vaporization on account of raising peak combustion temperature in the engine combustion chamber. The cylinder temperature is higher due to the higher cetane number of the biodiesel fuel than of diesel fuel. The maximum temperature for biodiesel is 2350 K, whereas for diesel fuel, the combustion temperature is 2300 K.

Figures 9–11 illustrate the adiabatic flame temperatures with respect to steam injection ratios. It is clearly observed

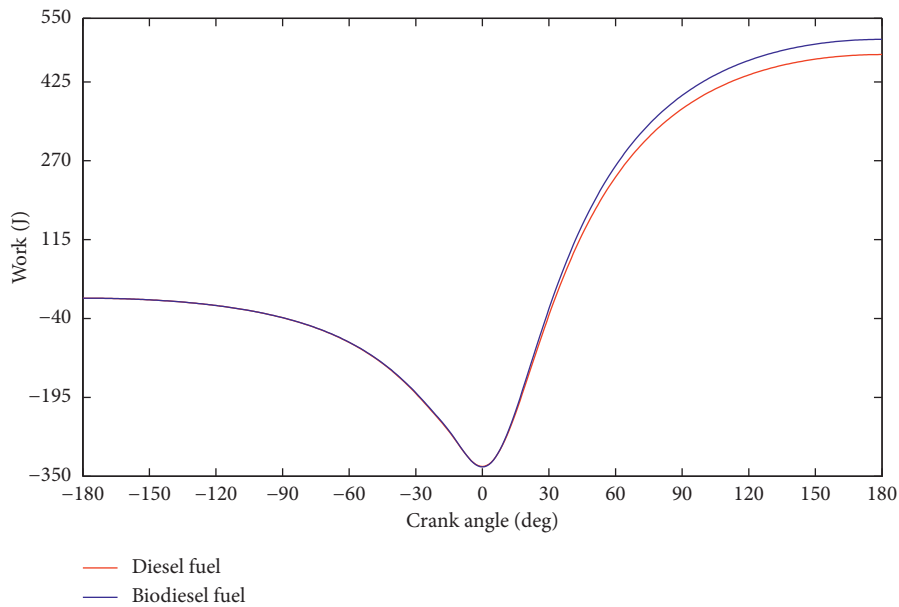


FIGURE 7: Work comparison of biodiesel and diesel fuels.

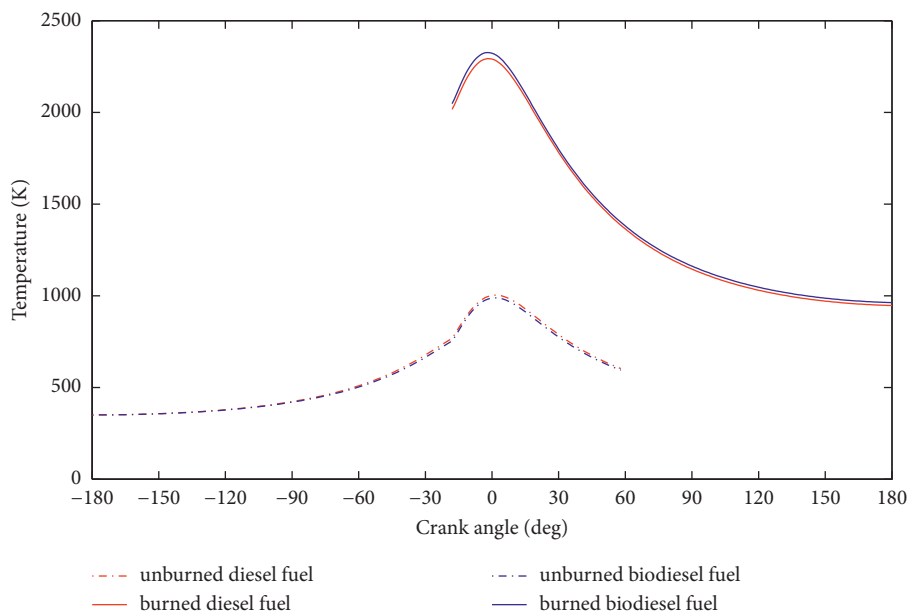


FIGURE 8: Temperature comparison of biodiesel and diesel fuels.

that the adiabatic flame temperatures of the diesel fuel are higher than the ones of the biodiesel fuel under these combustion conditions. The diesel fuel has the maximum flame temperatures under these combustion conditions. As may be seen from the figures, steam reduces the adiabatic flame temperatures, as the heat capacity of the steam is greater than the ones of the other combustion products.

Increased NO emission is resulted with diesel fuel because of the stoichiometric adiabatic flame temperature of diesel fuel which is higher than the one of biodiesel fuel as illustrated in Figure 10. The effect of steam injection on the combustion of biodiesel and diesel fuels is that the formation of the combustion products such as CO_2 , N_2 , O_2 , CO , H , O ,

OH , and NO is decreased and the specific heat increases as steam injection increases [32]. Therefore, the steam injection method can reduce the exhaust NO emission while the engine performance increases.

Figure 12 shows the temperature-time history of the first element to burn. At the time an element burns, its nitric oxide concentration is close to zero but finite because of the residual gas present. Since the chemistry is not fast enough to assume the process is quasi-static, it is rate controlled. Once the element is burned, the equilibrium concentration is high, whereas the nonequilibrium concentration is low. Each element tries to equilibrate; if the equilibrium concentration is higher than the nonequilibrium concentration, then nitric

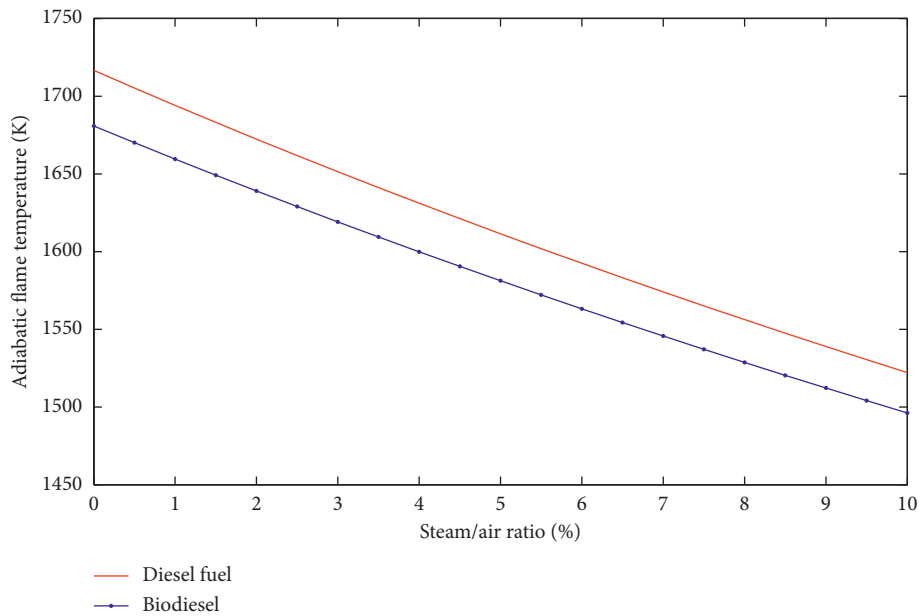


FIGURE 9: Adiabatic flame temperature comparison of biodiesel and diesel fuels at $\phi = 0.6$.

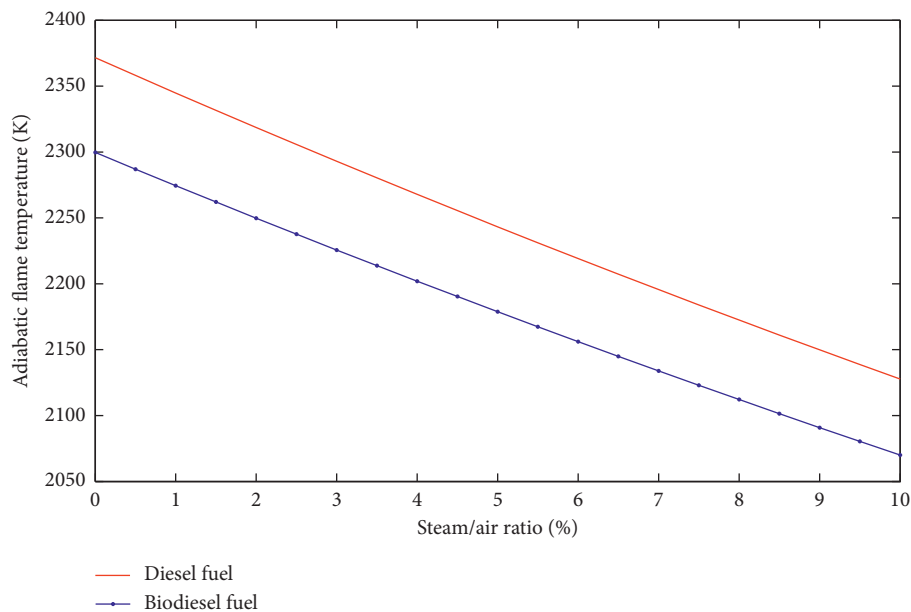


FIGURE 10: Adiabatic flame temperature comparison of biodiesel and diesel fuels at $\phi = 1.0$.

oxides tend to form, whereas they tend to decompose if the equilibrium concentration is less than the nonequilibrium concentration.

The chemical reaction rates increase strongly with temperature. As a result, there are large differences between the nitric oxide concentrations in the first and last elements. Furthermore, it can be seen that when the temperatures drop to about 2000 K, the decomposition rate becomes very slow and it may be said that the nitric oxides freeze at a concentration greater than the equilibrium concentration values. The total amount of nitric oxide that appears in the exhaust is computed by summing the frozen mass fractions for all the fluid

elements. The comparison of the calculated and experimental nitric oxide concentration values at the exhaust for the two fuels shows a highly satisfactory coincidence. The calculated and measured nitric oxide concentration values of biodiesel fuel are 927.7 ppm and 954.4 ppm, respectively. Also, the computed and experimental nitric oxide concentration values of diesel fuel are 1004.4 ppm and 1019.4 ppm, respectively.

It is well known that the NO formation rate strongly depends on peak temperature and duration of combustion at peak temperature in the cylinder. Thus, when the steam injection is performed, peak temperatures decreased compared to the ones without steam injection.

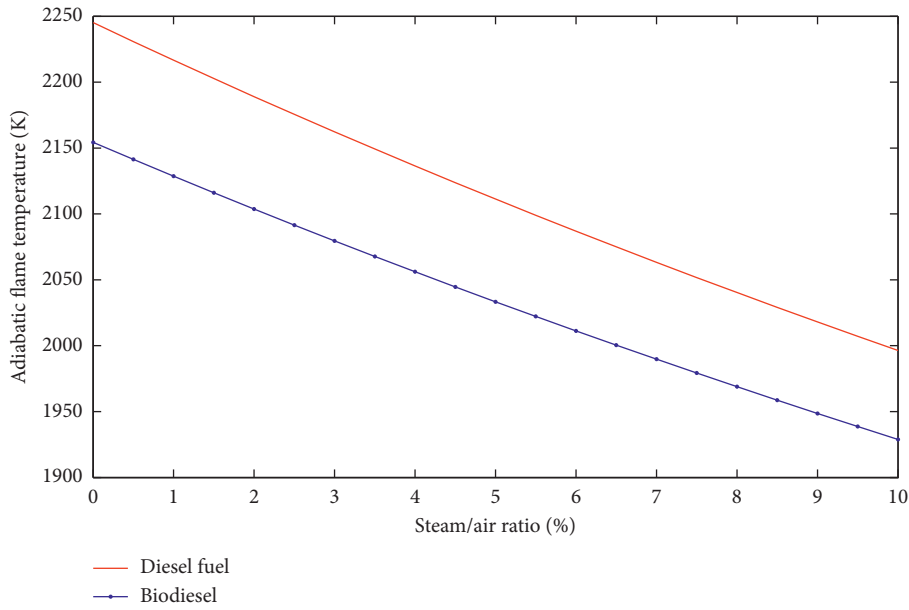


FIGURE 11: Adiabatic flame temperature comparison of biodiesel and diesel fuels at $\phi = 1.2$.

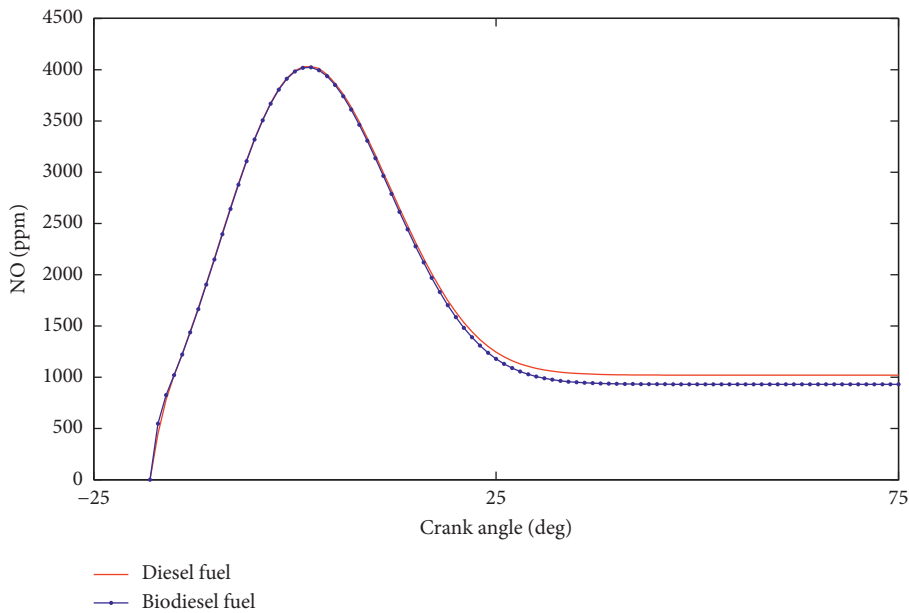


FIGURE 12: NO concentration comparison of biodiesel and diesel fuels.

4. Conclusion

In this study, the combustion characteristics and NO formation characteristics of a compression ignition engine fuelled with biodiesel and diesel fuels have been simulated by using a two-zone thermodynamic combustion model. The equilibrium combustion model is used to provide mole fractions of combustion products. The results of biodiesel fuel are compared with the ones of diesel fuel in this study. The results obtained from biodiesel fuel are compared with the ones of diesel fuel in terms of performance, adiabatic flame temperatures, and NO emissions. The results showed that the steam injection method could decrease NO_x

emissions and improve the engine performances. The calculated and experimental nitric oxide concentration values of diesel fuel were very well matched. The highly satisfactory coincidences observed strengthened the belief that the model worked correctly.

Abbreviations

- EGR: Exhaust gas recirculation
- BSFC: Brake-specific fuel consumption
- CN: Cetane number
- c_p : Constant pressure specific heat, kJ.kg^{-1}
- c_v : Constant volume specific heat, kJ.kg^{-1}

BTE:	Brake thermal efficiency
FA _s :	Stoichiometric fuel/air ratio by mass
h:	Specific enthalpy, kJ.kg ⁻¹
HCCI:	Homogeneous charge compression ignition
LHV:	Lower heating value
p:	Pressure, Pa
ppm:	Parts per million
RGF:	Residual gas fraction
rpm:	Revolutions per minute
s:	Specific entropy, kJ.kg ⁻¹ .K ⁻¹
T:	Temperature, K
u:	Specific internal energy, kJ.kg ⁻¹
v:	Specific volume, m ³ .kg ⁻¹
x:	Mass fraction burned.
φ:	Equivalence ratio
ω:	Angular velocity.
a:	Air
b:	Burned
f:	Fuel
l:	Leak
st:	Stoichiometric
u:	Unburned.

Data Availability

No data were used in this research except the experimental pressure data for biodiesel fuel and diesel fuel provided. The authors carried out computational simulation to obtain the results of the research.

Conflicts of Interest

The authors declare that they have no conflicts of interest.

Acknowledgments

The authors would like to sincerely thank Dr. Merlin Ayissi for providing the experimental pressure data for biodiesel fuel and diesel fuel.

References

- [1] S.-Y. No, "Inedible vegetable oils and their derivatives for alternative diesel fuels in CI engines: a review," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 15, no. 1, pp. 131–149, 2011.
- [2] A. K. Agarwal, "Biofuels (alcohols and biodiesel) applications as fuels for internal combustion engines," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 33, no. 3, pp. 233–271, 2007.
- [3] E. Abu-Nada, I. Al-Hinti, A. Al-Sarkhi, and B. Akash, "Thermodynamic modeling of spark-ignition engine: effect of temperature dependent specific heats," *International Communications in Heat and Mass Transfer*, vol. 33, no. 10, pp. 1264–1272, 2006.
- [4] E. Abu-Nada, I. Al-Hinti, B. Akash, and A. Al-Sarkhi, "Thermodynamic analysis of spark-ignition engine using a gas mixture model for the working fluid," *International Journal of Energy Research*, vol. 31, no. 11, pp. 1031–1046, 2007.
- [5] E. Abu-Nada, I. Al-Hinti, A. Al-Sarkhi, and B. Akash, "Effect of piston friction on the performance of SI engine: a new thermodynamic approach," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 130, no. 2, pp. 022802–22811, 2008.
- [6] E. Abu-Nada, B. Akash, I. Al-Hinti, and A. Al-Sarkhi, "Performance of a spark ignition engine under the effect of friction using a gas mixture model," *Journal of the Energy Institute*, vol. 82, no. 4, pp. 197–205, 2009.
- [7] L. Chen, C. Wu, F. Sun, and S. Cao, "Heat transfer effects on the net work output and efficiency characteristics for an air-standard Otto cycle," *Energy Conversion and Management*, vol. 39, no. 7, pp. 643–648, 1998.
- [8] A. Parlak, "Comparative performance analysis of irreversible dual and diesel cycles under maximum power conditions," *Energy Conversion and Management*, vol. 46, no. 3, pp. 351–359, 2005.
- [9] S.-S. Hou, "Heat transfer effects on the performance of an air standard dual cycle," *Energy Conversion and Management*, vol. 45, no. 18-19, pp. 3003–3015, 2004.
- [10] O. A. Ozsoysal, "Heat loss as a percentage of fuel's energy in air standard Otto and Diesel cycles," *Energy Conversion and Management*, vol. 47, no. 7-8, pp. 1051–1062, 2006.
- [11] J. Zheng and J. A. Caton, "Use of a single-zone thermodynamic model with detailed chemistry to study a natural gas fueled homogeneous charge compression ignition engine," *Energy Conversion and Management*, vol. 53, no. 1, pp. 298–304, 2012.
- [12] H. Xu, F. Liu, and Z. Wang, "A detailed numerical study of NOx kinetics in counterflow Methane diffusion flames: effects of fuel-side versus oxidizer-side dilution," *Journal of Combustion*, vol. 2021, Article ID 6642734, 15 pages, 2021.
- [13] V. Dhana Raju, H. Venu, and L. Subramanic, "An experimental assessment of prospective oxygenated additives on the diverse characteristics of diesel engine powered with waste tamarind biodiesel," *Energy*, vol. 203, p. 117821, 2020.
- [14] V. Dhana Raju, P. S. Kishore, K. Nanthagopal, and B. B. Ashok, "An experimental study on the effect of nanoparticles with novel tamarind seed methyl ester for diesel engine applications," *Energy Conversion and Management*, vol. 164, pp. 655–666, 2018.
- [15] Ö. Can, İ. Çelikten, and N. Usta, "Effects of ethanol addition on performance and emissions of a turbocharged indirect injection diesel engine running at different injection pressures," *Energy Conversion and Management*, vol. 45, no. 15-16, pp. 2429–2440, 2004.
- [16] C. Sayin, "Engine performance and exhaust gas emissions of methanol and ethanol–diesel blends," *Fuel*, vol. 89, p. 34105, 2010.
- [17] C. Sayin and M. Canakci, "Effects of injection timing on the engine performance and exhaust emissions of a dual-fuel diesel engine," *Energy Conversion and Management*, vol. 50, no. 1, pp. 203–213, 2009.
- [18] J. Huang, Y. Wang, S. Li, A. P. Roskilly, Y. Hongdong, and H. Li, "Experimental investigation on the performance and emissions of a diesel engine fuelled with ethanol–diesel blends," *Applied Thermal Engineering*, vol. 29, no. 11–12, pp. 2484–2490, 2009.
- [19] C. D. Rakopoulos, K. A. Antonopoulos, and D. C. Rakopoulos, "Experimental heat release analysis and emissions of a HSDI diesel engine fueled with ethanol–diesel fuel blends," *Energy*, vol. 32, no. 10, pp. 1791–1808, 2007.
- [20] E. A. Ajav, B. Singh, and T. K. Bhattacharya, "Experimental study of some performance parameters of a constant speed stationary diesel engine using ethanol–diesel blends as fuel," *Biomass and Bioenergy*, vol. 17, no. 4, pp. 357–365, 1999.
- [21] D.-g. Li, H. Zhen, L. Xingcai, Z. Wu-gao, and Y. Jian-guang, "Physico-chemical properties of ethanol–diesel blend fuel and

- its effect on performance and emissions of diesel engines,” *Renewable Energy*, vol. 30, no. 6, pp. 967–976, 2005.
- [22] A. Bilgin, O. Durgun, and Z. Sahin, “The effects of diesel-ethanol blends on diesel engine performance,” *Energy Sources*, vol. 24, no. 5, pp. 431–440, 2002.
- [23] M. Y. E. Selim, “Effect of exhaust gas recirculation on some combustion characteristics of dual fuel engine,” *Energy Conversion and Management*, vol. 44, no. 5, pp. 707–721, 2003.
- [24] G. H. Abd-Alla, H. A. Soliman, O. A. Badr, and M. F. Abd-Rabbo, “Effects of diluent admissions and intake air temperature in exhaust gas recirculation on the emissions of an indirect injection dual fuel engine,” *Energy Conversion and Management*, vol. 42, no. 8, pp. 1033–1045, 2001.
- [25] N. Samec, K. Breda, and R. W. Dibble, “Numerical and experimental study of water/oil emulsified fuel combustion in a diesel engine,” *Fuel*, vol. 81, no. 16, pp. 2035–2044, 2002.
- [26] F. Bedford, C. Rutland, P. Dittrich, A. Raab, and F. Wirbelit: Effects of Direct Water Injection on DI Diesel Engine Combustion.
- [27] G. Gonca, B. Sahin, Y. Ust, A. Parlak, and A. Safa, “Comparison of steam injected diesel engine and miller cycled diesel engine by using two-zone combustion or two zone combustion instead of two zone combustion,” *International Symposium on Combustion*, vol. 16, pp. 115–125, 2012.
- [28] A. Parlak, V. Ayhan, Y. Üst et al., “New method to reduce NOx emissions of diesel engines: electronically controlled steam injection system,” *Journal of the Energy Institute*, vol. 85, no. 3, pp. 135–139, 2012.
- [29] İ. Cesur, A. Parlak, V. Ayhan, B. Boru, and G. Gonca, “The effects of electronic controlled steam injection on spark ignition engine,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 55, no. 1–2, pp. 61–68, 2013.
- [30] G. Kökkülünk, G. Gonca, V. Ayhan, İ. Cesur, and A. Parlak, “Theoretical and experimental investigation of diesel engine with steam injection system on performance and emission parameters,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 54, no. 1, pp. 161–170, 2013.
- [31] B. W. Millington and E. R. Hartles, *Frictional Losses in Diesel Engines*, SAE Paper, Warrendale, PA, USA, no. 680590, 1968.
- [32] K. Görkem, G. Gonca, V. Ayhan, İ. Cesur, and Adnan Parlak, “Theoretical and experimental investigation of diesel engine with steam injection system on performance and emission parameters,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 54, pp. 161–170, 2013.
- [33] G. A. Lavoie, J. B. Heywood, and J. C. Keck, “Experimental and theoretical study of nitric oxide formation in internal combustion engines,” *Combustion Science and Technology*, vol. 1, no. 4, pp. 313–326, 1970.
- [34] J. P. G. Shou, M. Obounou, T. C. Kofané, and M. H. Babikir, “Investigation of the effects of steam injection on equilibrium products and thermodynamic properties of diesel and biodiesel fuels,” *Journal of Combustion*, vol. 2020, Article ID 2805125, 14 pages, 2020.

Research Article

Investigation of the Effects of Steam Injection on Equilibrium Products and Thermodynamic Properties of Diesel and Biodiesel Fuels

Jean Paul Gram Shou ¹, Marcel Obounou,¹ Timoléon Crépin Kofané,²
and Mahamat Hassane Babikir¹

¹Laboratory of Energy and Electronics and Electrical Systems, Department of Physics, Faculty of Science, University of Yaoundé I, Yaoundé, P.O. Box: 812, Cameroon

²Laboratory of Mechanics, Materials and Structures, Department of Physics, Faculty of Science, University of Yaoundé I, Yaoundé, P.O. Box: 812, Cameroon

Correspondence should be addressed to Jean Paul Gram Shou; jpgram1085s@yahoo.fr

Received 23 December 2019; Revised 14 May 2020; Accepted 1 August 2020; Published 3 September 2020

Academic Editor: Thanos Megaritis

Copyright © 2020 Jean Paul Gram Shou et al. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

The effects of steam injection on combustion products and thermodynamic properties of diesel fuel, soybean oil-based biodiesel (NBD), and waste cooking oil biodiesel (WCOB) are examined in this study by considering the chemical equilibrium. The model gives equilibrium mole fractions, specific heat of the exhaust mixtures of 10 combustion products, and adiabatic flame temperatures. The results show that the mole fractions of carbon monoxide (CO) and carbon dioxide (CO₂) decrease with the steam injection ratios. Nitric oxide (NO) mole fractions decrease with the steam injection ratios for lean mixtures. The specific heat of combustion products increases with the steam injection ratios. The equilibrium combustion products obtained can be used to calculate the nonequilibrium values of NO in the exhaust gases using some existing correlations of NO kinetics.

1. Introduction

Fossil-based fuels derived from crude oil are the main sources of energy for internal combustion engines worldwide in general and in Cameroon in particular. However, combustion in internal combustion engines is a major source of pollutant emissions. More severe environmental restrictions have been put into effect in many countries worldwide due to the growing concern about environmental issues. In addition, the use of fossil-based fuels is still dominant in almost all internal combustion engines despite the fact that the resources of the fossil-based fuels are depleting rapidly. Thus, researchers carry out studies on combustion in internal combustion engines and alternative fuels. In this regard, biodiesel could be considered as an alternative fuel to fossil diesel to meet the growing fuel demand and the severe environmental norms. Biodiesel is

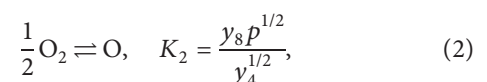
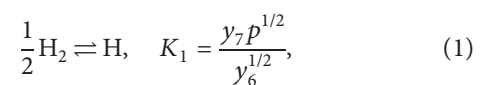
produced from wider feedstock by transesterification, microemulsion, dilution, and pyrolysis. Rapeseed, soybean, and palm oils have been largely preferred as edible raw materials for the production of biodiesel worldwide [1]. Biodiesel has gained prominence as an attractive fuel because it is biodegradable, nontoxic, environmentally friendly, and free from sulfur and aromatic contents [2]. The diesel engine operating with biodiesel can decrease carbon monoxide (CO), hydrocarbons (HC), and smoke emissions while increasing nitrogen oxides (NO_x) [3–5]. The biodiesel properties are very close to the ones of diesel. However, the shortcomings of biodiesel are higher viscosity, density, cetane number, flash point, poor low-temperature properties and lower volatility, energy content, and oxidative and storage stability in comparison to the diesel fuel [6]. Higher cloud point and pour point, higher nitrogen oxide emissions, injector coking, engine compatibility, and higher

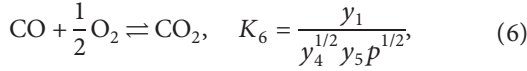
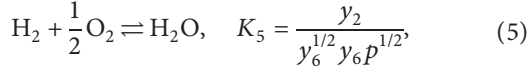
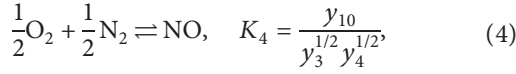
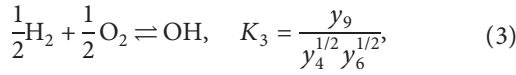
engine wear are also the shortcomings of biodiesel which affect the combustion characteristics [7]. The poor low-temperature properties of biodiesel are an obstacle to its utilization in cold weather conditions [8]. The differences in chemical properties of fuels affect the combustion process development, which lead to the alteration of performance and emissions of engine [9]. Biodiesels are formed from many different classes of saturated and unsaturated fatty acids, which form their physical and chemical properties [10]. Higher viscosity results in higher spray penetration into the combustion chamber, which is very important to enhance air-fuel mixing quality especially for big and slow engines with large open combustion chambers, but there are more adverse impacts for small and fast engines such as poor fuel atomization, larger droplet size, bad mixing quality, incomplete combustion, and lower combustion efficiency, which contribute to decreasing the engine performance and increasing the exhaust emissions [11]. Biodiesel combustion is difficult to model because of the diversity of its sources and complexity in molecular structure [12–16]. Chemical equilibrium model is a better estimation for a combustion model assuming that the combustion products are at a chemical equilibrium in a high-temperature combustion. The combustion products react together to produce and remove each species at equal rates, and consequently, the net change in species composition remains constant at a given condition [17]. Chemical equilibrium models are used in thermodynamic simulations of internal combustion engines [18]. A simple model including only six species of the products, namely, carbon dioxide (CO₂), water (H₂O), nitrogen (N₂), oxide (O₂), carbon monoxide (CO), and hydrogen (H₂), has been defined by Heywood [19]. Gonca [20] investigated the effects of steam injection on performance and nitric oxide (NO) emissions of a diesel engine running with ethanol-diesel blend. In his study, various ethanol-diesel blends were evaluated depending on the steam/air ratios by means of constituted solving schema based on chemical equilibrium. Ngayihi Abbe et al. [21] carried out a numerical study to compare four biodiesel surrogates using a zero-dimensional thermodynamic model involving a chemical equilibrium combustion model. A chemical equilibrium model was used by Ust and Kayadelen [22]. In their study, 10 combustion products were used to predict the equilibrium and thermodynamic properties in an H₂O injected combustion system at various H₂O rates. They neglected the CO and H₂ formations in lean mixtures. They formed their equation systems for lean and rich mixtures separately. Rakopoulos et al. [23] performed a two-zone thermodynamic model for combustion and emissions formation in a direct injection diesel engine. They used a chemical equilibrium scheme involving 11 species of combustion products for calculating the constituents in exhaust gases. Diotallevi [24] developed a multi-zone thermodynamic model of a diesel engine for NO_x formation. He created a chemical equilibrium scheme by considering 10 combustion products. The nonlinear system of equations created was solved using an iterative method developed by the author using the Matlab program. Mourya and Roy [25] performed a study on the combustion modelling of a diesel engine operating using jatropa biodiesel

and diesel engine blends according to a chemical equilibrium model. The C program and Mathematica software developed by the authors were used to solve their equations. Kayadelen [26] developed a multi-featured model for estimation of the mole fractions of 14 equilibrium combustion products, thermodynamic properties and constant-pressure adiabatic flame temperature of fuels, surrogates, and fuel additives. He constituted his equation systems for lean and rich mixtures separately. CO and H₂ mole fractions were neglected in lean mixtures. The nonlinear equation systems were solved using both Newton-Raphson and Gauss-Seidel methods. Some equilibrium computer programs exist like GASEQ [27] and Chemical Equilibrium with Applications (CEA) of NASA [28]. However, GASEQ software neglects the effects of dissociations on the specific heat of the combustion products. Consequently, noticeable errors may result in engine performance calculations. On the other hand, CEA of NASA necessitates adiabatic flame temperature or enthalpy of combustion to be given. Important differences are reported between the specific heat results of GASEQ and CEA of NASA particularly at high temperatures. In literature, there is a lack of studies carried out on the effects of steam injection on equilibrium products and thermodynamic properties of diesel and biodiesel fuels. Nevertheless, the equilibrium combustion products can be used to calculate the nonequilibrium NO emissions in exhaust gases. The present model takes into account the effect of combustion products dissociations with temperature on specific heat of the gas mixture. The adiabatic flame temperature or combustion enthalpy is not needed as an input, but they can be calculated by the model. The main purpose of the present study is to investigate the effects of steam injection on equilibrium products and thermodynamic properties of diesel fuel, soybean oil-based biodiesel (NBD), and waste cooking oil biodiesel (WCOB). For this purpose, the solving schema of the combustion model based on a chemical equilibrium was developed for diesel and biodiesel fuels. The nonlinear system of equations is solved using Newton-Raphson and Gauss-Seidel methods. The diesel and biodiesel with chemical formulae C_{14.09}H_{24.78} [29], C_{18.74}H_{34.43}O₂ [29], and C₁₈H₃₆O₂ [30] were used in this study to represent diesel fuel, soybean oil-based biodiesel (NBD), and waste cooking oil biodiesel (WCOBD), respectively.

2. Theoretical Equilibrium Combustion Products Model

2.1. Equilibrium Combustion Products. The combustion products are supposed to consist of ten species which are all assumed as ideal gases and they are defined by dissociation considerations as follows [31]:





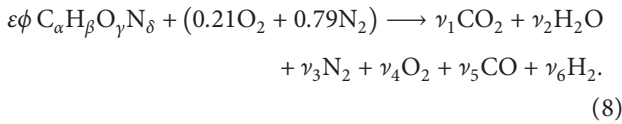
where the unit of pressure p is atmospheres and K_1 to K_6 are the equilibrium constants of the reactions. Olikara and Borman [32] have curve-fitted the equilibrium constants K_i to tabulated JANAF thermochemical tables for the temperatures between 600 K and 4000 K and its values are calculated by using

$$\log K_i = A_i \ln\left(\frac{T}{1000}\right) + \frac{B_i}{T} + C_i + D_i T + E_i T^2, \quad (7)$$

where the equilibrium constant curve-fit coefficients A_i , B_i , C_i , D_i , and E_i are listed in Table 1 and presented by Ferguson [31].

2.2. Equilibrium Combustion Model

2.2.1. Low-Temperature Products. At low temperatures ($T < 1000$ K) and for α/γ ratios less than one, the overall chemical reaction, which describes the combustion ($\phi < 3$) is given, as follows:



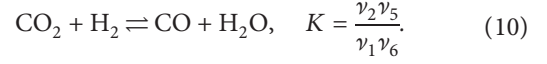
For the lean and stoichiometric combustion, it is assumed that there would be enough oxygen to oxidize all CO and H_2 and that means CO and H_2 are negligible. It can be noticed that the equilibrium composition is independent from temperature and pressure. It only depends on equivalence ratio ϕ . The product composition is determined using atom balance equations. Products of wet combustion for the low temperature are given in Table 2. For the rich case, it is assumed that there is insufficient oxygen to oxidize all CO and H_2 , which means all the oxygen is consumed.

When writing atom balances, five unknowns and four equations are found. One more equation (10) is used and it depends on the equilibrium constant for the water-gas reaction given by Ferguson [31] for the range of temperatures between 400 K and 3200 K:

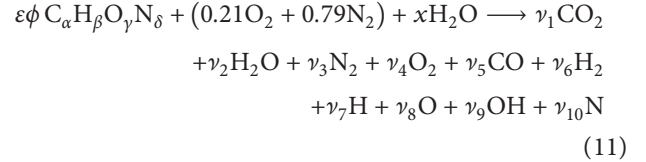
$$\ln K = 2.743 - \frac{1.761}{t} - \frac{1.611}{t^2} + \frac{0.2803}{t^3}, \quad (9)$$

where $t = T/1000$.

The equilibrium constant at constant pressure K of the water-gas reaction is expressed as follows:



2.2.2. High-Temperature Products. At higher temperatures ($T \geq 1000$ K) and for α/γ ratios less than one, the overall chemical reaction, which describes the combustion ($\phi < 3$), is given as follows:



where ν_i denotes the number of moles for each product, and α , β , γ , and δ represent the atom numbers of carbon, hydrogen, oxygen, and nitrogen in the used fuel, respectively. For diesel fuel, γ and δ are zeroes. When the product mole fraction composition is known at a given temperature, equivalence ratio, and pressure, the thermodynamic properties of interest such as enthalpy, entropy, specific volume, and internal energy can be computed.

The atom balance for various elements in equation (11), the constraint that the mole fraction of all the products adds up to one, the unknown total product moles N , and the six dissociation equations (1)–(6) provided by the criteria of equilibrium among combustion products yield 11 equations for 11 unknowns, namely, unknown mole fractions y_i and unknown total product moles N . After writing the mole fractions of the other combustion species with respect to the mole fractions of four independent variables y_3 , y_4 , y_5 , and y_6 , the following nonlinear equations are obtained:

$$f_1 = C_6 y_4^{1/2} y_5 + C_5 y_4^{1/2} y_6 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 + C_1 y_6^{1/2} + C_2 y_4^{1/2} + C_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} + C_4 y_3^{1/2} y_4^{1/2} - 1 = 0, \quad (12)$$

$$f_2 = 2C_5 y_4^{1/2} y_6 + 2y_6 + C_1 y_6^{1/2} + C_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} - d_1 (C_6 y_4^{1/2} y_5 + y_5) = 0, \quad (13)$$

$$f_3 = 2C_6 y_4^{1/2} y_5 + C_5 y_4^{1/2} y_6 + 2y_4 + y_5 + C_2 y_4^{1/2} + C_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} + C_4 y_3^{1/2} y_4^{1/2} - d_2 (C_6 y_4^{1/2} y_5 + y_5) = 0, \quad (14)$$

$$f_4 = 2y_3 + C_4 y_3^{1/2} y_4^{1/2} - d_3 (C_6 y_4^{1/2} y_5 + y_5) = 0, \quad (15)$$

$$C_1 = \frac{K_1}{p^{1/2}}, \quad (16)$$

$$C_2 = \frac{K_2}{p^{1/2}}, \quad (17)$$

$$C_3 = K_3. \quad (18)$$

TABLE 1: Olikara and Borman equilibrium constant curve-fit coefficients.

i	A_i	B_i	C_i	D_i	E_i
1	0.432168	-0.112464×10^5	0.267269×10^1	-0.745744×10^{-4}	0.242484×10^{-8}
2	0.310805	-0.129540×10^5	0.321779×10^1	-0.738336×10^{-4}	0.344645×10^{-8}
3	-0.141784	-0.213308×10^4	0.853461	0.355015×10^{-4}	-0.310227×10^{-8}
4	0.150879×10^{-1}	-0.470959×10^4	0.646096	0.272805×10^{-5}	-0.154444×10^{-8}
5	-0.752364	0.124210×10^5	-0.260286×10^1	0.259556×10^{-3}	-0.162687×10^{-7}
6	-0.415302×10^{-2}	0.148627×10^5	-0.475746×10^1	0.124699×10^{-3}	-0.900227×10^{-8}

TABLE 2: Products of wet combustion for $T < 1000$ K.

i	Species	$\phi \leq 1$	$\phi > 1$
1	CO ₂	$\alpha\phi\varepsilon$	$\alpha\phi\varepsilon - \nu_5$
2	H ₂ O	$\beta\phi\varepsilon + x$	$\phi\varepsilon(\gamma - 2\alpha) + 0.42 + \nu_5$
3	N ₂	$0.79 + \delta\phi\varepsilon/2$	$0.79 + \delta\phi\varepsilon/2$
4	O ₂	$0.21(1 - \phi)$	0
5	CO	0	N ₅
6	H ₂	0	$0.42(\phi - 1) - \nu_5$

$$C_4 = K_4, \quad (19)$$

$$C_5 = K_5 p^{1/2}, \quad (20)$$

$$C_6 = K_6 p^{1/2}, \quad (21)$$

$$d_1 = \frac{\varepsilon\phi\beta + 2x}{\varepsilon\phi\alpha}, \quad (22)$$

$$d_2 = \frac{\varepsilon\phi\gamma + 0.42 + x}{\varepsilon\phi\alpha}, \quad (23)$$

$$d_3 = \frac{\varepsilon\phi\delta + 1.58}{\varepsilon\phi\alpha}. \quad (24)$$

The equivalence ratio ϕ and the molar fuel/air ratio ε are expressed as follows:

$$\phi = \frac{m_f/m_a}{(m_f/m_a)_s}, \quad (25)$$

$$\varepsilon = \frac{0.21}{\alpha - \gamma/2 + \beta/4}. \quad (26)$$

By letting $Y = (y_3, y_4, y_5, y_6)^T$ be the vector of the independent variables, $\delta Y = (\delta y_3, \delta y_4, \delta y_5, \delta y_6)^T$ the solution vector of the linear system, and F the vector containing the functions f_3, f_4, f_5 and f_6 , the system of nonlinear equations can be written in a single expression using vectors:

$$F(Y) = [f_3(Y), f_4(Y), f_5(Y), f_6(Y)] = 0. \quad (27)$$

The exact solution of the problem is $Y = Y^{(0)} + \delta Y^{(0)}$, which means

$$F(Y) = F(Y^{(0)} + \delta Y^{(0)}) = 0, \quad (28)$$

where $Y^{(0)}$ is a given rough initial guess for the solution. In the neighbourhoods of $Y^{(0)}$, the functions $f_i(Y)$ can be expanded in Taylor series and truncated after the first

derivative. We obtain a set of linear equations for the vector $\delta Y^{(0)}$ that move each value $f_i(Y^{(0)})$ closer to zero simultaneously:

$$\mathfrak{F}(Y^{(0)})\delta Y^{(0)} = -F(Y^{(0)}). \quad (29)$$

The Jacobian matrix \mathfrak{F} is expressed as

$$\mathfrak{F}(Y^{(0)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(Y^{(0)})}{\partial y_3} & \frac{\partial f_1(Y^{(0)})}{\partial y_4} & \dots & \frac{\partial f_1(Y^{(0)})}{\partial y_6} \\ \frac{\partial f_2(Y^{(0)})}{\partial y_3} & \frac{\partial f_2(Y^{(0)})}{\partial y_4} & \dots & \frac{\partial f_2(Y^{(0)})}{\partial y_6} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_4(Y^{(0)})}{\partial y_3} & \frac{\partial f_4(Y^{(0)})}{\partial y_4} & \dots & \frac{\partial f_4(Y^{(0)})}{\partial y_6} \end{pmatrix}. \quad (30)$$

The set of linear equations equation (29) is solved for $\delta Y^{(0)}$ using Gauss-Seidel iterative method. The new approximated solution is calculated as $Y^{(1)} = Y^{(0)} + \delta Y^{(0)}$.

If $Y^{(1)}$ does not approximate the solution to the given tolerance, successive approximations of the solution are obtained as follows:

$$\mathfrak{F}(Y^{(k)})\delta Y^{(k)} = -F(Y^{(k)}). \quad (31)$$

The procedure is repeated until $\delta Y^{(k)}$ reaches a specified tolerance which leads to the values for Y :

$$Y = Y^{(k)} + \delta Y^{(k)}. \quad (32)$$

The other dependent unknowns are expressed after determining the mole fractions y_3, y_4, y_5 , and y_6 as follows:

$$y_1 = C_6 y_4^{1/2} y_5, \quad (33)$$

$$y_2 = C_5 y_4^{1/2} y_6, \quad (34)$$

$$y_7 = C_1 y_6^{1/2}, \quad (35)$$

$$y_8 = C_2 y_4^{1/2}, \quad (36)$$

$$y_9 = C_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2}, \quad (37)$$

$$y_{10} = C_4 y_3^{1/2} y_4^{1/2}. \quad (38)$$

TABLE 3: Chemical and physical properties of test fuels.

Fuel properties	Diesel [30]	NBD [30]	WCOB
Density at 15°C (kg·m ⁻³)	853.7	881.4	865.19 [36]
Kinematic viscosity at 40°C (mm ² ·s ⁻¹)	2.8271	4.2691	3.5 [36]
LHV (kJ·kg ⁻¹)	42640	37388	37000 [31]
Oxygen (wt. %)	0.00	10.98	11.27
Cetane number	42.6	51.5	54 [31]
Chemical formula	C _{14.09} H _{24.78}	C _{18.74} H _{34.43} O ₂	C ₁₈ H ₃₆ O ₂ [31]

TABLE 4: Standard specifications for biodiesel.

Fuel properties	ASTM D6751	EN 14214 [36]
Density at 15°C (kg·m ⁻³)	880 [37]	860–900
Kinematic viscosity at 40°C (mm ² ·s ⁻¹)	1.9–6.0 [37]	3.5–5.0
Cetane number	Min. 47 [37]	Min. 51
Flash point (°C)	Min. 93 [37]	Min. 101
Sulfur % (mg/kg)	Max. 0.05 [30]	Max. 10
Oxidation stability at 110°C (hr)	Min. 3 [37]	Min. 6

TABLE 5: Comparison of the present model results with the ones obtained from CEA of NASA and GASEQ software for equilibrium combustion products of methane at $\phi = 0.6$ and steam injection 10%.

$\phi = 0.6$	Model results	GASEQ results	CEA results	GASEQ relative error (%)	CEA relative error (%)
CO ₂	0.051506	0.05154	0.05151	0.066	0.066
H ₂ O	0.233920	0.23399	0.23385	0.029	0.029
N ₂	0.645559	0.64553	0.64553	-0.005	-0.005
O ₂	0.068353	0.06827	0.06827	-0.122	-0.122
CO	1.328×10^{-7}	1.33×10^{-7}	3.27×10^{-7}	-0.157	-0.157
H ₂	2.419×10^{-7}	2.41×10^{-7}	2.41×10^{-7}	-0.360	-0.360
H	1.269×10^{-9}	1.27×10^{-9}	1.27×10^{-9}	0.03	0.03
O	1.506×10^{-7}	1.50×10^{-7}	1.50×10^{-7}	-0.429	-0.429
OH	3.263×10^{-5}	3.39×10^{-5}	3.39×10^{-5}	3.751	3.751
NO	6.278×10^{-4}	6.27×10^{-4}	6.27×10^{-4}	-0.126	-0.126
C_p (kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹)	1.46488	1.45383	1.45383	-0.76	-0.76
T_{in} (K)	300	300	300	0.000	0.000
T_{ad} (K)	1482.3	1482.3	1482.3	0.000	0.000

TABLE 6: Comparison of the present model results with the ones obtained from CEA of NASA and GASEQ software for equilibrium combustion products of methane at $\phi = 1.2$ and steam injection 10%.

$\phi = 1.2$	Model results	GASEQ results	CEA results	GASEQ relative error (%)	CEA relative error (%)
CO ₂	0.063729	0.06368	0.06368	-0.077	-0.077
H ₂ O	0.278173	0.27822	0.27822	0.017	0.017
N ₂	0.594799	0.59480	0.59480	0.00017	0.00017
O ₂	5.826×10^{-8}	5.78×10^{-8}	5.78×10^{-8}	-0.790	-0.790
CO	0.031138	0.03119	0.03119	0.168	0.168
H ₂	0.032106	0.03206	0.03206	-0.144	-0.144
H	2.988×10^{-5}	2.98×10^{-5}	2.98×10^{-5}	-0.260	-0.260
O	1.535×10^{-8}	1.53×10^{-8}	1.53×10^{-8}	-0.345	-0.345
OH	2.199×10^{-5}	2.95×10^{-6}	2.68×10^{-6}	2.679	2.57
NO	2.962×10^{-6}	2.95×10^{-6}	0.646096	-0.394	-0.394
C_p (kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹)	1.64592	1.63042	1.63042	-0.95	-0.95
T_{in} (K)	300	300	300	0.000	0.000
T_{ad} (K)	1919.3	1919.3	1919.3	0.000	0.000

2.3. *Thermodynamic Properties.* At constant pressure, temperature variation has an effect on specific heat due to the dissociations of species at a high temperature. The effect of

temperature on mole fractions should be considered during the equilibrium specific heat calculation differentiating with respect to temperature written as

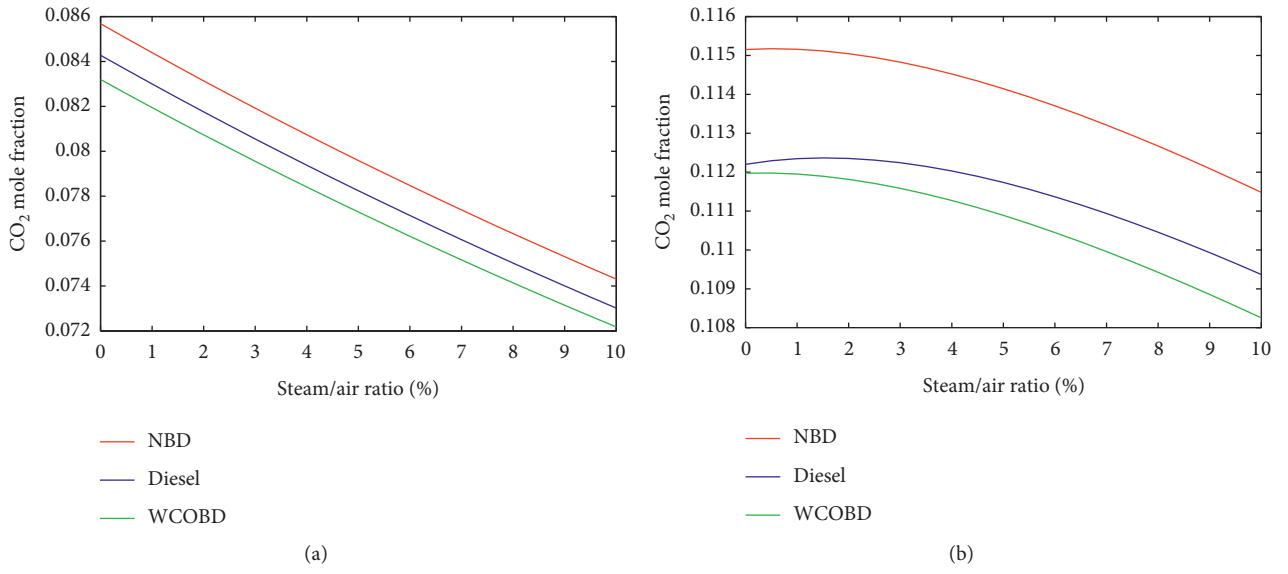


FIGURE 1: Variation of CO₂ equilibrium mole fractions with steam injection ratios.

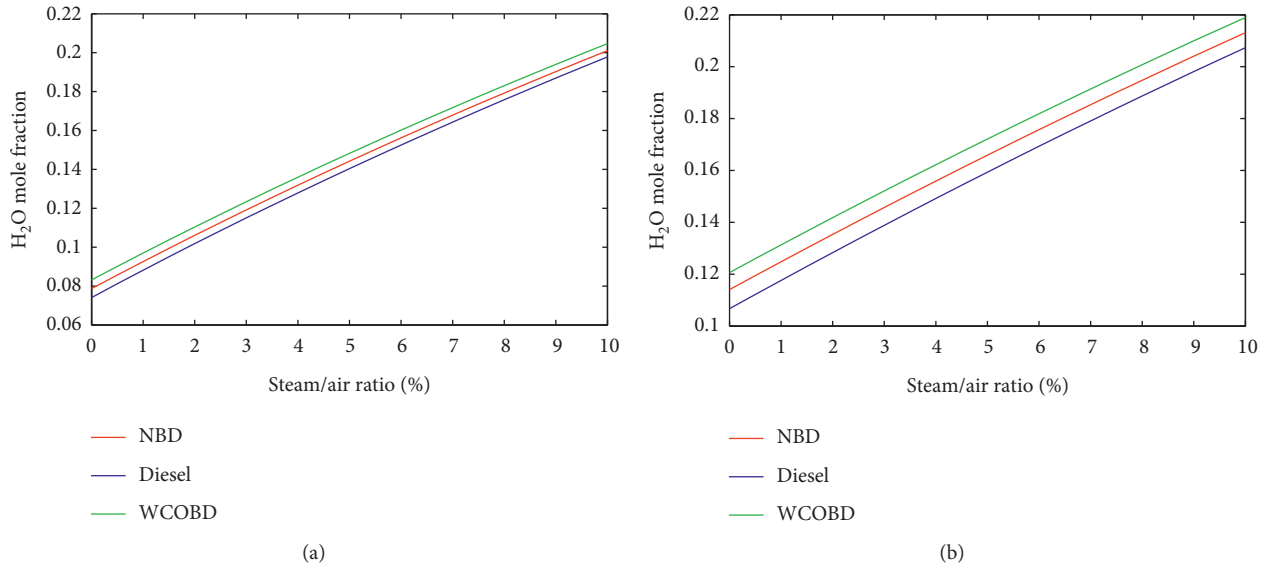


FIGURE 2: Variation of H₂O equilibrium mole fractions with steam injection ratios.

$$\mathfrak{F}(Y^{(k)})Y_T^k = -F_T(Y^{(k)}), \quad (39)$$

$$F_T = \frac{\partial F}{\partial T}, \quad (40)$$

$$Y_T = \frac{\partial Y}{\partial T}.$$

The same procedure is used to solve equation (39). The results are used in computing the specific heat of the gas mixture in equation (46).

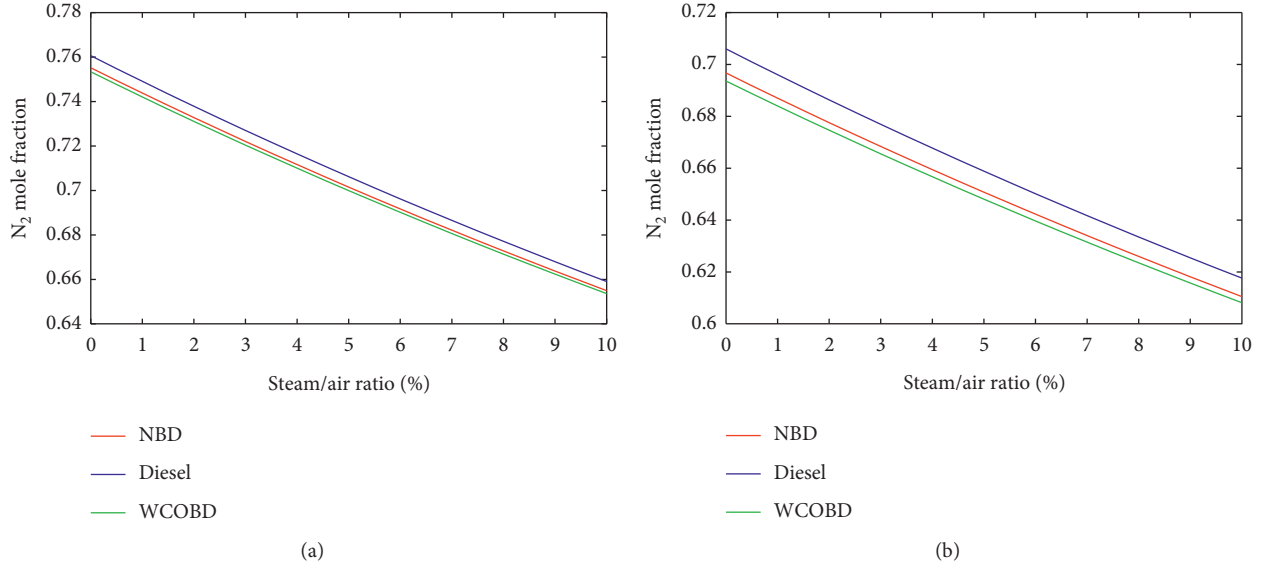
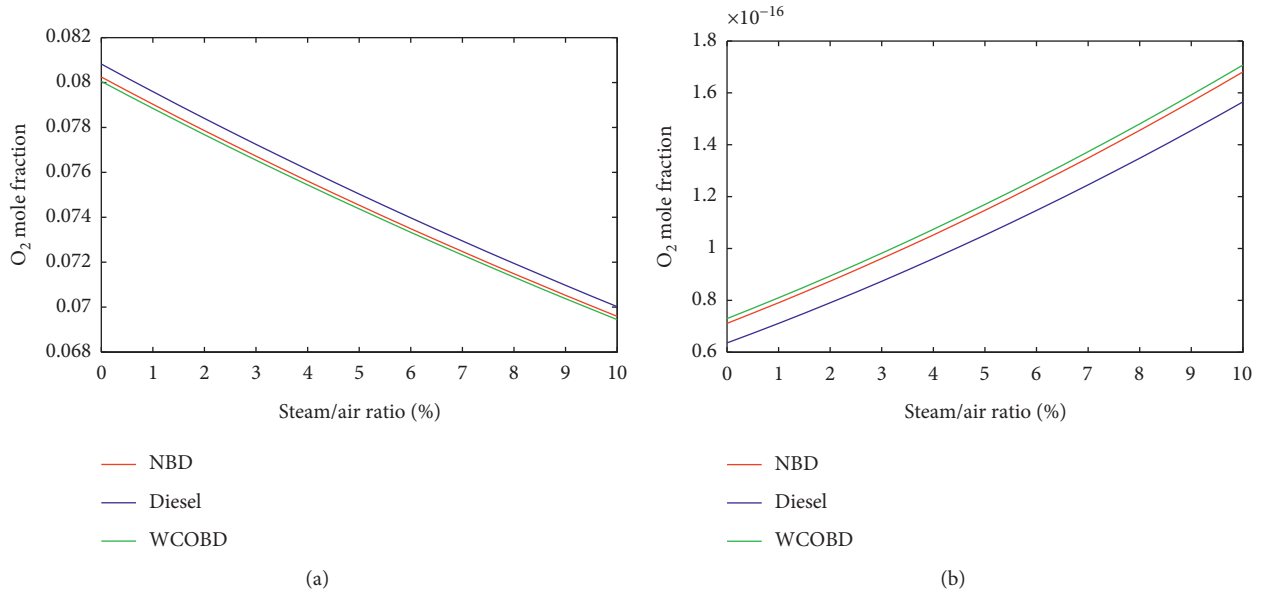
Gordon and McBride [33] proposed the expressions of molar specific heat at constant pressure $\bar{c}_{p,i}$, enthalpy \bar{h}_i and entropy \bar{s}_i^0 values of each species that were curve-fitted to the tabulated JANAF thermochemical tables [34].

At constant pressure, enthalpy of the gas mixture \bar{h} changes due to the dissociations because the mole fractions of the species change with temperature:

$$\bar{h} = \sum_{i=1}^{10} y_i \bar{h}_i, \quad (41)$$

$$\bar{s} = \sum_{i=1}^{10} R_u y_i \left(\frac{\bar{s}_i^0}{R_u} - \ln \left(\frac{y_i P}{P_0} \right) \right), \quad (42)$$

$$M = \sum_{i=1}^{10} y_i M_i, \quad (43)$$

FIGURE 3: Variation of N_2 equilibrium mole fractions with steam injection ratios.FIGURE 4: Variation of O_2 equilibrium mole fractions with steam injection ratios.

$$h = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{10} y_i \bar{h}_i, \quad (44)$$

$$s = \frac{R_u}{M} \sum_{i=1}^{10} y_i \left(\frac{\bar{s}_i^0}{R_u} - \ln \left(\frac{y_i P}{p_0} \right) \right), \quad (45)$$

$$c_p = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{10} \left(y_i \bar{c}_{p,i} + \bar{h}_i \frac{\partial y_i}{\partial T} - \frac{M_T}{M} y_i \bar{h}_i \right), \quad (46)$$

where $M_T = \partial M / \partial T = \sum_{i=1}^{10} M_i \partial y_i / \partial T$ and $c_p = (\partial h / \partial T)_p$.

2.4. Constant-Pressure Adiabatic Flame Temperature. The constant-pressure adiabatic flame temperature (T_{ad}) is calculated iteratively using (47). An initial temperature is required to determine the total enthalpy of reactants h_u :

$$T_{ad}^{i+1} = T_{ad}^i - \frac{h_u - h}{c_p}, \quad (47)$$

where h is the enthalpy of combustion products obtained by (44) and c_p is the specific heat of the combustion products obtained by (46).

For each iteration i , h and c_p are reevaluated until an acceptable prescribed tolerance is reached.

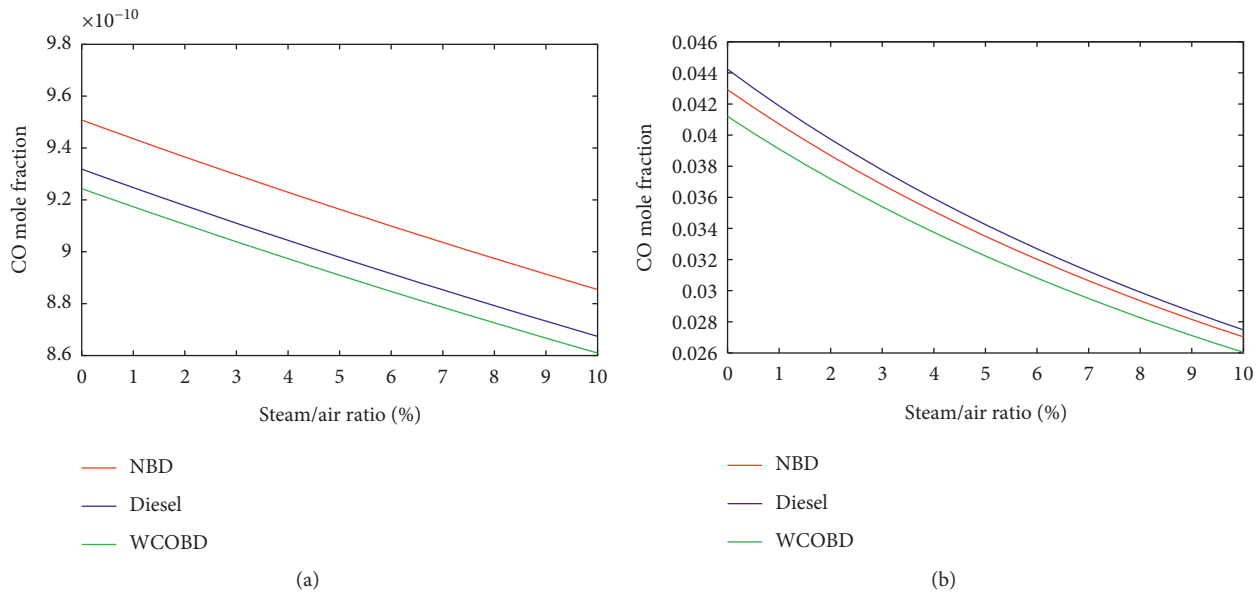


FIGURE 5: Variation of CO equilibrium mole fractions with steam injection ratios.

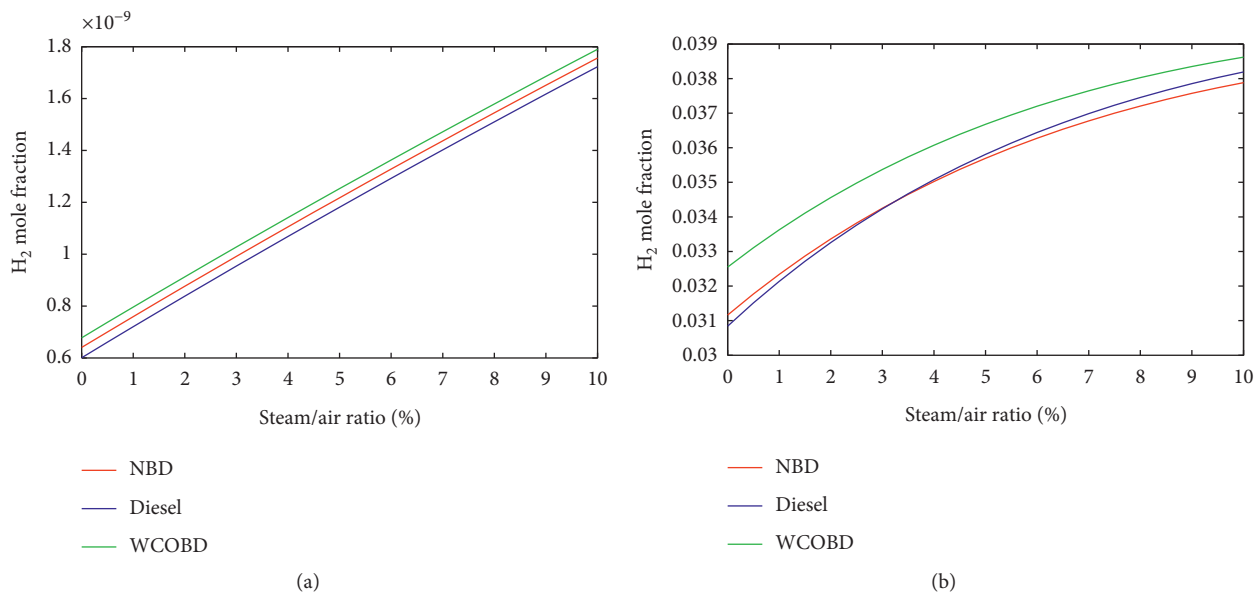


FIGURE 6: Variation of H_2 equilibrium mole fractions with steam injection ratios.

2.5. Fuel Properties and Standard Specifications. The physical and chemical properties of the fuels are presented in Table 3.

Standard specifications for biodiesel and diesel fuels are shown in Table 4 according to ASTM D6751 and EN 14214.

2.6. Validation of the Model. The validation of the model is done by comparing the model results with the ones of software CEA of NASA [28] and software GASEQ [27], which use element potential method and minimization of Gibbs free energy approach, respectively. The simulations

of methane with steam injection are carried out. The mole fraction of chemical equilibrium products and thermodynamic properties obtained with the model compared with the ones of software CEA of NASA and GASEQ at $\phi = 0.6$ with steam injection 10% are mentioned in Table 5 and at $\phi = 1.2$ with steam injection 10% are listed in Table 6.

3. Results and Discussion

3.1. Mole Fraction of Combustion Products. Adiabatic combustion simulation with steam has been carried out for the biodiesel and the diesel fuels in order to investigate the effects

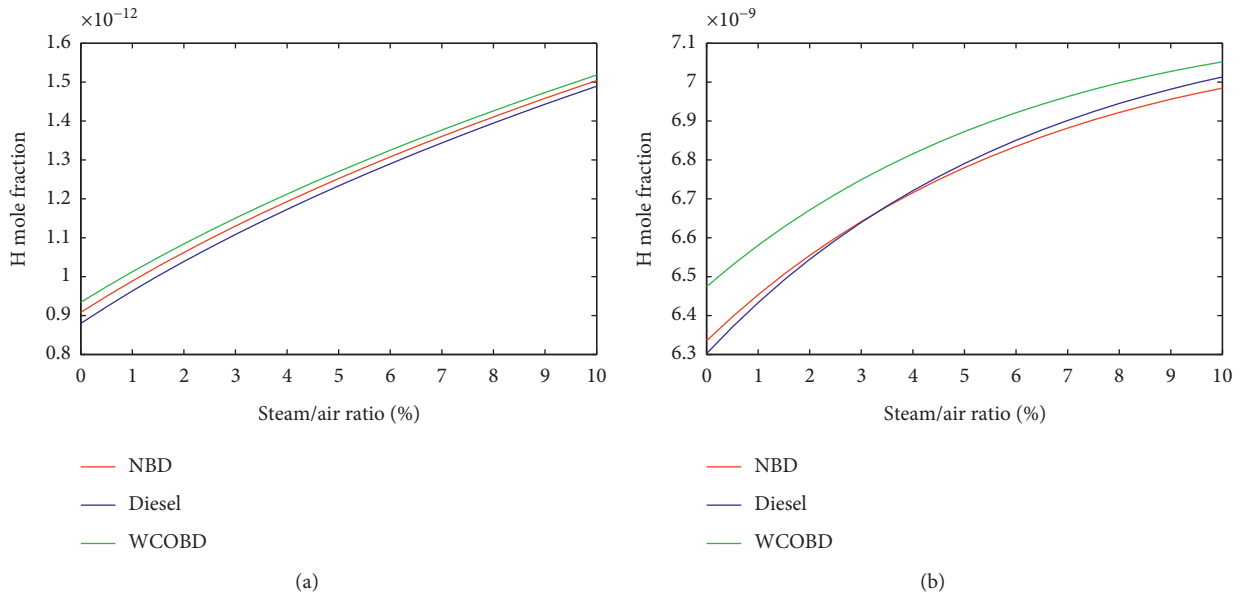


FIGURE 7: Variation of H equilibrium mole fractions with steam injection ratios.

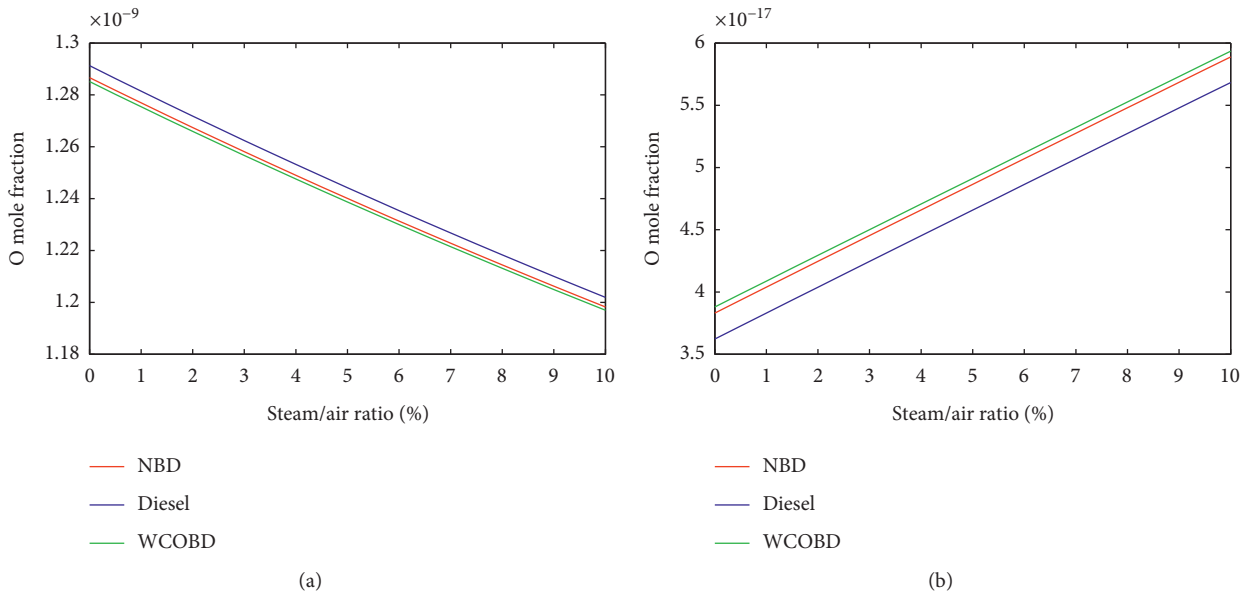


FIGURE 8: Variation of O equilibrium mole fractions with steam injection ratios.

of steam injection on the equilibrium combustion products and thermodynamic properties. Before the combustion, the temperature of the air and the fuel is assumed to be equal to 300 K and the pressure of the air and the fuel mixture is equal to the combustion chamber pressure. The pressure inside the combustion chamber is 30 atm, which is supposed to be the pressure of injection steam. The temperature of injected steam is 300°C. The temperature of the unburned mixture is found by assuming a thermal equilibrium amongst the reactants. Initial temperature is obtained from the thermal equilibrium of fuel-air and steam mixture.

The results have been comparatively presented for lean and rich combustion with increasing steam injection from 0% to 10%.

Figures 1(a) and 1(b) show the CO_2 equilibrium mole fractions and they decrease remarkably with increasing steam injection ratios. NBD gives the highest results, while WCOBD presents the lowest results. Kayadelen [26] obtained the same behaviour in his study.

Figures 2(a) and 2(b) illustrate the H_2O equilibrium mole fractions with steam injection ratios. It is clear that the

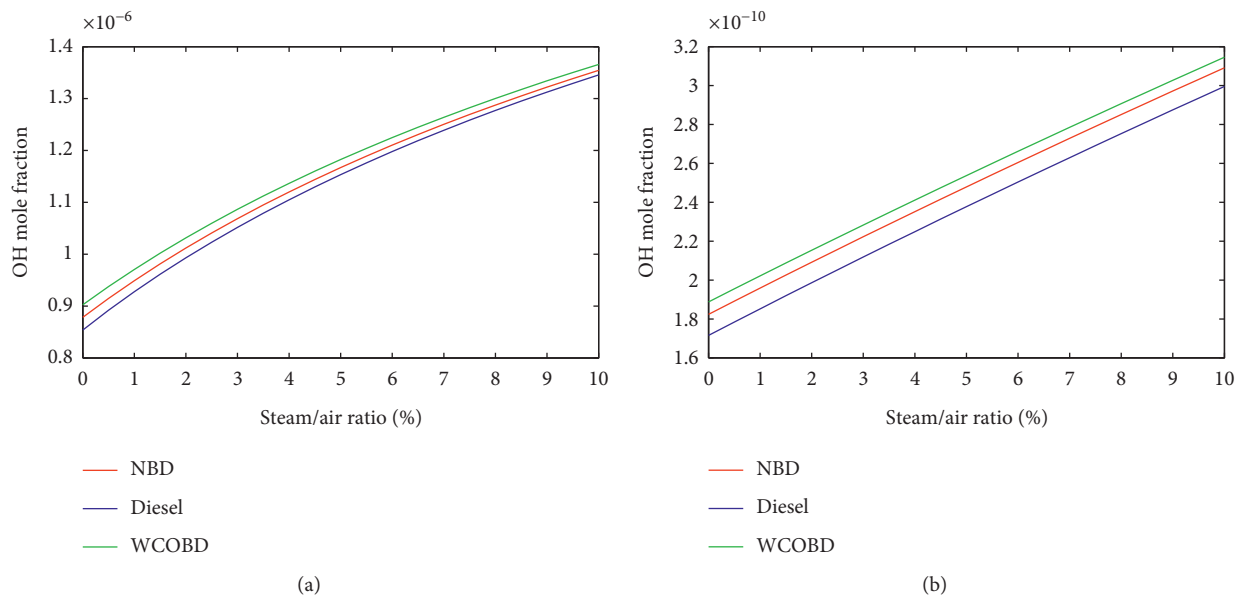


FIGURE 9: Variation of OH equilibrium mole fractions with steam injection ratios.

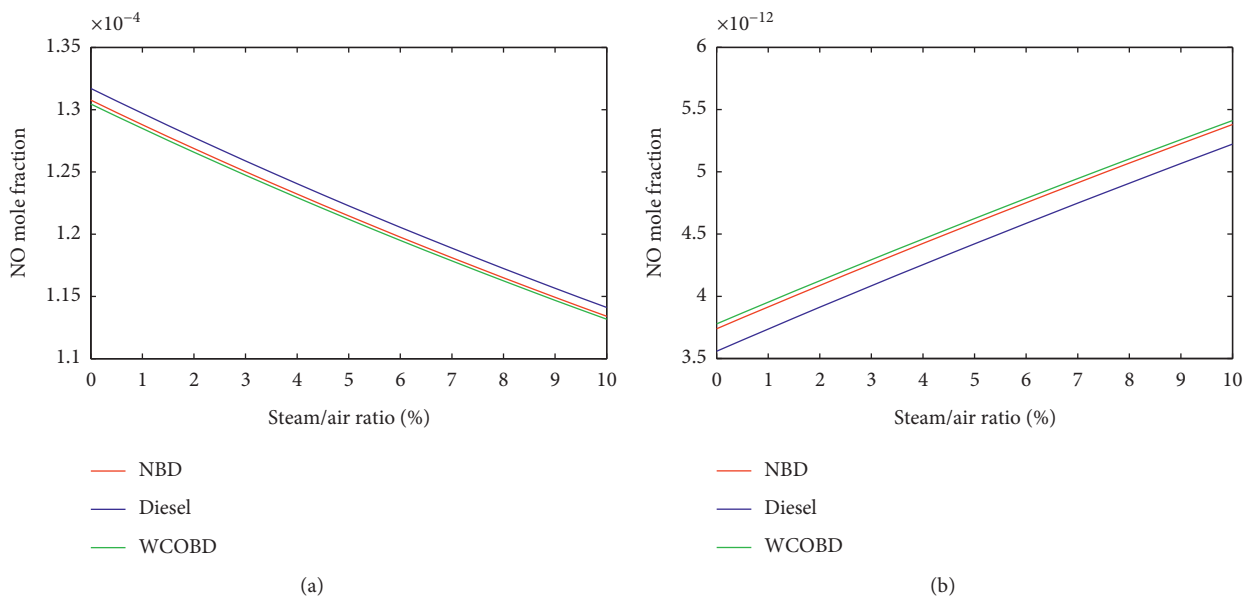


FIGURE 10: Variation of NO equilibrium mole fractions with steam injection ratios.

H_2O equilibrium mole fraction increases with increasing steam injection ratios. The maximum H_2O equilibrium mole fraction is obtained with WCOBD and the minimum H_2O equilibrium mole fraction is observed with diesel fuel. The reason is the WCOBD has the lowest α/β ratio and diesel fuel has the highest α/β ratio. The smaller the α/β ratio is, the larger the H_2O equilibrium mole fraction is.

Figures 3(a) and 3(b) illustrate the N_2 equilibrium mole fractions with steam injection ratios. It is clear that the N_2 equilibrium mole fraction decreases with increasing steam injection ratios. The maximum N_2 equilibrium mole fraction is obtained with diesel fuel and the minimum N_2 equilibrium mole fraction is observed with WCOBD. The reason is the

WCOBD has the lowest α/β ratio and diesel fuel has the highest α/β ratio.

Figures 4(a) and 4(b) shows the O_2 equilibrium mole fractions with steam injection ratios. It is clear that the O_2 equilibrium mole fraction decreases with increasing steam injection ratios in the case of lean combustion. The maximum O_2 equilibrium mole fraction is obtained with diesel fuel and the minimum O_2 equilibrium mole fraction is observed with WCOBD. The O_2 equilibrium mole fraction is much lower in rich combustion due to lower oxygen concentration compared to lean combustion. The maximum O_2 equilibrium mole fraction occurs with WCOBD and the minimum O_2 equilibrium mole fractions occurs with diesel

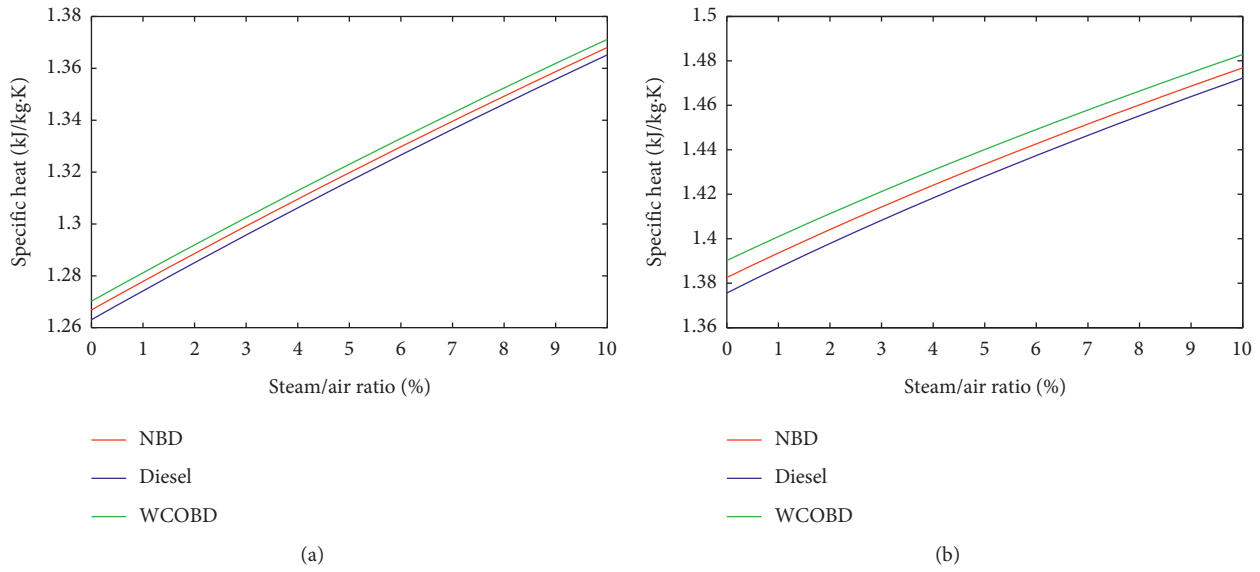


FIGURE 11: Variation of gas mixture specific heat with steam injection ratios.

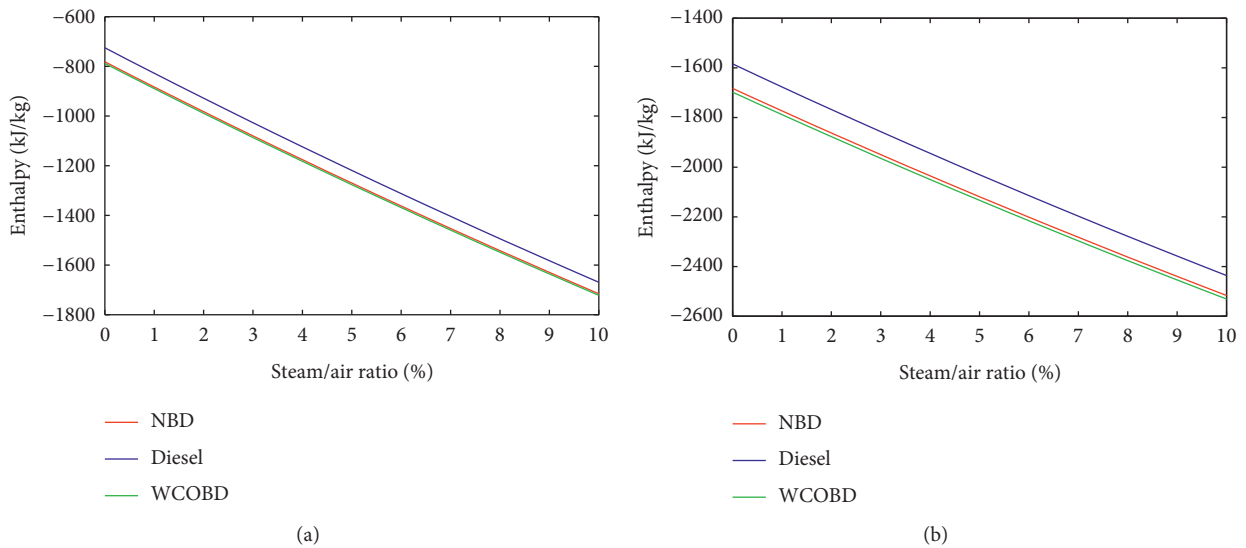


FIGURE 12: Variation of gas mixture enthalpy with steam injection ratios.

fuel in the case of rich combustion. The influence of the steam injection has the similar trend in Figures 5(a) and 5(b).

Figures 6(a) and 6(b) show the CO equilibrium mole fractions with steam injection ratios. The CO equilibrium mole fraction decreases with increasing steam injection ratios. The maximum CO equilibrium mole fraction is observed with diesel fuel and the minimum CO equilibrium mole fraction is observed with WCOBD in the case of rich combustion. The maximum CO equilibrium mole fraction is obtained with NBD and the minimum CO equilibrium mole fraction is observed with WCOBD in the case of lean combustion.

Figures 7(a) and 7(b) show the H₂ equilibrium mole fractions with steam injection ratios which increase in both

rich and lean combustions. The combustion of WCOBD gives the highest H₂ equilibrium mole fraction. The influence of the steam injection has the similar trend in Figures 8(a) and 8(b).

Figures 9(a) and 9(b) demonstrate the OH equilibrium mole fractions with steam injection ratios. The OH equilibrium mole fractions increase slightly with increasing steam injection ratios in rich and lean combustion. WCOBD releases the highest OH equilibrium mole fractions while diesel fuel releases the lowest OH equilibrium mole fractions in both rich and lean combustions. Figures 10(a) and 10(b) demonstrate the NO equilibrium mole fractions with steam injection ratios. The NO equilibrium mole fractions decrease with increasing steam injection ratios in lean combustion. Diesel fuel releases the highest NO equilibrium mole

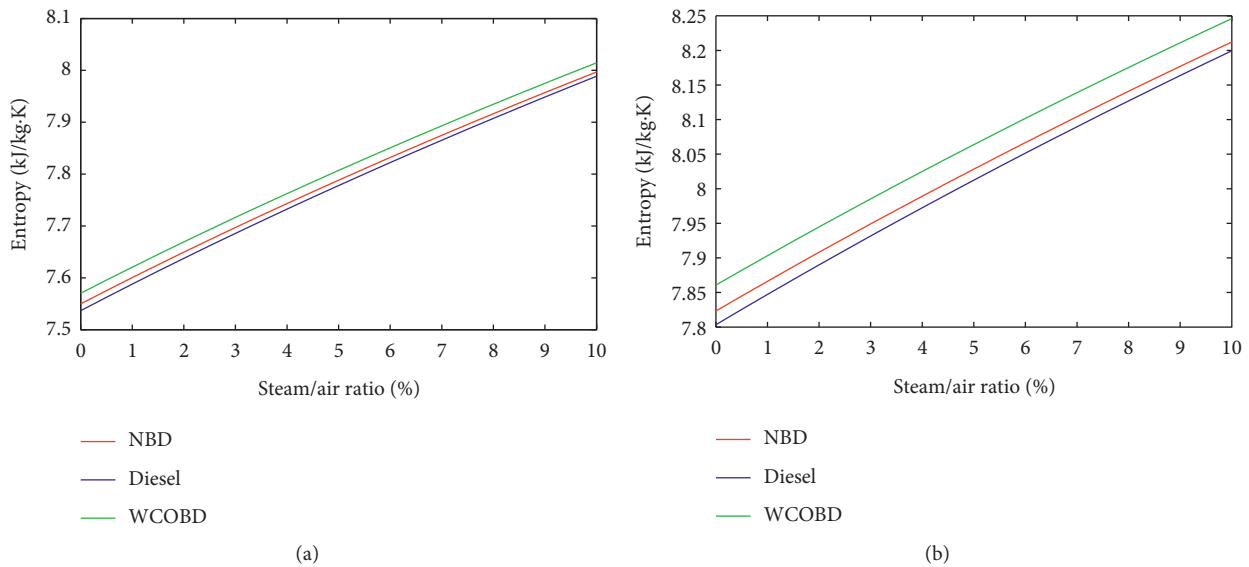


FIGURE 13: Variation of gas mixture entropy with steam injection ratios.

fractions, while WCOBD releases the lowest NO equilibrium mole fractions in lean combustions.

3.2. Thermodynamic Properties of Combustion Products. The specific heat and the enthalpy of the mixture of the gases increase with the steam injection ratios due to the specific heat of superheated steam which is higher than the one of air at that temperature condition. Kayadelen [26] obtained the same behaviour in his study.

Figures 11(a) and 11(b) show the variation of specific heats of combustion products with respect to steam injection ratios. Higher specific heats are obtained in the rich combustions compared to the lean combustions. The highest specific heats are seen with WCOBD and the lowest specific heats are obtained with diesel fuel. In both combustions, specific heats increase with increasing steam injection ratios because the specific heat of the steam is much more than the ones of the combustion products at the same temperature except the specific heat of CO_2 .

Figures 12(a) and 12(b) show the variation of enthalpy of combustion products with respect to steam injection ratios. Higher enthalpies of combustion products are obtained in the lean combustions compared to the rich combustions. The highest enthalpies of combustion products are seen with diesel fuel and the lowest enthalpies of combustion products are obtained with WCOBD. In both combustions, enthalpy of combustion products decreases with increasing steam injection ratios due to the enthalpy of the steam which is much less than the ones of the combustion products at the same temperature.

Figures 13(a) and 13(b) show the variation of entropy of combustion products with respect to steam injection ratios. Higher entropies of combustion products are obtained in the rich combustions compared to the lean combustions. The highest entropies of combustion products are seen with

WCOBD and the lowest entropies of combustion products are obtained with diesel fuel. In both combustions, entropy of combustion products increases with increasing steam injection ratios.

4. Conclusion

The equilibrium combustion model is used to provide mole fractions and thermodynamic properties of combustion products in chemical equilibrium. Equilibrium mole fractions and the adiabatic flame temperature are necessary for estimating thermodynamic properties of exhaust gases and for providing key data to obtain nonequilibrium mole fractions. The precise calculation of thermodynamic properties is necessary for accurate performance estimations of internal combustion engines. The influences of steam injection on equilibrium combustion products and thermodynamic properties of diesel fuel and biodiesels have been modelled.

The equilibrium mole fractions and thermodynamic properties of combustion products showed good agreement with the results obtained from CEA of NASA and GASEQ using methane.

The highest CO_2 equilibrium mole fractions are seen with NBD, and the lowest ones are formed with WCOBD. The reduction rate of NO is higher for biodiesel fuels as compared with the one of diesel fuel in lean combustion conditions. Thus, the steam injection ratios can be used for biodiesel fuels in order to lower NO equilibrium combustion products in the lean combustion conditions.

The model can be a recourse tool for researchers studying fuels, surrogates, emissions, and internal combustion modelling due to its accuracy and convenience.

The equilibrium mole fractions are used in combustion engineering, for example, in chemical kinetics to look for a reference point and in parametric emission monitoring systems to estimate the emissions of power systems.

Simulations of any combustion process including exhaust gas recirculation, supplementary firing, steam injection, water injection, fuel emulsion, and reheat process in gas turbines can easily be conducted with higher accuracy and speed by integrating this model to the thermodynamic models.

Nomenclature

ASTM: American Society of Testing and Materials
 EGR: Exhaust gas recirculation
 EN: European norms
 h : Specific enthalpy, $\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$
 M : Molecular weight of the mixture, $\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$
 NASA: National Aeronautics and Space Administration
 p : Pressure, Pa
 PM: Particulate matter
 s : Specific entropy, $\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
 T : Temperature, K
 x : Number of moles injected H_2O
 y_i : Mole fraction of species i .

Greek Letters

α : Atomic number of carbon for fuels
 β : Atomic number of hydrogen for fuels
 γ : Atomic number of oxygen for fuels
 δ : Atomic number of nitrogen for fuels
 ε : Molar fuel/air ratio
 ϕ : Equivalence ratio
 ν_i : Number of moles for product species i .

Subscripts

a : Air
 f : Fuel
 s : Stoichiometric.

Data Availability

No data were used in this research. The authors carried out computational simulation to obtain the results of the research.

Conflicts of Interest

The authors declare that there are no conflicts of interest.

References

- [1] A. E. Atabani, A. S. Silitonga, I. A. Badruddin, T. M. I. Mahlia, H. H. Masjuki, and S. Mekhilef, "A comprehensive review on biodiesel as an alternative energy resource and its characteristics," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 16, no. 4, pp. 2070–2093, 2012.
- [2] M. Elkelawy, H. A. E. Bastawissi, K. K. Esmail et al., "Experimental studies on the biodiesel production parameters optimization of sunflower and soybean oil mixture and DI engine combustion, performance, and emission analysis fueled with diesel/biodiesel blends," *Fuel*, vol. 255, Article ID 115791, 2019.
- [3] M. Mofijur, H. H. Masjuki, M. A. Kalam, and A. E. Atabani, "Evaluation of biodiesel blending, engine performance and emissions characteristics of *Jatropha curcas* methyl ester: Malaysian perspective," *Energy*, vol. 55, pp. 879–887, 2013.
- [4] S. M. Palash, H. H. Masjuki, M. A. Kalam, B. M. Masum, A. Sanjid, and M. J. Abedin, "State of the art of NO_x mitigation technologies and their effect on the performance and emission characteristics of biodiesel-fueled compression ignition engines," *Energy Conversion and Management*, vol. 76, pp. 400–420, 2013.
- [5] B. Ashok, K. Nanthagopal, A. K. Jeevanantham, P. Bhowmick, D. Malhotra, and P. Agarwal, "An assessment of *Calophyllum inophyllum* biodiesel fuelled diesel engine characteristics using novel antioxidant additives," *Energy Conversion and Management*, vol. 148, pp. 93–103, 2017.
- [6] M. Gülüm and A. Bilgin, "Two-term power models for estimating kinematic viscosities of different biodiesel-diesel fuel blends," *Fuel Processing Technology*, vol. 149, pp. 121–130, 2016.
- [7] A. Demirbas, "Importance of biodiesel as transportation fuel," *Energy Policy*, vol. 35, pp. 4661–4670, 2007.
- [8] R. O. Dunn and B. R. Moser, "Cold weather properties and performance of biodiesel," *The Biodiesel Handbook*, Taylor & Francis, vol. 30, pp. 83–121, Abingdon, UK, 2005.
- [9] P. Hellier, M. Talibi, A. Eveleigh, and N. Ladommatos, "An overview of the effects of fuel molecular structure on the combustion and emissions characteristics of compression ignition engines," *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering*, vol. 232, no. 1, 2018.
- [10] P. Tamilselvan, N. Nallusamy, and S. Rajkumar, "A comprehensive review on performance, combustion and emission characteristics of biodiesel fuelled diesel engines," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 79, pp. 1134–1159, 2017.
- [11] M. Gülüm, F. K. Onay, and A. Bilgin, "Comparison of viscosity prediction capabilities of regression models and artificial neural networks," *Energy*, vol. 161, pp. 361–369, 2018.
- [12] L. Coniglio, H. Bennadji, P. A. Glaude, O. Herbinet, and F. Billaud, "Combustion chemical kinetics of biodiesel and related compounds (methyl and ethyl esters): experiments and modeling—advances and future refinements," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 39, pp. 340–382, 2013.
- [13] P. Visconti, P. Primiceri, L. Strafella, A. P. Carlucci, and A. Ficarella, "Morphological analysis of injected sprays of different bio-diesel fuels by using a common rail setup controlled by a programmable electronic system," *International Journal of Automotive and Mechanical Engineering*, vol. 14, no. 1, pp. 3849–3871, 2017.
- [14] S. K. Nayak and P. C. Mishra, "Emission from a dual fuel operated diesel engine fuelled with *Calophyllum inophyllum* biodiesel and producer gas," *International Journal of Automotive and Mechanical Engineering*, vol. 14, no. 1, pp. 3954–3969, 2017.
- [15] M. R. Shukri, M. M. Rahman, D. Ramasamy, and K. Kadirgama, "Artificial neural network optimization modeling on engine performance of diesel engine using biodiesel fuel," *International Journal of Automotive and Mechanical Engineering*, vol. 11, pp. 2332–2347, 2015.
- [16] M. M. Hasan, M. M. Rahman, and K. Kadirgama, "A review on homogeneous charge compression ignition engine performance using biodiesel–diesel blend as a fuel," *International Journal of Automotive and Mechanical Engineering*, vol. 11, pp. 2199–2211, 2015.
- [17] M. Rashidi, "Calculation of equilibrium composition in combustion products," *Chemical Engineering and Technology*, vol. 20, no. 6, pp. 571–575, 1997.
- [18] R. Way, "Methods for determination of composition and thermodynamic properties of combustion products for

- internal combustion engine calculations,” *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, vol. 190, pp. 687–697, 1976.
- [19] J. B. Heywood, *Internal Combustion Engine Fundamentals*, McGraw-Hill, New York Cty, NY, USA, 1988.
- [20] G. Gonca, “Investigation of the influences of steam injection on the equilibrium combustion products and thermodynamic properties of bio fuels (biodiesels and alcohols),” *Fuel*, vol. 144, pp. 244–258, 2015.
- [21] C. V. Ngayihi Abbe, R. Danwe, and R. Nzungwa, “Comparative numerical study of four biodiesel surrogates for application on diesel 0D phenomenological modeling,” *Journal of Combustion*, vol. 2016, Article ID 3714913, 11 pages, 2016.
- [22] Y. Ust and H. K. Kayadelen, “Prediction of equilibrium products and thermodynamic properties in H₂O injected combustion for C_αH_βO_γN_δ type fuels,” *Fuel*, vol. 113, pp. 389–401, 2013.
- [23] C. Rakopoulos, D. Rakopoulos, and D. Kyritsis, “Development and validation of a comprehensive two-zone model for combustion and emissions formation in a DI diesel engine,” *International Journal of Energy Research*, vol. 27, no. 14, pp. 1221–1249, 2003.
- [24] F. Diotallevi, *Development of a Multi-Zone Model for Nox Formation in Diesel Engines*, KTH Industrial Engineering and Management, Stockholm, Sweden, 2007.
- [25] D. Mourya and V. Roy, “Combustion modeling and simulation of combustion emissions for diesel engine operating on the blends of jatropha biodiesel and diesel,” *International Journal of Engineering Science and Technology*, vol. 4, no. 4, pp. 1373–1381, 2012.
- [26] H. K. Kayadelen, “A multi-featured model for estimation of thermodynamic properties, adiabatic flame temperature and equilibrium combustion products of fuels, fuel blends, surrogates and fuel additives,” *Energy*, vol. 143, pp. 241–256, 2018.
- [27] Morley C., Gaseq chemical equilibrium program ver 0.07.0009.
- [28] S. Gordon and B. J. McBride, *Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications*, NASA, Washington, DC, USA, 1994.
- [29] M. Canakci, “Combustion characteristics of a turbocharged DI compression ignition engine fueled with petroleum diesel fuels and biodiesel,” *Bioresource Technology*, vol. 98, no. 6, pp. 1167–1175, 2007.
- [30] S. Awad, E. G. Varuvel, K. Loubar, and M. Tazerout, “Single zone combustion modeling of biodiesel from wastes in diesel engine,” *Fuel*, vol. 106, pp. 558–568, 2013.
- [31] C. R. Ferguson, *Internal Combustion Engines: Applied Thermosciences*, John Wiley, Hoboken, NJ, USA, 1986.
- [32] C. Olikara and G. L. Borman, *A Computer Program for Calculating Properties of Equilibrium Combustion Products with Some Applications to IC Engines*, Society of Automotive Engineers, Warrendale, PA, USA, 1975.
- [33] S. Gordon and B. J. McBride, *Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Composition, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman Jouguet Detonations*, NASA, Washington, DC, USA, 1971.
- [34] National Bureau of Standards, *JANAF Thermochemical Tables*, National Bureau of Standards, Washington DC, USA, 1971.
- [35] M. Gülüm, M. Kadir Yesilyurt, and A. Bilgin, “The performance assessment of cubic spline interpolation and response surface methodology in the mathematical modeling to optimize biodiesel production from waste cooking oil,” *Fuel*, vol. 255, Article ID 115778, 2019.
- [36] M. K. Yesilyurt, Z. Yilbasi, and M. Aydin, “The performance, emissions, and combustion characteristics of an unmodified diesel engine running on the ternary blends of pentanol/safflower oil biodiesel/diesel fuel,” *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, vol. 140, no. 6, 2020.