

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
CENTRE UNIVERSITAIRE « SALHI AHMED » DE NAAMA



INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIE

DEPARTEMENT DE TECHNOLOGIE

MEMOIRE DE MASTER

Spécialité : Génie Mécanique

Option : Energétique

Intitulé de Mémoire

Simulation numérique du moteur diesel alimenté par les huiles de déchets plastiques.

Présentés par :

Med El Amin ACHOUR

Abdenasser AMRANI

Ikram ZAHZOUH

Soutenu publiquement le : *24 mai 2017*, devant le jury :

M.BADAoui Abdelhamid	MAA	CU Naama	Président
M.NAIMA Khatir	MCB	CU Naama	Encadreur
M.AMEUR Houari	MCA	CU Naama	Examineur

Année universitaire 2016-2017

Remerciement

On remercie avant tout Dieu pour nous avoir donné la foi.

Nous adressons nos remerciements aux personnes qui nous ont aidées dans la réalisation de ce mémoire.

En premier lieu, nous remercions notre encadreur, **Mr. Khatir NAIMA**, pour l'aide et le temps qu'il nous a consacré ainsi que pour sa grande patience et modestie.

Nos remerciements vont également à **Mr. Abdelhamid BADAoui** d'avoir accepté de nous faire l'honneur de présider le jury de ce mémoire et de bien vouloir l'examiner.

Nous adressons aussi nos vifs remerciements à **Mr. Houari AMEUR**, d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Nos tous sincères remerciements vont également à tous les enseignants pédagogiques du département du génie mécanique du centre universitaire de NAAMA qui ont contribué à notre formation.

À tous ceux et celles qui de près ou de loin ont apporté aide et encouragement, qu'ils trouvent ici l'expression de notre profonde gratitude.

Dédicace

A nos chers parents, Pour leur sacrifice, leur amour, leurs prières et leur soutien.

A nos chères familles, Proches et lointaines.

A tous nos amis, Qui nous soutiennent et qui partagent notre quotidien.

A tous nos enseignants, Qui n'ont épargné aucun effort pour nous offrir un bon enseignement.

Et à tous ceux qui nous ont aidés, dans la réalisation et le bon déroulement de ce travail.

A la science !

Résumé

Le secteur des transports est grandement dépendant des combustibles d'origines fossiles qui, selon de nombreuses prédictions, tendent vers un épuisement à plus ou moins long terme. Trouver donc une solution de rechange appropriée est fortement une urgence. Dans cette optique, le présent travail, L'huile des déchets plastiques (*HDP*) a été utilisée comme carburant alternatif dans un moteur diesel sans aucune modification. L'enquête a consisté d'étudier les caractéristiques de performance, d'émission et de combustion d'un moteur diesel de type Kirloskar, TAF1 alimenté par l'huile des déchets plastique, en comparant les résultats trouvés par ceux du gasoil.

Nous entamons cette étude par un rappelle d'état de l'art bibliographique pour la valorisation des déchets plastiques. Ensuite, nous citons les formulations mathématiques et les modèles physiques et chimiques. Puis on traite brièvement l'historique du code de calcul CONVERGE CFD afin de simuler la combustion au sein de la chambre de combustion du moteur étudié. En fin, nous exposons les résultats, Nous avons utilisé dans la simulation numérique le code *CFD Converge* comme cité précédemment pour étudier les phénomènes qui se manifestent dans le cylindre durant la phase de combustion notamment. L'approche RANS est utilisée. La combustion est décrite par le modèle CTC, le spray par le modèle de KH-RT, la turbulence, l'allumage, la formation des suies, et les NO_x par les modèles RNG k-ε, Zeldovich. Les résultats obtenus sont analysés, interprétés et discutés.

Ces résultats ont montré que les émissions en NO_x, CO, et CO₂, sont élevées et les émissions en HC sont faibles. Les résultats de simulation sont satisfaisants hormis.

Mots clefs : Code CONVERGE CFD; Moteur diesel; Carburant; Combustion ; Huile; Déchets plastiques; Simulation numérique.

Abstract

The transport sector is heavily dependent on fossil fuels which, according to many predictions, tend to be more or less long-term exhaustion. So finding an appropriate solution is highly an emergency. In this context, the present work, Waste Plastic Oil (HDP) was used as an alternative fuel in a diesel engine without any modification. The survey consisted of studying the performance, emission and combustion characteristics of a Kirloskar-TAF1 diesel engine's type, fueled by waste plastic oil, by comparing the results found by those of diesel. We begin this study with a bibliographic state for the valorization of plastic waste. Then we cite the mathematical formulations and the physical and chemical models. Then, we present the history of the CONVERGE CFD code in order to simulate the combustion within the combustion chamber of the engine. Finally, we present the results.

We used in numerical simulation the code CFD Converge as mentioned previously to study the phenomena that occur in the cylinder during the combustion phase in particular. The RANS approach is used. The combustion is described by the CTC model, the spray by the KH-RT model, the turbulence, the ignition, and the NO_x by the k- ϵ , Zeldovich RNG models. The results obtained are analyzed, interpreted and discussed. These results showed that NO_x, CO, and CO₂ emissions are high and HC emissions are low. The simulation results are satisfactory.

Keywords: CONVERGE-CFD code; Diesel engine; Fuel; Combustion; Waste Plastic Oil; Numerical simulation.

Liste des figures

Figure I.1. Unité de pyrolyse.....	22
Figure I.2. Schéma de principe du réacteur de pyrolyse/liquéfaction	23
Figure I.3. Réacteur tube	24
Figure I.4. Schéma du procédé à lit fluidisé	26
Figure I.5. Schéma de principe du procédé WGT.....	27
Figure I.6. Schéma de principe du procédé Thermolysef	28
Figure I.7. Molécule d'éthylène et le modèle d'une chaîne de polyéthylène	29
Figure I.8. Modèles isotactique et syndiotactique de polypropylène.	32
Figure I.9. Modèle structurel du polystyrène	34
Figure I.10. Monomères en polymère d'ABS	38
Figure I.11. Obtention du PMMA.....	39
Figure II.1. Schéma de principe du modèle KH-RT.....	53
Figure II.2. Schéma de principe du modèle de Reitz	54
Figure II.3. Diagramme Φ -T de Pischinger	66
Figure III.1. La structure standard de Converge.	75
Figure III.2. (a) Maillage initial, (b) Maillage raffiné.....	76
Figure III.3. Stratégie du maillage AMR.	77
Figure III.4. Stratégie du maillage Embedding: fixed Nozzle embedding et fixed Bound embedding.	78
Figure III.5. Algorithme de calcul.....	80
Figure III.6. Vue 3D du moteur Kirloskar TAF1.....	84
Figure IV.1. Boucle de modélisation	89
Figure IV.2. Maillage du domaine de calcul.....	91
Figure IV.3-a. Pression en fonction de l'angle du vilebrequin. Cas du HDP.....	93
Figure IV.3-b. Pression en fonction de l'angle du vilebrequin. Cas du gazole... .	93
Figure IV.4. Taux de chaleur dégagée en fonction de l'angle de vilebrequin pour les deux carburants.	94
Figure IV.5. Evolution de la température moyenne en fonction de l'angle du vilebrequin pour les deux carburants.	95
Figure IV.6. Variation de l'énergie cinétique turbulente en fonction de la course du piston pour les deux carburants.....	96

Figure IV.7. Prédiction des NO _x en fonction de l'angle du vilebrequin pour les deux carburants.	97
Figure IV.8. Prédiction des émissions HC en fonction de l'angle du vilebrequin pour les deux carburants.....	98
Figure IV.9. Prédiction des CO en fonction de l'angle de vilebrequin pour les deux carburants.	99
Figure IV.10. Prédiction des CO ₂ en fonction de l'angle de vilebrequin pour les deux carburants.	100
Figure IV.11. Evolution des champs de température à différents angle, pour les deux carburants.	102
Figure IV.12. Evolution de l'énergie cinétique turbulente à différents angle, pour les deux carburants.	104
Figure IV.13. Evolution des émissions NO _x sous forme des contours à différents angles pour les deux carburants.	106
Figure IV.14. Evolution des émissions CO sous forme des contours à différents angles pour les deux carburants.	108
Figure IV.15. Evolution des émissions NO _x sous forme des contours à différents angles pour les deux carburants.	110

Liste des tableaux

Tableau I.1. Propriétés physiques du PP	32
Tableau I.2. Propriétés physiques du PS	35
Tableau II.1. Valeurs des constantes dans les modèles de turbulence k- ϵ , et RNG k- ϵ	51
Tableau II.2. Constantes du modèle d'oxydation NSC	68
Tableau III.1. Les fichiers d'entrées.	82
Tableau III.2. Les fichiers de sortie.	84
Tableau III.3. Description des caractéristiques géométriques du moteur étudié.	85
Tableau III.4. Description des caractéristiques du système d'injection du moteur étudié.	86
Tableau III.5. Propriété physico-chimiques des carburants utilisés.	87
Tableau IV.1. Les conditions initiales.	90
Tableau IV.2. Les conditions aux limites	91
Tableau IV.3. Choix des modèles.	92

Nomenclature

A	Surface de contrôle
A_{fr}	Constante pré-exponentielle
α	Diffusivité thermique
B_{rd}	Nombre de transport de Spalding
B	Paramètre d'impact de collision
b_{cr}	Paramètre d'impact critique de collision
a_m, b_m	Coefficients stœchiométriques intégraux pour la réaction r
C_D	Coefficient de décharge
C_p	Chaleur spécifique du fluide
C_{pm}	Chaleur spécifique de l'espèce m
$C_{\varepsilon 1}$	Constante des modèles $\varepsilon - k$ et <i>RNG</i> $\varepsilon - k$
$C_{\varepsilon 2}$	Constante des modèles $\varepsilon - k$ et <i>RNG</i> $\varepsilon - k$
D	Coefficient de transport
d_s	Diamètre de suie
E_a	Energie d'activation
E_c	Energie cinétique
F	Vitesse de changement individuel d'une gouttelette
F	Fonction de distribution de probabilité des gouttelettes
\dot{f}_{bu}	Terme source de destruction
\dot{f}_{coll}	Terme source de collision
\dot{f}_w	Taux de chaleur par unité de surface de la paroi
g	Force d'inertie
Δh_f^0	Chaleur de formation de l'espèce m au zéro absolu
h_m	Enthalpie spécifique de l'espèce m
I	Matrice unité
I	Intensité de turbulence
I_m	Energie interne spécifique de l'espèce m
J	Vecteur du flux thermique
k	Energie cinétique
K	Coefficient de transport
$K_c^t(T)$	Constante d'équilibre
K_{fr}, K_{br}	Constante d'avancement
L	Chaleur latente
L	La Course du piston
$M_{m,r}$	Masse molaire

\dot{m}_a	Taux d'entraînement de l'air
m_f	Masse du carburant dans la zone considérée
m_{fg}	Masse du carburant vaporisé
m_a	Masse d'air dans cette zone
N	Vitesse de rotation du moteur
n	Normale à la surface de la paroi
P	Pression du fluide
P_a	Pression à l'admission
P_e	Pression à l'échappement
P_{ch}	Pression dans la chambre
P_{inj}	Pression d'injection
P_{ox}	Pression partielle de l'oxygène
\dot{Q}^s	Interactions de vaporisation
\dot{Q}^c	Chaleur chimique dégagée par réaction chimique
R	Vitesse de la gouttelette
R_c	Nombre de Reynolds critique
R_0	Constante universelle des gaz
R_*	Radical
RH	Hydrocarbure
r	Rayon de gouttelette
S	Pénétration du jet
T	Température du fluide
\dot{T}	Température de la gouttelette
t	Temps
Δt	Pas de temps
T_{cu}	Température de culasse
T_{cy}	Température du cylindre
T_p	Température des parois
T_a	Température d'admission
T_f	Température de carburant
u	Vitesse des gaz
u	Vitesse linéaire moyenne du piston
u^*	Vitesse de cisaillement
u''	Fluctuation de vitesse turbulente
u_i	Vitesse d'injection du carburant
u, v, w	Composante du vecteur vitesse
V	Volume de contrôle
W_m	Masse moléculaire de l'espèce m
w_{wall}	Vitesse des parois
X	Vecteur de position

x, y, z	Coordonnées cartésiennes
\ddot{y}	Vitesse d'oscillation de la gouttelette
\dot{y}	Vitesse de changement d'une gouttelette
Y_m^*	Valeur de la fraction à l'équilibre thermodynamique
Y_m	Fraction massique de l'espèce m
\bar{y}_m	Moyenne du terme source de l'espèce
$\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$	Vecteurs unitaires de la base cartésienne

Notations Grecques

α_0, β_0	Coefficient du schéma Quick
r_ϕ	Coefficient de diffusion
σ	Tenseur des contraintes visqueuses
ε	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente
λ	Conductivité thermique.
μ	Viscosité dynamique
μ_t	Viscosité dynamique turbulente
ν	Viscosité cinématique
ν_t	Viscosité cinématique turbulente
$\nu'_{m,r}, \nu''_{m,r}$	Coefficients stœchiométriques pour réactifs et produits
ρ	Masse volumique
ρ_m	Masse volumique de l'espèce
ρ_s	Masse volumique des suies
τ_c	Echelle de temps caractéristique de la réaction chimique
τ_l	Echelle de temps caractéristique laminaire
τ_t	Echelle de temps caractéristique de la turbulence
w_r	Taux de réaction
Φ	Scalaire
Φ'	Moyenne de Favre.
α_d	Coefficient de tension superficielle de liquide
ζ	Nombre de Reynolds basé sur la vitesse des gaz relative à la paroi
Ω_{KH}	Taux d'accroissement
ρ^{spray}	Terme source du jet
ρ^{chem}	Terme source chimique
$\Delta\theta$	Durée d'injection
Λ	Longueur d'onde
∇	Laplacien

Nombres sans dimension

<i>We</i>	Nombre de Weber
<i>Z</i>	Nombre d'Ohnesorge
<i>Ta</i>	Nombre de Taylor
<i>We_L</i>	Nombre de Weber liquide
<i>Re_L</i>	Nombre de Reynolds
<i>Nu</i>	Nombre de Nusselt
<i>Pr</i>	Nombre de Prandtl
<i>Sc</i>	Nombre de Schmidt
<i>Sh</i>	Nombre de Sherwood

Abréviations

ABDC	After Bottom Dead Center
ABS	Acrylonitrile butadiène styrène
ABS-PC	Acrylonitrile butadiène styrène + Polycarbonate
ASCII	American Standard Code for Information Interchange
ATDC	After Top Dead Center
BBDC	Before Bottom Dead Center
BTDC	Before Top Dead Center
CAO	La conception assistée par ordinateur
CFC	Matériaux composites renforcées avec fibres de carbone
CFD	Computational Fluid Dynamic
CFV	Matériaux composites renforcées avec fibres de verre
GUI	Graphical User Interface
HDP	Huile des déchets plastiques
LTE	Long Term Evolution (Réseau Mobile)
MCI	Moteur à Combustion Interne
PC	Polycarbonate
PE	Polyéthylène
PEBD	Polyéthylène basse densité
PEHD	Polyéthylène haute densité
PET	Polyéthylène téréphtalate

PID	Proportionnel intégral dérivé
PMMA	Poly méthacrylate de méthyle
PP	Polypropylène
PS	Polystyrène
PVC	Polyvinyle chloryde
USA	United States of America
X 100% il	Déchet X pyrolysé avec l'installation 1 à 100% puissance électrique
X i2	Déchet X pyrolysé avec l'installation 2
Xi2+c	Déchet X pyrolysé avec l'installation 2 en utilisant catalyseur

Espèces chimiques

Formule chimique	Description
O ₂	Oxygène moléculaire
N ₂	Azote moléculaire
NO _x	Oxydes d'azote
H ₂	Hydrogène moléculaire
H ₂ O	Eau
CO	Monoxyde de carbone
CO ₂	Dioxyde de carbone
CH ₄	Méthane
C ₂ H ₄	Ethylène
C ₂ H ₆	Ethane
C ₃ H ₆	Propène
C ₃ H ₈	Propane
C ₄ H ₁₀	Butane
HC	Hydrocarbures partiellement brûlés
PM	Particules

TABLE DES MATIERES

Remerciement.....	I
Dédicace	II
Résumé	III
Abstract	IV
Liste des figures	V
Liste des tableaux	VII
Nomenclature	VIII
Introduction générale.....	12
Plan du mémoire.....	14
Chapitre I. - La valorisation des déchets plastiques par pyrolyse.	15
I.1 Introduction.....	16
I.2 Présentation générale des procédés thermochimiques appliqués à la valorisation énergétique	16
I.2.1 Intérêts – Problématiques énergétiques.....	18
I.2.2 Principes	19
I.3 Types de pyrolyseurs et procédés existants.....	21
I.3.1 Réacteur à lit fixe	21
I.3.2 Réacteur sous pression	23
I.3.3 Réacteur tube	24
I.3.4 Installation pilote – procédé à lit fluidisé	25
I.3.5 Le procédé WGT	26
I.3.6 Procédé Thermolysef	28
I.4 Les matières premières	28
I.4.1 Polyéthylène	29
I.4.2 Polypropylène.....	31
I.4.3 Polystyrène	34
I.4.4 Acrylonitrile-Butadiène-Styrène	38

I.4.5	Poly méthacrylate de méthyl	39
I.5	Conclusions.....	41
Chapitre II	- Formulations mathématiques	42
II.1	Introduction	43
II.2	Equations de l'aérothermochimie turbulente	43
II.2.1	Equation de continuité de l'espèce chimique m	44
II.2.2	Equation de conservation de la masse totale	45
II.2.3	Equation de conservation de quantité de mouvement	45
II.2.4	Equation de conservation de l'énergie	46
II.2.5	Equation de comportement du fluide	46
II.3	Approche de résolution RANS	47
II.3.1	Equation de continuité de l'espèce m	48
II.3.2	Equation de conservation de la masse totale.....	48
II.3.3	Equation de conservation de la quantité de mouvement.....	48
II.3.4	Equation de conservation de l'énergie interne.....	48
II.4	Les sous modèles physiques	48
II.4.1	Modèle de Turbulence	49
II.4.2	.Modélisation du spray	51
II.4.3	.Modèle de dégagement de chaleur.....	56
II.4.4	.Modèle de transfert thermique (Loi de paroi).....	57
II.5	Les Modèles chimiques	58
II.5.1	.Modélisation de la combustion turbulente	58
II.5.2	.Modèle d'Allumage	59
II.5.3	.Modèle de formations des polluants	62
II.6	Conclusion	69
Chapitre III.	- Le code de calcul CFD CONVERGE	70
III.1	Introduction	71
III.2	L'outil CFD	72

III.3	Description du code CFD converge	72
III.3.1	Structure standard de Converge V 2.1	73
III.3.2	Génération de maillage	73
III.3.3	Les techniques de maillage	75
III.3.4	Les démarches numériques	78
III.4	Les fichiers de sortie et d'entrée dans converge	81
III.4.1	Descriptions des fichiers d'entrée	81
III.4.2	Description des fichiers de sortie	83
III.5	Présentation de la simulation.....	84
III.5.1	Spécification du moteur	84
III.5.2	Spécifications d'injections	86
III.5.3	Propriétés physico-chimiques des carburants utilisés	86
III.6	Préparation des calculs par converge V 2.1	87
Chapitre IV - Résultats des simulations numériques.....		88
IV.1	Introduction	89
IV.2	Présentation de l'expérience.....	90
IV.2.1	Les conditions initiales.....	90
IV.2.2	Les conditions aux limites.....	90
IV.3	Domaine du calcul.....	91
IV.4	Choix des modèles de simulation.....	91
IV.5	Discussion des résultats de simulation.....	92
IV.5.1	Ajustement du code de calcul.....	92
IV.5.2	Paramètres de combustion.....	94
IV.5.3	Emissions.....	96
IV.6	Champs scalaires	101
IV.6.1	Champs de température.....	101
IV.6.2	Contours de turbulence.....	102
IV.6.3	Evolution du NOx	103

IV.6.4 Evolution du CO.....	104
IV.6.5 Evolution du CO ₂	106
IV.7 Conclusion.....	107
Conclusion générale et perspectives	108
Références bibliographiques	110

Introduction générale

Au cours des dernières décennies, la forte augmentation de la population dans le monde, ainsi que le désir de l'homme d'atteindre de meilleures conditions de vie, ont conduit à une très forte augmentation de la consommation des polymères (principalement des matières plastiques). En conséquence, le développement, la consommation et la gestion de déchets issus de l'utilisation de ce type de matériaux sont liés à la société de consommation dans laquelle nous vivons.

En revanche depuis la crise pétrolière de 1973 et celle de 1979, la communauté internationale a compris que les matières premières ne sont pas inépuisables et on s'est rendu compte qu'il fallait arrêter la consommation effrénée et sans aucun respect pour l'environnement. C'est à partir de là qu'on s'est intéressé au recyclage et, depuis, tous les matériaux sont recyclables. Cela permet de protéger les matières premières et de les exploiter sur une durée très longue. Le pétrole d'ici 30, 50 ans sera épuisé, or bon nombre d'industries pétrochimiques sont issues du pétrole. [1]

La récupération et le recyclage des déchets sont une activité importante de l'économie et une véritable source d'énergie pour beaucoup de pays. Or, en Algérie, ce domaine reste très peu exploité. L'activité de la récupération est actuellement limitée aux seules sources facilement accessibles, Et, souvent, les méthodes utilisées pour la récupération sont archaïques. Quant à la récupération auprès des ménages, elle demeure inexistante et ce, pour de multiples raisons, (coûts, organisation et culture...). Il faut savoir qu'en réduisant les déchets mis en décharge ou incinérés, le compostage et le recyclage limitent la pollution de l'air, des sols et de l'eau, et contribuent à la protection de l'environnement. [2]

L'Algérie est située dans une zone vulnérable aux effets néfastes des changements climatiques. Donc sensible aux déséquilibres environnementaux engendrés par le réchauffement climatique que subit la planète. Le secteur du transport, aujourd'hui est responsable d'un quart des émissions, il pourrait être à l'origine d'un tiers de celles-ci en

Introduction générale

2030. De plus, elle va faire face à une croissance significative de sa demande en énergie primaire qui nécessitera un recours accru aux énergies fossiles. [3]

Pour pallier à ces deux problèmes, les énergies renouvelables et alternatives sont le meilleur choix. Parmi ces énergies, La valorisation des carburants produits à partir des déchets plastiques.

La « valorisation énergétique » serait une technique qui apporte de l'énergie dans un monde qui ne parle que de pénurie tout en nous débarrassant de ce qui nous intéresse le moins, nos déchets. Cette technologie devient quasi miraculeuse lorsque l'on s'aperçoit qu'elle présente aussi des avantages dans la lutte contre le réchauffement climatique.

Le recours aux carburants issus d'une valorisation énergétique semble donc intéressant. Il est possible de produire de diesel à partir de cette culture énergétique ainsi que d'autres carburants dérivés, pour l'Algérie, il n'est pas possible d'avoir recours à des cultures destinées à l'alimentation humaine ou encore animale [4] , pour la production des biocarburants propres. Il serait plus judicieux de se retourner vers les carburants produits à partir des déchets plastiques.

Toutefois avant de nous lancer au cœur du sujet, une partie introductive apparaît nécessaire pour illustrer l'univers sur lequel on réfléchira et faire un point sur la technologie pour clarifier ce concept de « valorisation énergétique ».

Dans le cadre d'un développement et de valorisation énergétique des déchets à base polymères pour la production d'un carburant alternatif, l'objectif du présent travail vise à une meilleure compréhension des procédés de valorisation des carburants tels que (*HDP*) issus à partir d'huiles des déchets polymériques tels que le polystyrène (*PS*), en utilisant une technique de pyrolyse. D'autre part, des simulations numériques de la combustion de ce carburant dans le moteur diesel sont réalisées pour mieux comprendre les phénomènes complexes tels que ceux qui se manifestent lors de la combustion.

Plan du mémoire

Le présent mémoire s'articule en quatre chapitres

Le *Chapitre I* rappelle l'état de l'art bibliographique pour la valorisation des déchets plastiques. On présente les principaux procédés appliqués pour la valorisation énergétique et on développe la pyrolyse avec ses différents principes et différents types de pyrolyseurs existants. Une présentation des matières premières a aussi été incluse.

Le *Chapitre II* comportera une formulation mathématique. On y trouve les équations de l'aérothermochimie décrivant les écoulements réactifs. Puis, nous donnons les détails des modèles physiques et chimiques implantés dans le code depuis l'injection du combustible jusqu'à la formation des différents polluants, les modèles de combustion, de turbulence, de transfert de chaleur, de formation de HC, CO, CO₂, NO_x...etc.

Le *Chapitre III* récapitule les connaissances sur le code de calcul numérique CONVERGE, et donne une description du code et son domaine d'utilisation. Aussi, on a présenté en détail la géométrie du moteur diesel utilisé. Une spécification d'injection a aussi été incluse, ainsi que les propriétés physico-chimiques des carburants utilisés.

Le *Chapitre IV* présente les résultats de la simulation numérique obtenus en utilisant le carburant obtenu par pyrolyse dans un moteur diesel. En effet, nous avons envisagé deux cas d'études: cas où le moteur est alimenté par un mélange d'huile de déchet plastique notons HDP, et le cas où le moteur est alimenté en gazole. Les résultats seront analysés, interprétés et discutés.

Enfin une conclusion générale sur le travail a été réalisée.

Chapitre I.
**La valorisation des déchets
plastiques par pyrolyse**

I.1 Introduction

Etant donné que les matériaux polymériques jouent un rôle très important dans notre vie quotidienne, les déchets de plastiques sont devenus un problème qui exige des solutions urgentes. Partout dans le monde la demande pour le plastique, notamment pour les emballages, continue à croître rapidement. Et il est maintenant avéré que les méthodes antérieures de gestion des déchets tels que l'enfouissement, l'incinération et de recyclage n'ont pas réussi à assurer des possibilités de réutilisation complète des déchets plastiques.

Ce chapitre constitue une brève étude bibliographique sur les processus investigués actuellement en vue d'une valorisation énergétique des déchets, plus particulièrement de nature polymérique. Les avantages et les inconvénients de ces procédés sont mis en évidence, étant donné l'influence décisive de la composition chimique du polymère.

On présente ensuite les principaux types de polymères avec des informations sur leur production, utilisation et propriétés physico-chimiques. De plus, on donne aussi les principaux systèmes complets existants pour le traitement des déchets industriels solides qui peuvent, éventuellement, être adéquates pour le traitement ou le co-traitement de déchets de plastiques.

I.2 Présentation générale des procédés thermochimiques appliqués à la valorisation énergétique.

Chaque type de déchet est caractérisé par sa composition élémentaire et/ou son analyse immédiate (le taux de carbone fixe, de matières volatiles, d'humidité) et donc son pouvoir calorifique. [5] La destruction thermique des déchets, avec valorisation de leur contenu énergétique, peut être réalisée principalement de trois façons distinctes : par combustion, par pyrolyse et par gazéification. [6]

La combustion

Si l'atmosphère de traitement est oxydante (riche en oxygène), les matières volatiles gazeuses s'enflamment. La chaleur produite par la combustion rapide du mélange air-

matériaux volatils permet alors de démarrer un processus de combustion à partir de la surface du carbone fixe résiduel.

La récupération d'énergie calorifique est alors effectuée par refroidissement des fumées à l'aide d'une chaudière permettant la production de vapeur d'eau pressurisée et surchauffée pour une conversion chaleur/électricité.

Les polluants inclus dans les déchets étant majoritairement émis en phase gaz, du fait des températures élevées, les fumées refroidies doivent être épurées avant leur rejet en atmosphère. [7]

La gazéification

Si on chauffe le déchet, lorsque l'atmosphère de traitement est en défaut d'air et si on enrichit en vapeur d'eau et dioxyde de carbone (agents réactionnels), les matières volatiles émises ne subiront pas de processus de combustion. Le carbone fixe se mettra à réagir avec H₂O et le CO₂, à des températures de 850-900°C, dans des réactions endothermiques de transformation thermochimique.

L'apport d'énergie nécessaire est en général réalisé en brûlant une faible partie de la charge, soit à l'air, soit à l'oxygène, conduisant ainsi, en fonction de la quantité d'azote introduit, à la génération de gaz pauvres (< 8MJ/Nm³) ou semi-riches (8-18MJ/ Nm³), à comparer au gaz naturel (35 MJ/Nm³).

Le mélange gazeux produit peut alors être récupéré, éventuellement craqué thermiquement pour en supprimer les hydrocarbures lourds (goudrons), puis épuré et refroidi (chaudière de récupération) pour alimenter un moteur à gaz ou une turbine à gaz.

A haute pression, et avec un enrichissement à l'hydrogène, on produira essentiellement du CH₄, gaz riche, utilisable en synthèse chimique (hydrogazéification). [8]

La pyrolyse

Si on chauffe le même déchet, mais cette fois-ci, en absence d'oxygène, seule la première étape du processus décrit précédemment aura lieu et on sera en présence d'une simple

décomposition thermochimique du déchet. On parle alors de pyrolyse du déchet dont les produits sont un mélange de gaz légers non-condensables, de mélange des hydrocarbures légers et lourds et de coke (carbone fixe et d'inertes résiduels).

Si ce déchet est chauffé lentement et/ou à basse température, la production de coke est favorisée. A l'inverse, si on chauffe rapidement et/ou à haute température la production de gaz est favorisée. Cela tient au fait qu'un chauffage rapide, à haute température, diminue la probabilité de réactions secondaires de recombinaison des hydrocarbures légers en hydrocarbures plus lourds.

Que ce soit en incinération, en gazéification ou en pyrolyse la valorisation complète du contenu énergétique d'un déchet libère la même quantité de CO₂ dans l'atmosphère, via soit une combustion directe (incinération) soit une combustion ultérieure en moteur ou turbine des effluents (produits par pyrolyse ou gazéification). [9]

I.2.1 Intérêts – Problématiques énergétiques

En général, la pyrolyse est une technologie simple et peu coûteuse, capable de traiter une grande variété de matières premières, produisant des gaz, des liquides (hydrocarbures et d'autres produits chimiques), et du charbon. Une approche prometteuse est l'obtention d'un produit liquide qui peut être utilisé dans les installations énergétiques existantes.

L'intérêt majeur de cette technique est que ses produits sont hautement valorisables. L'association par exemple de la pyrolyse en four tournant et de la gazéification permet d'obtenir du gaz de synthèse (mélange CO, H₂) pouvant servir d'un côté de matière première à un très large éventail de synthèses de chimie organique et de l'autre côté comme combustible pour les moteurs ou turbines à gaz.

En même temps, d'autres gaz issus de la pyrolyse peuvent servir de combustible pour chauffer le système, ou fabriquer de la vapeur pour la production d'électricité. De plus, les déchets huileux sont valorisables en produits de raffinerie de haute qualité par hydrogénation.

En conséquence, la pyrolyse pourrait avoir un avenir industriel intéressant. Egalement, face à l'approche du pic pétrolier et au danger de l'effet de serre, les énergies alternatives font

l'objet d'un intérêt accru, et la pyrolyse pourrait être un procédé intéressant pour valoriser certains types de déchets actuellement utilisée de manière peu efficace ou même simplement brûlés sans récupération énergétique. [10]

I.2.2 Principes

La maîtrise des débits de vapeurs et des flux thermiques permet de récupérer une quantité maximale de liquide, qui peut servir de carburant et peut également fournir quelques produits chimiques. La partie non condensable comprend un mélange de nombreux gaz (CO, CO₂, H₂, CH₄ etc.) et peut également servir de combustible.

Toutefois, les caractéristiques des différents produits de pyrolyse dépendent de la matière première mais surtout des conditions de pyrolyse.

Comme nous l'avons déjà précisé, la pyrolyse est la décomposition thermochimique de matières organiques en l'absence d'oxygène ou en atmosphère pauvre en oxygène. Il s'agit du premier stade de destruction thermique après la déshydratation. La pyrolyse débute à un niveau de température relativement bas (à partir de 200 °C dans certains cas) et se poursuit jusqu'à 1.000 °C environ. Selon la température finale du processus, la distribution des trois produits résultants (gaz, liquide, solide) est différente. [11]

Un avantage assez particulier de la pyrolyse est la possibilité de concentrer in-situ l'énergie du déchet dans un de ces produits (solide, liquide ou gaz), facilitant ainsi son stockage (comme combustible et non plus comme déchet) et son transport pour une utilisation ultérieure et/ou sur un site différent. Ceci a l'avantage de s'affranchir des contraintes liées au stockage des déchets et de celles liées à leur coût de transport. [12]

Ainsi, en considérant les particularités structurales des polymères, les systèmes les plus efficaces de récupération de l'énergie des polymères utilisent un processus de pyrolyse (simple ou catalytique) pour convertir efficacement les plastiques. De plus, la transformation des polymères par pyrolyse permet la construction des systèmes intégrés et, en conséquence, elle représente une solution viable de traitement des déchets sur les lieux de leur consommation, économique et respectueuse de l'environnement.

Types de technologies de pyrolyse

En fonction des particularités de chauffage, les technologies de pyrolyse peuvent être classées comme étant de deux types : *Pyrolyse rapide* et *Pyrolyse lente*.

La pyrolyse rapide (pyrolyse flash) a lieu en moins de deux secondes avec des vitesses de la chauffe comprises entre 300 et 550 °C/min. Ce type de pyrolyse peut être classé dans les catégories suivantes :

**Pyrolyse rapide ablative* - une pression est appliquée à la matière en transformation pour augmenter la vitesse de décomposition par l'usage de la force centrifuge ou mécanique.

**Pyrolyse rapide cyclonique* - appelé aussi pyrolyse rapide vortex, sépare les solides des gaz non condensables et les retourne dans le mélangeur.

**Pyrolyse rapide tournante* - utilise un réacteur compact à haute intensité dans lequel les déchets à la température ambiante sont mélangés avec du sable chaud.

La pyrolyse lente est une décomposition thermique des déchets à une température de l'ordre de 400 à 500 °C, avec un temps de séjour élevé et vitesse de chauffage faible. Il y a plusieurs procédés de pyrolyse lente appliqués au niveau industriel et les plus connus sont :

**Pyrolyse en réacteur à étages multiples* – le déchet circule d'étage en étage tandis que le gaz circule généralement à contre-courant.

* *Pyrolyse en cylindre rotatif* – le réacteur est équipé d'une double enveloppe réfractaire dans laquelle circulent des gaz d'échappement.

L'apport calorifique nécessaire à la réaction endothermique de pyrolyse, peut être réalisé par chauffage interne, par combustion d'une fraction de produit de pyrolyse en évitent le chauffage indirect, à partir d'une source externe.

Enfin, la pyrolyse des déchets produit moins de fumées (le déficit d'air dans la réaction génère moins de fumées à traiter) et donne ainsi la possibilité de faire des économies sur les équipements de traitement.

Cependant, la pyrolyse des déchets présente des inconvénients :

- Nécessité de prétraitement des déchets (séchage, broyage)
- Le résidu solide issu des déchets reste un combustible relativement pauvre en fonction du type de déchet par rapport au charbon de bois.
- Suivant la nature des déchets traités, les polluants tels que les métaux lourds et les produits chlorés, ne sont pas distribués dans les fractions liquides et gaz, se retrouvent concentrés dans le coke. Ainsi, les installations de valorisation des cokes et huiles de pyrolyse des déchets restent soumises à la réglementation sur l'incinération ou la co-incinération (nécessité d'investissement pour traitement adapté). [13]

I.3 Types de pyrolyseurs et procédés existants

Il existe plusieurs systèmes de traitement de déchets solides par la voie thermochimique, utilisés dans de différents laboratoires spécialisés. La masse des échantillons traités par le réacteur de pyrolyse / gazéification varie de quelques grammes à quelques kilos.

Nous avons sélectionné les procédés les plus développés et qui, d'après les données publiées, ont fourni des résultats reproductibles.

I.3.1 Réacteur à lit fixe

Un réacteur à lit fixe, échelle laboratoire, illustré dans la Figure I.1, a été utilisé dans des expériences de pyrolyse de matière plastique.

Le réacteur est rempli avec 0,7 g de catalyseur FCC et le cylindre est rempli de polymère (1,5 g). De la laine de verre a été placée au fond du réacteur, le dessus du piston et à l'intérieur du lit afin de séparer le catalyseur du polymère. Le système a toujours été chauffé en présence de N₂ (30 ml / min) et la température de chaque zone du four a été contrôlée en utilisant un contrôleur de température. [14]

Dès que la température de la réaction a été atteinte, on introduit les polymères (PE et PP) dans le réacteur et l'expérience a commencé. Le temps de l'expérience est d'environ 17 min et la température de réaction - de 450 °C.

I.3.2 Réacteur sous pression [4]

Williams et Slaney (2007) ont proposé un réacteur de pression de type *Parr Mini Bench Top Reactor*, avec une capacité volumique de 300 ml et une pression de fonctionnement de maximum 19,2 MPa à 500°C. Il a été construit en utilisant l'acier inoxydable de type T316, avec une garniture flexible de graphite.

La Figure I.2 montre un schéma de principe du système d'expérimentation. Un agitateur à lames est fixé à un rotor intérieur de transmission magnétique actionné par un rotor externe de transmission magnétique. Le réacteur est chauffé utilisant un four électrique.

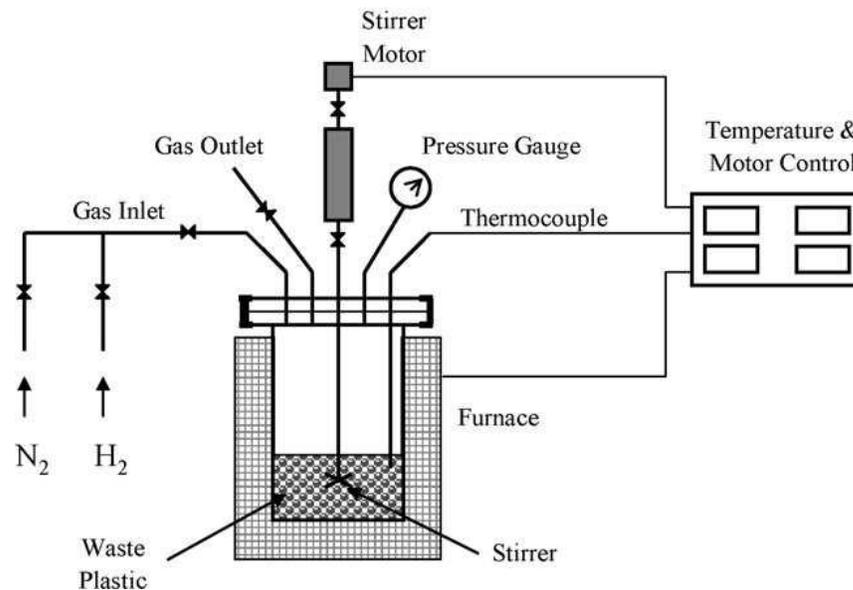


Figure I.2. Schéma de principe du réacteur de pyrolyse/liquéfaction [7]

Les pressions de gaz sont enregistrées par l'indicateur de pression sur le réacteur, mesurant la pression interne du réacteur à différents temps de réaction.

La température de l'échantillon de plastique dans le réacteur a été surveillée par l'intermédiaire d'un thermocouple de type J. Un contrôleur de température programmable commande la puissance fournie au réchauffeur. La puissance de chauffage est programmée

pour suivre un profil de température préréglé, basé sur la lecture de thermocouple de la zone de réacteur.

Un taux de chauffage maximum de 5 °C/min est établi dans les conditions expérimentales précisées et la température finale du processus est de 500 °C ; le temps de maintien à cette température est d'une heure.

Les échantillons de gaz sont prélevés du système et analysés après le refroidissement à la température ambiante. Le poids final des produits non gazeux était déterminé à la fin de chaque expérience après la dépressurisation et le démontage du réacteur.

La pression initiale utilisée pour l'azote était 0,2 MPa, produisant une pression maximale d'environ 10 MPa à 500 °C. La pression initiale utilisée pour l'hydrogène était 1 MPa et la pression à la température finale de réaction était 18 MPa. [7]

I.3.3 Réacteur tube [8]

Le processus de décomposition des mélanges des PP de PS a été suivi dans un système d'expérimentation composé de trois parties principales: une extrudeuse, un réacteur tube et un séparateur (*Angyal et al, 2007*). L'ensemble expérimental est présenté dans la Figure I.3.

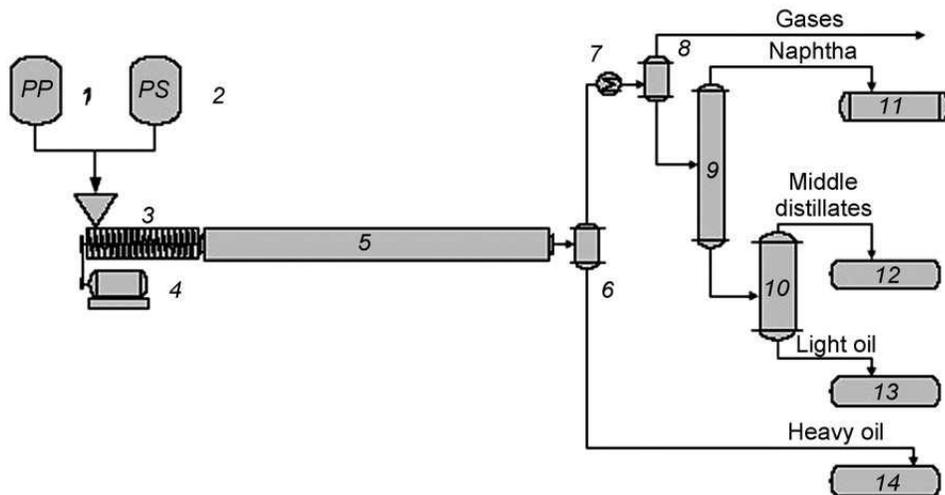


Figure I.3. Réacteur tube [9]

Appareil de craquage : (1, 2) réservoirs de matériaux, (3) extrudeuse, (4) moteur électrique, (5) réacteur, (6, 8) séparateur, (7) refroidisseur, (9, 10) colonne de distillation, (11-14) réservoirs de stockage de colonne de distillation sous vide et de produit

Les polymères sont alimentés par une extrudeuse alors qu'ils sont préchauffés avant d'entrer dans le réacteur. À l'intérieur du réacteur les polymères ont été fondus et leur chaîne de carbone a été coupée dans les fragments moléculaires inférieurs.

La température des parois du réacteur était 510-520 °C et le temps de réaction est de 15-30 min. Dans le séparateur préliminaire, les hydrocarbures formés sont séparés en deux phases : les produits volatiles et l'huile lourde. La température du séparateur était fixée à 350 °C.

La fraction non-condensable à cette température quitte le séparateur par la partie supérieure et passe par le refroidisseur dans un autre séparateur. Dans ce séparateur, le gaz et la fraction liquide ont été séparés à la température ambiante. En outre, la fraction liquide a été séparée par des distillations atmosphériques et sous vide et trois produits ont été récupérés : la fraction naphta, le distillat moyen et le pétrole léger.

Après une caractérisation des liquides et gaz, on observe une forte croissance des composants aromatiques en parallèle avec l'augmentation de la quantité de PS par rapport à celui de PP. [9]

I.3.4 Installation pilote – procédé à lit fluidisé [10]

Le schéma de l'usine pilote de pyrolyse des matières plastiques (PP, PE, PS, ABS, PMMA) à chauffage indirect est présenté sur la Figure. 1.4. C'est un procédé à lit fluidisé, avec une capacité de traitement des déchets de 30 kg/h. La principale caractéristique de l'installation est la présence d'un réacteur à lit fluidisé avec un diamètre intérieur de 450 mm

Le plastique est introduit par une double vis sans fin dans un lit d'appoint de sable de quartz fluidisé à une température comprise entre 600 et 900 °C.

La fluidisation est obtenue avec du gaz de pyrolyse préchauffé à 400 °C. Le chauffage du réacteur se fait indirectement à travers des tubes radiants dans lesquels les gaz de pyrolyse sont brûlés. Les gaz chauds sont utilisés pour préchauffer le gaz de fluidisation par échange de chaleur. Ensuite le gaz de pyrolyse quitte le réacteur et il est nettoyé de poussières fines et suies dans un cyclone et refroidi à température ambiante. Le gaz passe par deux colonnes remplies de corps en verre, et il est condensé. Les produits liquides sont ensuite distillés et on récupère les différentes fractions.

Le gaz, qui est en grande partie libre de produits condensables, est purifié dans un filtre électrostatique, mis sous pression par cinq compresseurs à membrane parallèle à 2-3bar et stocké.

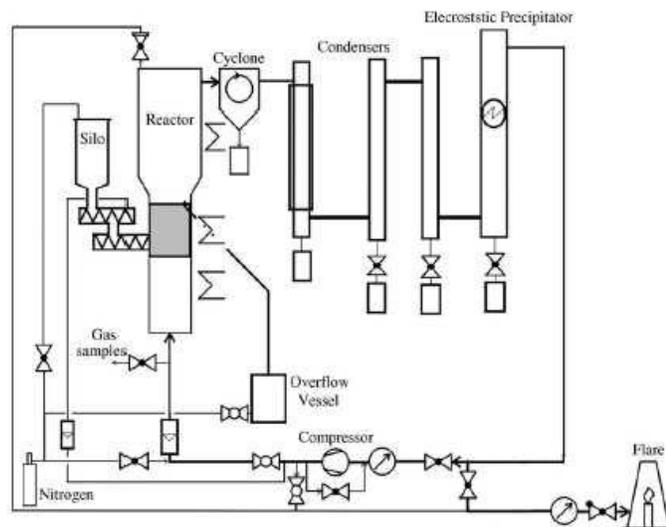


Figure I.4. Schéma du procédé à lit fluidisé [11]

I.3.5 Le procédé WGT [15]

Le procédé de pyrolyse WGT (Figure I.5) est un procédé de pyrolyse lente à haute température. Les matériaux d'alimentation sont soumis à une température élevée dans un

environnement en défaut d'oxygène. Avant l'introduction de la matière à traiter, le réacteur est purgé à l'aide d'un gaz inerte, tel que l'azote.

L'alimentation est faite dans un tambour rotatif cylindrique horizontal chauffé en double enveloppe à une température variant entre 750°C et 850 °C.

Les gaz produits sont séparés des cendres restantes dans un cyclone chaud monté en sortie du réacteur. Le gaz chaud produit est refroidi avant le traitement dans un système classique de traitement de gaz.

La qualité du gaz produit et épuré convient pour les combustibles type RDF, à l'alimentation directe d'un moteur pour la génération de courant électrique. Le gaz produit peut également alimenter une chaudière.

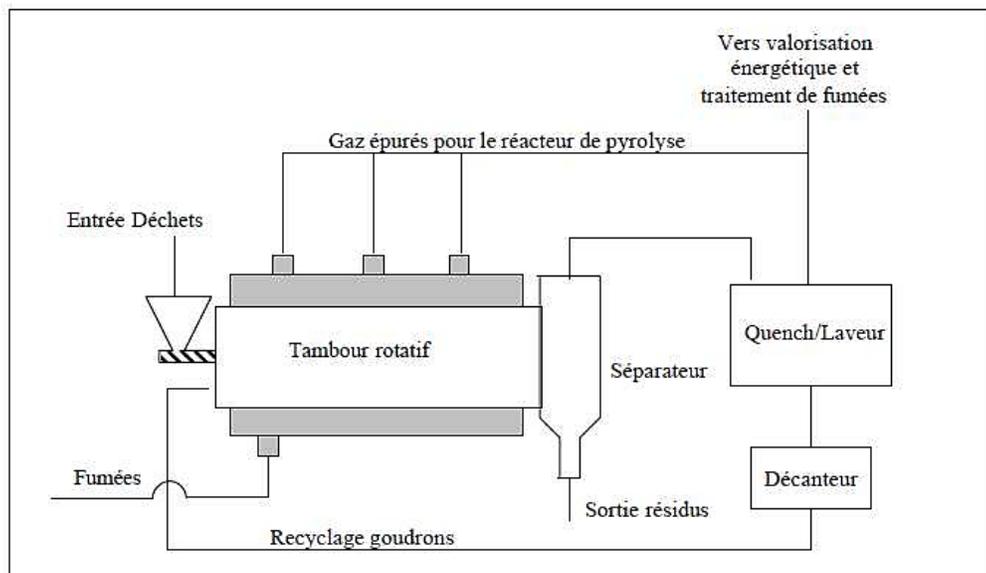


Figure I.5. Schéma de principe du procédé WGT [15]

Les produits traités sont la biomasse, boues de station d'épuration, déchets plastiques, déchets animaux.

I.3.6 Procédé Thermolysef [13]

Le procédé de pyrolyse "Thermolysef" en bain de sels fondus permet de valoriser différents types de déchets. Il permet d'obtenir, par craquage thermique, des hydrocarbures aromatiques et/ou aliphatiques. Le schéma de principe est présenté sur la Figure I.6.

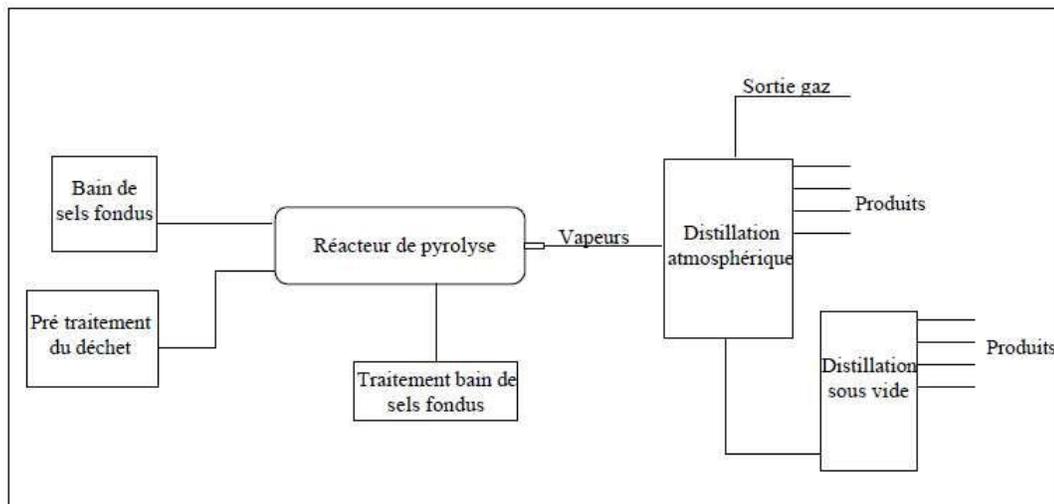


Figure I.6. Schéma de principe du procédé Thermolysef [6]

Le bain de sel, régénérable, piège les halogénés et le soufre, et complexe (par combinaison chimique) les métaux lourds contenus dans les produits à pyrolyser. Ces éléments sont donc totalement absents des produits de pyrolyse.

Des déchets agricoles, matières plastiques, matériaux d'emballage sont traités avec ce procédé.

I.4 Les matières premières [9], [11], [14]

Dans le but de mettre en évidence l'importance pratique – énergétique et environnementale liée à ce type de déchets, nous avons structuré les principales classes des polymères qui sont envisageables pour une valorisation énergétique et / ou de matières.

On a éliminé les matières avec composants polluants a priori PVC, PC, ABS-PC.

I.4.1 Polyéthylène

Le **polyéthylène**, ou **polyéthène** (sigle générique PE), est le polymère le plus simple et le moins cher. Il appartient à la famille des polyoléfines. C'est le plus important polymère de synthèse, sa production mondiale étant estimée à 80 millions de tonnes en 2008.

Sa température de transition vitreuse est très basse (voisine de $-110\text{ }^{\circ}\text{C}$) et, selon les variétés, sa température de fusion peut atteindre $140\text{ }^{\circ}\text{C}$, mais sa résistance mécanique fléchit nettement dès $75\text{ à }90\text{ }^{\circ}\text{C}$. Contrairement au polypropylène, la température d'utilisation ne peut excéder le point d'ébullition de l'eau. Sa nature paraffinique explique sa grande inertie chimique.

Il existe différents types de polyéthylène, dont les homopolymères (LDPE et HDPE) et des copolymères (LLDPE, par exemple).

Son nom vient du fait qu'il est obtenu par polymérisation des monomères d'éthylène ($\text{CH}_2 = \text{CH}_2$) en une structure complexe de formule générique : $-(\text{CH}_2 - \text{CH}_2)_n-$. La molécule d'éthylène est présentée sur la Figure I.7.



Figure I.7. Molécule d'éthylène et le modèle d'une chaîne de polyéthylène [9]

Le polyéthylène est la seule polyoléfine qui puisse être préparée par voie radicalaire et elle est surtout issue de la pétrochimie. En juin 2007, la compagnie brésilienne Braskem a annoncé la certification d'un polyéthylène « vert », synthétisé à partir d'éthanol issu de la canne à sucre.

Les polyéthylènes sont classés en fonction de leur densité qui dépend du nombre et de la longueur des ramifications présentes sur les chaînes moléculaires :

- **PE-BD**, polyéthylène basse densité

- **PE-BDL**, polyéthylène à basse densité linéaire
- **PE-HD**, polyéthylène haute densité
- **PE-UHPM**, polyéthylène à masse molaire élevée
- **PE-R**, polyéthylène réticulé
- **PE-RHD**, polyéthylène réticulé à haute densité
- **PE-MD**, polyéthylène à moyenne densité
- **PE-TBD**, polyéthylène à très basse densité

Le polyéthylène est un polymère thermoplastique, translucide, chimiquement inerte (il est plus résistant aux oxydants forts que le polypropylène), facile à manier et résistant au froid.

Les trois principales familles de PE sont le PEHD, le PEBD et le PEBDL .

Le PEBD est plus ramifié que le PEHD, ce qui signifie que les chaînes s'assemblent moins bien entre elles. Les forces intermoléculaires de type Van der Waals sont donc plus faibles. Il en résulte un taux de cristallinité moindre, une plus faible densité, une malléabilité et une résistance aux chocs plus élevés. En revanche, la PEHD est plus rigide.

Les principales applications du PEHD sont des produits rigides : flacons (détergents, cosmétiques...), bouteilles, boîtes type Tupperware, jerricans etc. Les principales applications du PEBD sont des produits souples : sacs, films, sachets, sacs poubelles, récipients souples (ketchup, crèmes hydratantes...) etc.

Le polyéthylène réticulé (PER) montre une meilleure tenue thermique que la PE simple. Pour la fabrication de gaines de câbles, la réticulation se fait en général après extrusion.

Le UHMWPE (PE à poids moléculaire « ultra haut »), tel le Dyneema, est utilisé pour ses hautes performances (un rapport résistance/masse 40 % supérieur à celui des aramides (Kevlar)). On le trouve dans les équipements sportifs (ski, snow-board, surf, cerfs-volants etc.), le matériel de protection, notamment balistique (gilets pare-balles) ou moto (tenues à haute résistance à l'abrasion), les implants chirurgicaux, les plaques pour remplacer la glace des patinoires etc.

Propriétés physiques :

- *température de transition vitreuse* ~ -110 °C
- *température de fusion* : 85 à 140 °C
- *masse volumique* : 0,91–0,96 g·cm⁻³
- *température d'auto-inflammation* : 330 à 410 °C
- *point d'éclair* : 341 °C

Aspect physique : Solide de forme variable blanc.

Dangers physiques : Possibilité d'explosion de poussière si sous forme de poudre ou de granulés mélangés à l'air.

Dangers chimiques : La substance se décompose en chauffant fortement, produisant des fumées toxiques et irritantes, en provoquant des risques d'incendie et d'explosion. Réagit violemment avec le fluor. Réagit avec les acides forts et les oxydants forts.

Evaluations de la Cancérogénicité : Groupe 3 = Inclassables quant à leur cancérogénicité pour l'homme

Bien que le polyéthylène puisse être recyclé, la plus grande partie du polyéthylène commercial finit dans des décharges. Le polyéthylène n'est pas considéré comme biodégradable, parce que, sauf quand il est exposé aux rayons UV du soleil, il faut plusieurs siècles jusqu'à ce qu'il soit efficacement dégradé.

I.4.2 Polypropylène

Le **polypropylène** (ou **polypropène**) isotactique, de sigle PP (ou PPI) et de formule chimique $(-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CH}_3)-)_n$, est un polymère thermoplastique semi-cristallin de grande consommation. Le polypropylène isotactique (Figure I.8) est une polyoléfine résultant de la polymérisation des monomères propylènes $[(\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_3)]$ en présence de catalyseurs, suivant principalement le procédé Ziegler-Natta.

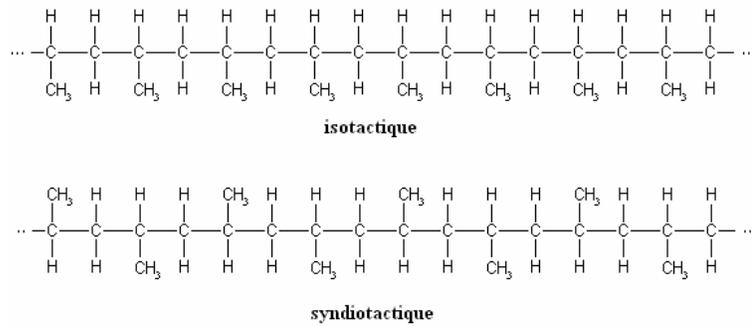


Figure I.8. Modèles isotactique et syndiotactique de polypropylène.[11]

Le polypropylène de grade « injection » est très facilement recyclable ; le PP de grade « film » est au contraire beaucoup plus délicat à recycler. Le PP « film » imprimé est sûrement l'un des plastiques usuels les plus difficiles à recycler.

Le polypropylène est translucide à opaque, hydrophobe, dur, semi-rigide et très résistant à l'abrasion. Pour améliorer ses propriétés mécaniques, il est courant qu'il soit chargé en fibre de verre ou talc (10-30% massique).

Le polypropylène expansé est une mousse blanche ressemblant au polystyrène expansé, mais avec une mémoire de forme lui permettant de se déformer sans casser et de conserver sa structure.

Le propylène peut former des homopolymères (polypropylène), des copolymères.

Le co-monomère le plus utilisé est l'éthylène pour donner des polyoléfinés élastomères comme l'éthylène-propylène (EPR ou EPM) et l'éthylène-propylène-diène monomère (EPDM).

Les propriétés physiques de polypropylène sont présentées dans le Tableau.I.1.

Tableau I.1. Propriétés physiques du PP [11]

	Atactique (PPa)	Syndiotactique (PPs)	Isotactique (PPi)
Cristallinité	Amorphe	Cristallinité moyenne (20 - 30 %)	Cristallinité élevée (50 - 70 %)
Point de fusion	Aucun	F = 130 °C pour un PPs ayant une cristallinité de 30 %. F = 130 - 150 °C.	F = 171 °C pour un PP parfaitement isotactique F = 160 - 166 °C pour les grades commerciaux.
Masse volumique (g·cm⁻³)	0,85 – 0,90	0,89 – 0,91	0,92 – 0,94
Produits commerciaux	Affichent une faible résistance mécanique et présentent peu d'intérêt industriel	Peu nombreux	Courants

On trouve beaucoup de pièces moulées en polypropylène pour la construction d'automobiles, notamment les pare-chocs, les tableaux de bord, l'habillage de l'habitacle et les réservoirs d'essence et de liquide de frein.

Le polypropylène est aussi utilisé pour les emballages alimentaires grâce à sa résistance à la graisse et son aspect brillant. Il est également utilisé pour la fabrication de tissus d'ameublement, de vêtements professionnels jetables (combinaisons de peinture, charlottes, masques chirurgicaux etc.), de sacs tissés à haute résistance, de géotextiles et de géo-membranes ; on le trouve aussi sous forme de fibres dans les cordages et les tapis synthétiques. Des pailles à boire sont fabriquées en polypropylène.

En longueur nominale de 6 à 18 mm, la fibre de polypropylène est l'adjuvant idéal dans les mélanges en béton pour diminuer le retrait plastique, les fissurations et les lézardes, et améliorer les propriétés de la surface du béton.

Pour gagner du poids tout en renforçant la rigidité, il peut être moulé comme du carton ondulé ; on parle alors de polypropylène alvéolaire (PPA). Il peut aussi avoir une structure en nid d'abeille.

Le polypropylène présente de nombreux avantages : emballage alimentaire (inodore et non toxique), indéchirable, très résistant à la fatigue et à la flexion, très peu dense, chimiquement inerte, stérilisable et recyclable. C'est de plus un excellent isolant électrique.

Par contre, il est fragile (cassant) à basse température (car sa Tg est proche de la température ambiante), sensible aux UV, moins résistant à l'oxydation.

Sa production en masse est source d'impacts environnementaux et de consommation de pétrole, ainsi que d'émission de gaz à effet de serre. Son impression ou certains additifs (fibres, métaux lourds, ignifugeants) peuvent rendre son recyclage difficile ou impossible de manière rentable.

I.4.3 Polystyrène

Le **polystyrène** (PS) est le polymère $-(CH_2-CH(Ph))_n-$, obtenu par la polymérisation des monomères de styrène $CH_2=CH-Ph$ (Figure I.9.). Il peut se présenter sous différente forme (Cristal, Choc, Expansé etc.).

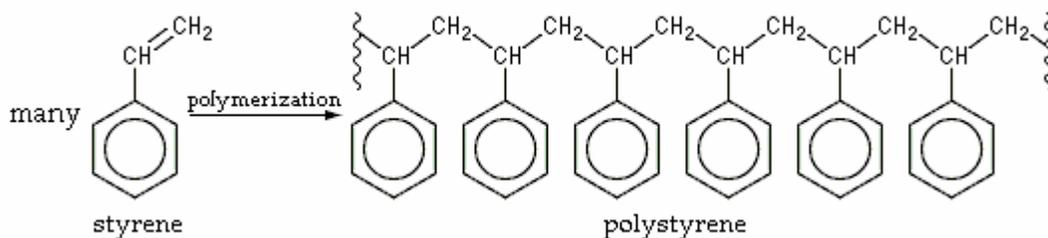


Figure I.9. Modèle structurel du polystyrène [11]

Selon sa tacticité, les propriétés du polystyrène sont présentées dans le Tableau I.2.

Tableau I.2. Propriétés physiques du PS [14]

	Atactique	Syndiotactique	Isotactique
Cristallinité	Amorphe	Cristallinité moyenne	Cristallinité élevée
Point de fusion , °C	Pas de point de fusion	270	240
Produit commercial	Oui	Peu	Non
Première fabrication		1985 : N. Ishihara (Idemitsu Kosan Co. LTD)	1955 : Giulio Natta
Méthode de fabrication		Polymérisation par catalyse avec un métallocène	Polymérisation Ziegler-Natta

Le polystyrène de base, appelé PS cristal, est une matière dure et cassante, pouvant être transparente ou colorée. Ses propriétés mécaniques et thermiques peuvent être modifiées par l'ajout de plastifiants ou de butadiène (caoutchouc) pour en faire un polystyrène dit choc. C'est un matériau très facile à transformer, par exemple par injection ou extrusion.

Le polystyrène, mis à part son côté cassant, souffre aussi d'une faible résistance chimique et d'une faible résistance à la fissuration sous contrainte ("ESCR"). L'acétone le dissout très facilement, les corps gras le fragilisent rapidement.

Le polystyrène est le plus commun de la famille des polymères styréniques, qui contient les différents copolymères du styrène : styrène-butadiène (SBR), styrène-acrylonitrile (SAN), acrylonitrile butadiène styrène (ABS), acrylonitrile styrène acrylate (ASA).

Le PSE ou polystyrène expansé est obtenu par mélange d'un gaz et de PS cristal.

Avant les préoccupations pour la couche d'ozone, on utilisait le fréon, un gaz CFC (chlorofluorocarbone), remplacé depuis les années 90 par le butane ou le pentane.

L'application la plus connue du grand public est le polystyrène expansé ou PSE (parfois appelé "frigolite"), mousse blanche compacte qui sert à emballer les appareils sensibles aux chocs (électroménager, chaîne Hi-Fi ...).

Les propriétés de ces plastiques industriels sont utilisées dans de nombreux domaines :

- Résistance aux chocs :
 - Articles de décoration ou matériel de bureau - PS cristal injecté (double-décimètres, équerres et rapporteurs d'écolier)
 - Logistique - Calages en PSE - transport de produits fragiles
 - Maquettisme (maquette) - très utilisé dans le domaine où les pièces sont présentées en grappe à peindre.
 - Maison de disques - Protection en PS cristal (Boîtier CD)

- Isolant thermique :
 - Bâtiment/constructions - cloisons isolantes, plancher, plaque, coffrage (blocs ou panneaux) sous forme expansée (PSE ou en anglais EPS).
 - Transport de produits frais ou surgelés - parois en PSE.
 - Grande distribution - rayon libre-service pour l'emballage des produits frais (viande tranchée, charcuterie, plateau barbecue etc.)
 - Mareyage et poissonnerie - emballage alimentaire en PSE (caisse marée)
 - Stockage de produits frais ou surgelés parois en PSE (chambres frigorifiques)

- Imperméabilité / Nettoyabilité :
 - Alimentaire - Emballage en PS choc (pots de yaourt, crème fraîche)
 - Hématologie - matériel en PS cristal (Plaque de laboratoire, flacon)

- RHF (Restauration Hors Foyer) / vaisselle à usage unique – Gobelets en plastique en PS choc thermoformé (distributeurs automatiques en particulier) ou transparent en PS cristal injecté (flûtes et verres à pied pour cocktails, verrine). Couverts en plastique à usage unique (PS Blanc, opaque, avec additif choc).
- Densité :
 - Nautisme - Flotteurs en PSE (balises, ligne d'eau).
 - Logistique - Réduire le poids des emballages (Feuille allégée en XPS)
 - De 16 à 1060 kg/m³, écart dû à l'addition de divers matériaux comme le béton armé
 - Propriété électrostatique :
 - Médecine - traitement des hyperkaliémies par résine échangeuse de cations en polystyrène de sodium ou Kayexalate

Des prestataires de recyclage s'intéressent de plus en plus à ce matériau sous forme pure. La demande en matière de développement durable augmentant, la filière de valorisation matière du polystyrène est en pleine expansion et des entreprises proposent de broyer le plastique afin de le commercialiser à un prix concurrentiel au polystyrène sortant des usines pétrochimique. Malheureusement, cette voie de recyclage ne se retrouve que sur des cas précis (dans le cadre d'entreprises consommant une grande quantité de polystyrène) car il est difficile de mettre en place une filière de recyclage du polystyrène auprès des collectivités.

A notre échelle individuelle de consommateur, ce déchet n'entre pas dans la liste des matériaux collectables lors du tri sélectif et son élimination pose un véritable problème ; actuellement il termine généralement sa vie dans les incinérateurs.

Selon l'Agence Locale de l'Énergie de l'agglomération lyonnaise, les isolants à base de polystyrène ne sont pas recyclables. L'énergie grise du polystyrène expansé (850 kWh/m³) fait partie des plus élevées de tous les autres isolants regroupés. De plus, cet isolant développe de façon assez conséquente les champs électrostatiques.

Le Polystyrène expansé (PSE) dégage du pentane contribuant à l'effet de serre (formation d'ozone photochimique) : 0,000519 kg équivalent éthylène /UF/an. La substance se décompose en chauffant fortement au-dessus de 300°C, produisant des fumées toxiques et irritantes comprenant le styrène. Réagit avec les oxydants forts. (*Agence Locale de l'Énergie de l'agglomération lyonnaise - dans sa fiche technique sur le polystyrène expansé*)

D'après l'Agence Internationale de Recherche sur le Cancer, le styrène pourrait être cancérigène pour l'homme. Plusieurs études effectuées sur une population de salariés exposés au styrène ont mis en évidence un risque de leucémie. Des études sur des animaux ont montré que le styrène est faiblement cancérigène par inhalation ou ingestion.

I.4.4 Acrylonitrile-Butadiène-Styrène

L'**acrylonitrile butadiène styrène** (ABS) (formule chimique $(C_8 H_8)_x \cdot (C_4 H_6)_y \cdot (C_3 H_3 N)_z$ monomères qui on retrouve sur la Figure I.10) est un thermoplastique employé par l'industrie pour des produits rigides, légers et moulés.

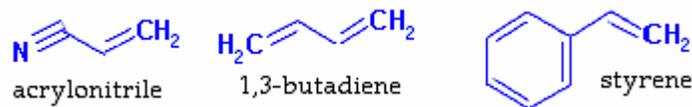


Figure I.10. Monomères en polymère d'ABS [9]

L'ABS est un copolymère polyphasé constitué d'un copolymère acrylonitrile et styrène, avec des nodules de butadiène noyés dans la matrice acrylonitrile/styrène. Le polybutadiène apporte de la résistance aux chocs et assouplit le polystyrène-acrylonitrile.

Il se recycle facilement avec un étuvage et peut se combiner avec les autres styréniques (PS, PSB, SAN). Pour améliorer sa tenue thermique, un 4ème monomère (l'alpha-Methylstyrène) peut être incorporé. On parle alors d'ABS Chaleur.

L'ABS a une résistance aux chocs nettement améliorée (entre -40 °C et 80 °C).

L'ABS est opaque du fait de sa structure à deux phases styréniques. La résistance chimique est semblable à celle d'un SAN ou d'un VSR. En raison de ses bonnes qualité d'aspect de surface, de sa stabilité dimensionnelle et de son aptitude à la décoration, l'ABS est beaucoup utilisé pour des applications de capotage dans des secteurs comme l'électroménager, la téléphonie, le matériel informatique, le jouet...

La métallisation par galvanisation est répandue. Il faut d'abord rendre la pièce conductrice par dépôt à partir d'une solution colloïdale, d'une couche métallique. L'ABS est préalablement traité dans un bain d'acide chromique.

L'ABS est également utilisé dans les industries nautiques et, en raison de ses propriétés antichocs et de son aspect brut, est la base de nombreuses armes de loisirs.

I.4.5 Poly méthacrylate de méthyle

Le poly méthacrylate de méthyle (souvent abrégé en PMMA, de l'anglais Polymethyl Methacrylate) est un thermoplastique transparent dont le monomère est le méthacrylate de méthyle (MAM).

L'obtention du PMMA est présentée sur la Figure I.11. Ce polymère est plus connu sous son premier nom commercial de Plexiglas (nom déposé).

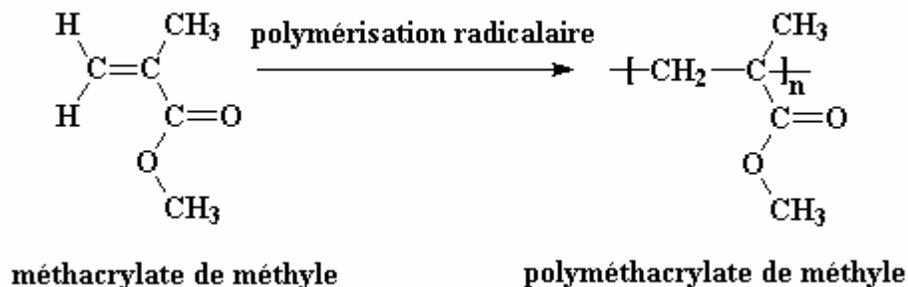


Figure I.11. Obtention du PMMA [12]

Il se polymérise à l'aide de radicaux qui amorcent une polymérisation radicalaire en chaîne. Également possible, la polymérisation anionique, à l'aide d'amorceurs nucléophiles de types carbanions.

Il existe trois principaux procédés de polymérisation :

- par coulée entre deux plaques de verre
- en suspension
- en masse

Les deux derniers procédés sont principalement utilisés pour la production de plaques extrudées et la fabrication de granules.

Le PMMA peut être moulé par compression, injection, coulée, soufflage et extrusion. Les feuilles et plaques de PMMA sont facilement thermoformées. On peut facilement le métalliser. Le PMMA peut également être soudé par ultrasons.

Sa transition vitreuse (T_g) est comprise entre 80 °C et 110 °C. La modification du groupe ester induit également un abaissement du T_g (ex. Ethyl +65 °C, n-Buthyl +20 °C).

Le PMMA peut également être modifié par copolymérisation avec d'autres monomères tels que des acrylates, des acrylonitriles, des styrènes et butadiènes.

Le PMMA est un polymère avec une très grande transparence, très limpide, avec un aspect brillant, propriétés optiques exceptionnelles (transmission lumineuse supérieure à celle du verre, transparence, limpidité, brillance), aspect de la surface très lisse et brillant.

De plus, il est léger, ayant une masse volumique de 1,19 g/cm³ (beaucoup plus léger que le verre), mais avec une excellente tenue aux rayons ultraviolets et à la corrosion.

Il est utilisé comme enseigne, bandeaux lumineux, panneaux signalétiques et publicitaires, présentoir, gravure, ameublement, agencement de magasin, décoration, pièces industrielles, prothèse dentaire, membranes pour hémodialyseurs etc.

Le PMMA a de nombreux avantages dont deux principaux : il est transparent et il est résistant. Il peut remplacer le verre dans la fabrication de vitres car il permet une excellente transmission de la lumière. Il transmet jusqu'à 92 % de la lumière visible, soit plus que le verre. Pour sa résistance aux ultraviolets, il est utilisé pour les vitrages, les protections de tuiles ou certains éléments de voiture (feux arrière).

Les surfaces de PMMA montrent une grande rigidité, difficilement rayable, ainsi qu'une bonne résistance aux produits chimiques.

Le PMMA peut être fondu puis remoulé, mais c'est surtout par dépolymérisation qu'on peut le recycler facilement. Par chauffage, le PMMA rend son monomère de départ, le MAM. Celui-ci peut alors être réutilisé pour une nouvelle polymérisation. [16]

I.5 Conclusions

Comme nous pouvons le constater, les laboratoires spécialisés dans ce domaine se sont concentrés sur la caractérisation complète des produits de pyrolyse, étant donné la nature très différente des composants obtenus en fonction de la composition chimique des matières premières et des conditions de traitement thermochimique. Des dispositifs d'analyse complexes ont été utilisés pour les fractions condensables et pour celles non condensables.

En ce qui concerne les installations pilote exploitées actuellement, les travaux ont été orientés dans la production du gaz pour être brûlé directement dans des systèmes adaptés et la réutilisation de la chaleur de combustion dans le cycle de chauffage, c'est-à-dire pour une autoconsommation par le procédé lui-même (sans production d'énergie). [22]

On constate encore une fois la grande diversité des matériaux polymériques et le fait que pratiquement tous les secteurs d'activité humaine rejettent des déchets plastiques.

Nous pouvons conclure l'importance de l'étude entamée sur l'identification des voies de valorisation énergétique de ce type de déchets.

Chapitre II.

**Formulations
mathématiques**

II.1 Introduction [23]

La combustion dans les moteurs diesel à injection directe est un processus très complexe, mettant en cause l'interaction d'une multitude de phénomènes tels que: la turbulence, le transfert thermique et les réactions chimiques complexes qui agissent simultanément dans la chambre de combustion. De plus, les contraintes actuelles, tant écologiques qu'économiques, forcent les constructeurs automobiles à effectuer des travaux de recherche liés à la combustion turbulente. De ce fait, il est nécessaire de comprendre les processus physique et chimique prépondérants au sein d'une chambre de combustion qui permettent non seulement l'amélioration des systèmes actuels mais aussi le développement de nouvelles technologies. Dans ce contexte, l'utilisation de l'outil numérique permet de réduire les coûts et les temps d'études. Il est très simple de modifier numériquement la géométrie ou les conditions d'utilisation (pression, température...). Les investigations réalisées avec les codes CFD (Computational Fluid Dynamics) par exemple *Converge*, KIVA, Fluent et CFX... permettent alors de tester un grand nombre de solutions pour ne retenir que les plus pertinentes pour des tests expérimentaux.

Dans le cadre de la modélisation de la combustion turbulente, l'utilisation d'un code de calcul comme *Converge* représente une bonne démarche de compréhension et de prédiction des phénomènes qui se manifestent à l'intérieur du cylindre d'un moteur à combustion interne alimenté par un carburant on note *HDP (Les huiles des déchets plastiques)*.

Nous avons utilisé, dans le cadre de ce travail et grâce à un programme de coopération, le code CFD *ConvergeV2.1*, qui a été développé à l'université de Middleton, Wisconsin en 2008 [24].

II.2 Equations de l'aérothermochimie turbulente [25]

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

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

Les vecteurs unités suivant les directions en coordonnées cartésiennes $x, y,$ et $z,$ seront notés, $i, j,$ et k respectivement. Le vecteur de position X est défini comme suit :

$$\mathbf{X} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k} \dots\dots\dots (\text{II.1})$$

L’opérateur mathématique ∇ est donné par :

$$\nabla = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \dots\dots\dots (\text{II.2})$$

et le vecteur vitesse du fluide \vec{U} est donné par :

$$\vec{U} = u(x, y, z, t)\vec{i} + v(x, y, z, t)\vec{j} + w(x, y, z, t)\vec{k} \dots\dots\dots (\text{II.2})$$

La simulation mathématique d'un écoulement turbulent avec ou sans réaction chimique est classiquement menée à l'aide de la résolution des équations aux dérivées partielles non linéaires et couplées.

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

$$\partial(\rho \phi) / \partial t + \nabla(\rho \mathbf{u} \phi) = \nabla(\Gamma_{\phi} \text{grad } \phi) + S_{\phi} \dots\dots\dots (\text{II.4})$$

Accumulation Convection Diffusion Source

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

II.2.1 Equation de continuité de l’espèce chimique m [25]

La détermination de la fraction massique pour chaque espèce, $m,$ s’obtient par la solution de l’équation de transport de la I^{me} espèce, sous la forme [25, 26]:

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left[\rho D \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \right] + \dot{\rho}_m^c + \dot{\rho}_m^s \dots \dots \dots (II.5)$$

Où ρ_m est la masse volumique de l'espèce, ρ est la masse volumique globale, et \mathbf{u} est la vitesse du fluide.

Avec $\dot{\rho}_m^c$ et $\dot{\rho}_m^s$ les termes sources dus à la chimie et le spray respectivement.

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

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

II.2.2 Equation de conservation de la masse totale [26]

Par sommation des équations (II.5) sur toutes les espèces, on obtient l'équation de la conservation de la masse totale du fluide.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = \dot{\rho}^s \dots \dots \dots (II.6)$$

La masse est conservée dans les réactions chimiques.

II.2.3 Equation de conservation de quantité de mouvement [25]

L'équation de conservation de la quantité de mouvement du fluide est donnée par:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) = - \frac{1}{\alpha^2} \nabla p - A_0 \left(\frac{2}{3} \rho \mathbf{k} \right) + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + F^s + \rho \mathbf{g} \dots \dots \dots (II.7)$$

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

Dans l'équation (II.7) la quantité A_0 est égale à zéro pour les écoulements laminaires et à l'unité si un modèle de turbulence est utilisé. Le tenseur des contraintes visqueuses est de forme newtonienne :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mu [(\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T] + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} \cdot \mathbf{I} \dots \dots \dots (II.8)$$

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

II.2.4 Equation de conservation de l'énergie [26]

L'équation de l'énergie interne I est, exclusive à l'énergie chimique.

$$\frac{\partial \rho I}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} I) = -\mathbf{p} \nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla J + (1 - A_0) \sigma : \nabla \mathbf{u} + A_0 \rho \varepsilon + \dot{Q}^c + \dot{Q}^s \dots \dots \text{(II.9)}$$

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

$$\mathbf{j} = -\mathbf{K} \nabla T - \rho \mathbf{D} \sum_m h_m \nabla (\rho_m / \rho) \dots \dots \dots \text{(II.10)}$$

Où T est la température du fluide et h_m l'enthalpie spécifique de l'espèce m , \mathbf{K} est la conductivité thermique. \mathbf{K} est calculé à partir du nombre de Prandtl et la chaleur spécifique à pression constant C_p

$$\mathbf{K} = \frac{\mu C_p}{Pr} \dots \dots \dots \text{(II.11)}$$

La chaleur spécifique du mélange est calculée selon la relation

$$C_p(T) = \sum_m \frac{\rho_m}{\rho} C_{pi}(T) \dots \dots \dots \text{(II.12)}$$

La chaleur spécifique des espèces C_{pm} comme les enthalpies spécifiques h_m dans l'équation (II.10) sont obtenues à partir des tables de JANAF en fonction de la température. Le terme ε de l'équation (II.9) représente la dissipation visqueuse, où ε est le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente. Deux termes sources surgissent dans l'équation (II.9) : \dot{Q}^c due à la chimie et \dot{Q}^s due au spray.

II.2.5 Equation de comportement du fluide [25]

On suppose que le fluide est un mélange homogène de gaz parfaits. Ainsi on peut écrire les relations suivantes :

$$P = R_0 T \sum_m (\rho/W_m) \dots\dots\dots (II.13)$$

$$I(T) = \sum_m (\rho_m/\rho) I_m \dots\dots\dots (II.14)$$

$$Cp(T) = \sum_m (\rho_m/\rho) C_{pm} \dots\dots\dots (II.15)$$

$$h_m(T) = I_m(T) + R_0 T/W_m \dots\dots\dots (II.16)$$

Ou R_0 est la constante universelle des gaz, W_m est la masse moléculaire de l'espèce m , $I_m(T)$ est son énergie interne spécifique. La chaleur spécifique des espèces est fournie par la table des données thermodynamiques JANAF.

II.3 Approche de résolution RANS [23,24 ,25]

La méthode RANS constitue un outil performant et moins complexe dans l'étude des écoulements réactifs, particulièrement adaptées à l'étude du comportement instationnaire des écoulements turbulents. Cette méthode consiste à résoudre les équations de Navier Stokes moyennées statistiquement. Elle permet d'avoir accès uniquement aux grandeurs moyennes.

Cet outil de simulation nécessite un plus grand effort de modélisation. Il est aujourd'hui l'outil le plus utilisé dans la recherche industrielle car son coût de mise en place est le plus faible. Nous considérons dans ce travail une approche 3D. RANS est une méthode statistique qui consiste à décomposer chaque variable de l'écoulement en la somme de sa moyenne d'ensemble (moyenne de Reynolds) et de sa fluctuation :

$$\varphi = \bar{\varphi} + \varphi' \dots\dots\dots (II.13)$$

$$\bar{\varphi} = \lim_{Ns \rightarrow \infty} \sum_{m=1}^{Ns} \frac{\varphi(m)}{Ns} \dots\dots\dots (II.14)$$

En appliquant cette opération de décomposition aux équations de conservation, un terme représentant la composante turbulente de l'écoulement apparait. Ce terme s'appelle le tenseur de cisaillement de Reynolds et n'est pas connu a priori. La fermeture du problème consiste à le modéliser. Dans le cas des écoulements de fluide avec importante variation de la densité, Favre a proposé d'utiliser une moyenne pondérée par la masse:

$$\tilde{\varphi} = \frac{\overline{\rho \varphi}}{\bar{\rho}} \dots\dots\dots (II.15)$$

Avec : $\varphi = \tilde{\varphi} + \varphi'$, $\bar{\rho} \tilde{\varphi} = \rho \varphi + \overline{\rho' \varphi'}$

La décomposition de Favre appliquée aux équations (II.5), (II.6), (II.7) et (II.9) donne un nouveau système d'équations, semblable au système initial (avec la densité des espèces $\rho i = \rho Y_i$).

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

II.3.1 Equation de continuité de l'espèce m

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{Y}_m \tilde{u}) = \nabla \cdot [\bar{\rho} D \nabla \tilde{Y}_m - \overline{\rho \tilde{u}' Y'}] + \overline{\rho \tilde{Y}_m^s} \dots\dots\dots (II.16)$$

II.3.2 Equation de conservation de la masse totale

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u}) = \overline{\rho^s} \dots\dots\dots (II.17)$$

II.3.3 Equation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{u}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} - \overline{\sigma \tilde{u}'' \tilde{u}''}) - \nabla \tilde{p} + \overline{\tilde{F}^s} + \bar{\rho} \tilde{g} + A_0 \nabla (2/3 \rho k) \dots\dots\dots (II.18)$$

II.3.4 Equation de conservation de l'énergie interne

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{I}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{I}) = -\tilde{p} \nabla \cdot \tilde{u} - \nabla \cdot (\overline{\tilde{J} + p \tilde{u} I}) + A_0 \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + \overline{\tilde{Q}^c} + \overline{\tilde{Q}^s} \dots\dots\dots (II.19)$$

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

II.4 Les sous modèles physiques [23, 24, 25]

Les termes qui apparaissent dans les équations moyennées présentent l'interaction du mouvement moyen et de la turbulente. Ce sont des termes supplémentaires qui posent un

problème de fermeture du système d'équations. Le nombre d'inconnues devenant plus grand que le nombre d'équations, nous avons donc besoin de modèles de turbulence qui permettent d'estimer les contraintes de Reynolds afin de fermer le système d'équations à résoudre.

II.4.1 Modèle de Turbulence [25]

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

II.4.1.1 Le Modèle de Turbulence k-ε

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

Quand ce modèle de turbulence est utilisé (A0= 1), deux équations de transport additionnelles sont résolues pour l'énergie cinétique k et son taux de dissipation ε.

$$\frac{\partial \bar{\rho \tilde{k}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho \tilde{u} \tilde{k}}) = -\frac{2}{3} \bar{\rho \tilde{k}} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} + \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{pr_k} \right) \nabla \tilde{k} \right] - \bar{\rho \tilde{\epsilon}} + \overline{\dot{W}^s} \dots\dots \quad (\text{II, 20})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho \tilde{\epsilon}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho \tilde{u} \tilde{\epsilon}}) = & -\left(\frac{2}{3} c_{\epsilon_1} - c_{\epsilon_3} \right) \bar{\rho \tilde{\epsilon}} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{pr_\epsilon} \right) \nabla \tilde{\epsilon} \right] \\ & + \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \left[c_{\epsilon_1} \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \nabla \tilde{\mathbf{u}} - c_{\epsilon_2} \bar{\rho \tilde{\epsilon}} + c_s \overline{\dot{W}^s} \right] \dots\dots\dots \quad (\text{II, 21}) \end{aligned}$$

Ce sont les équations **k-ε** standards avec quelques termes additionnels. Le terme source

$(c_{\varepsilon_3} - \frac{2}{3}c_{\varepsilon_1})\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}$ dans l'équation (II.21) explique le changement de l'échelle des longueurs en présence d'une vitesse de dilatation. Le terme source $\overline{\tilde{W}^s}$ est dû à l'interaction avec la vapeur. Les quantités sont constantes, leurs valeurs sont déterminées à partir des travaux expérimentaux et quelques considérations théoriques.

II.4.1.2 Le Modèle de Turbulence RNG k-ε

Un nouveau modèle, fondé sur les méthodes utilisant le groupe de renormalisation est apparu. Appelé modèle RNG k-ε (*Yakhot et Orszag, 1986*) [26], Il utilise une théorie différente des techniques statistiques classiques. La taille des échelles turbulentes est prise en compte pour déterminer la part de l'énergie qui sera transportée et celle qui sera dissipée. Les petites échelles de turbulence qui dissipent toute leur énergie sont modélisées alors que les grandes échelles de turbulence sont étudiées précisément. Cette modélisation aboutit à des équations très proches de celles du modèle k-ε standard. La principale différence vient des constantes qui ne sont plus déterminées expérimentalement mais calculées théoriquement [24].

$$\frac{\partial \overline{\tilde{\rho \varepsilon}}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\overline{\tilde{\rho u \varepsilon}} \right) = - \left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon_2} - C_{\varepsilon_3} - \frac{2}{3} C_{\mu} C_{\eta} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} \right) \overline{\tilde{\rho \varepsilon}} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu_{eff}}{Pr_{\varepsilon}} \right) \nabla \tilde{\varepsilon} \right] \dots \dots \dots (II, 22)$$

$$+ \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \left[(C_{\varepsilon_1} - C_{\eta}) \overline{\tilde{\sigma}} : \nabla \tilde{\mathbf{u}} - C_{\varepsilon_2} \overline{\tilde{\rho \varepsilon}} + C_s \overline{\tilde{W}^s} \right]$$

Avec:

$$c_{\eta} = \frac{\eta(1-\eta/\eta_0)}{1+\beta\eta} \dots \dots \dots (II.23)$$

$$\eta = \frac{SK}{\varepsilon} \dots \dots \dots (II.24)$$

$$S = (2 S_{ij} S_{ij})^{1/2} \dots \dots \dots (II.25)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \dots \dots \dots (II.26)$$

Tableau II.1. Valeurs des constantes dans les modèles de turbulence k- ϵ , et RNG k- ϵ .

Constant	$c_{\epsilon 1}$	$c_{\epsilon 2}$	$c_{\epsilon 3}$	c_s	c_{ps}	Pr_k	Pr_ϵ	η_0	β	c_μ
Standard k- ϵ	1.44	1.92	-1.0	1.5	0.16432	1.0	1.3	-	-	0.09
RNG k- ϵ /	1.42	1.68	-1.0	1.5	0.16432	0.71	0.719	4.38	0.012	0.0845

II.4.2 .Modélisation du spray

Dans les moteurs diesel à injection directe, le carburant est introduit dans la chambre de combustion par l'injecteur. Le jet liquide issu de l'orifice de l'injecteur se pulvérise et doit ensuite être réduit-en de fines gouttelettes qui vont s'évaporer facilement et ainsi favoriser le mélange air/carburant et la combustion. Transformer le jet liquide en " spray" (nuage de gouttelettes) c'est l'atomiser. Cette transformation s'effectue en deux étapes.

Le fractionnement primaire du jet produit des gouttes directement à partir de la colonne liquide. Le fractionnement secondaire divise ces gouttes issues du fractionnement primaire en gouttes encore plus petites. Les gouttelettes injectées dans le cylindre peuvent subir un ou plusieurs processus à savoir, l'atomisation, la collision et l'évaporation. Par conséquent, sont exigés des modèles qui décrivent ces processus (atomisation, collision, et évaporation).

II.4.2.1 Formulation Mathématique

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

- Les trois coordonnées spatiales, x
- Les trois composantes de vitesse, v
- Le rayon d'équilibre, r
- La température, T_d .
- La déformation de la sphéricité, y, et

- le taux temporel de changement d'une gouttelette, $\dot{y} = \frac{dy}{dt}$

La fonction de distribution des gouttelettes f est définie comme :

$$f(\vec{x}, \vec{v}, r, T_d, y, \dot{y}, t) d\vec{v} dr dT_d dy d\dot{y} \dots \dots \dots \text{(II.27)}$$

L'évolution à travers le temps de f est obtenue par résolution d'une forme de l'équation du jet [24]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \text{div}_{\vec{x}}.(f\vec{v}) + \text{div}_{\vec{v}}.(f\vec{F}) + \frac{\partial}{\partial r}(fR) + \frac{\partial}{\partial T_d}(f\dot{T}_d) + \frac{\partial}{\partial y}(f\dot{y}) + \frac{\partial}{\partial \dot{y}}(f\ddot{y}) = \dot{f}_{coll} + \dot{f}_{bu} \dots \dots \dots \text{(II.28)}$$

Dans cette dernière équation, les quantités, F , R , \dot{T}_d de \ddot{y} sont le taux temporel de changement individuel d'une gouttelette de sa vitesse, de son rayon, de sa température et de sa vitesse d'oscillation respectivement. Les termes \dot{f}_{coll} et \dot{f}_{bu} sont des termes sources dus aux collisions et au fractionnement de la gouttelette. Ils sont définis dans (II.37) à (II.40).

II.4.2.2 Modèles d'atomisation

Au cours des années, plusieurs modèles d'atomisation primaire et secondaire ont été proposés. La grande majorité des auteurs a montré que les effets aérodynamiques sont le facteur principal qui jouent un rôle très important avec l'augmentation de la vitesse et de la pression d'injection sur l'atomisation du jet dans les moteur diesel à ID.

Dans le code Converge V2.1 il existe plusieurs modèles pour l'atomisation du jet. On cite : les modèles basés sur la croissance d'ondes de perturbation initiée en sortie d'injecteur (KH et RT) et ceux basés sur l'amplification de l'oscillation ou de la déformation d'une goutte (TAB), expliquées par les effets aérodynamiques. Même si ce modèle traite principalement le fractionnement secondaire des gouttes, il a été utilisé dans Converge pour l'atomisation primaire du jet [25]. D'autre modèles comme KH-RT (Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor) et LISA [25, 27-31] ont été implémenté dans Converge. Ce modèle donne les conditions initiales d'un modèle d'atomisation prenant en compte les instabilités de Kelvin-Helmholtz (KH) et Rayleigh-Taylor (RT), figure (II.2). Le modèle LISA basé sur l'analyse de l'instabilité linéaire des nappes liquide libre, comme par exemple dans une ouverture de l'injecteur d'essence ou gazole vers l'extérieur.

Dans le cadre de notre étude, le modèle KH-RT est utilisé, à cause de grand nombre de Weber, de plus il offre la possibilité de simuler les deux processus de fractionnement indépendamment. De même habituellement, les gens utilisent beaucoup le modèle HK-RT pour modéliser la pulvérisation de spray comme le gazole [32, 24,26-34]

II.4.2.3 Le modèle hybride KH-RT

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

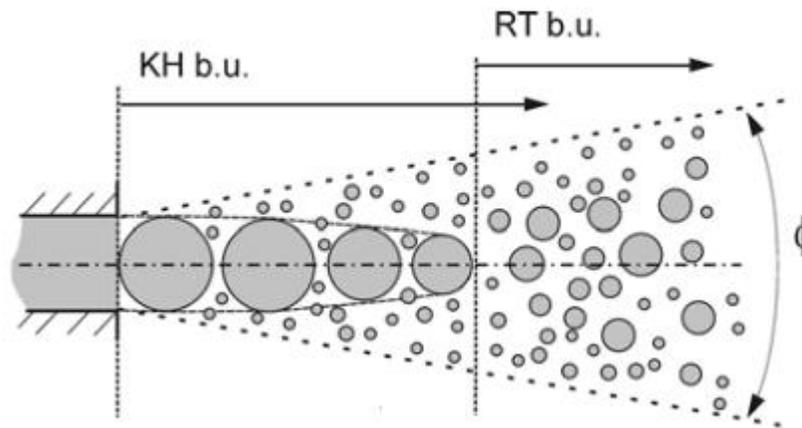


Figure II.1. Schéma de principe du modèle KH-RT [31].

La physique de l'atomisation à grand nombre de Weber est très complexe. *Reitz* et *Bracco* (1986), dans leur modèle *Wave*, considère une approche différente en prenant la croissance des instabilités de Kelvin-Helmholtz à la surface d'un jet de diamètre a et de vitesse relative gaz-liquide u_r .

Ce modèle de fractionnement primaire suppose que l'atomisation se produit du fait du développement d'instabilités de surface de type *Kelvin Helmotz* à la sortie de l'injecteur. En s'appuyant sur la théorie linéaire des instabilités, *Reitz* obtient la longueur d'onde Λ_{KH} et le

taux d'accroissement Ω_{KH} de l'onde qui croît le plus rapidement. En fonction des nombres adimensionnels du problème, *Reitz* obtient les corrélations suivantes [25, 35]:

$$\Lambda_{KH} = \frac{9.02 r_0(1+0.45\sqrt{z})(1+0.4T_a^{0.7})}{(1+0.865We^{1.67})^{0.7}} \dots\dots\dots (II.29)$$

$$\Omega_{KH} = \frac{0.34+0.38We^{1.5}}{(1+Z)(1+1.4T_a^{0.6})} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l r^3}} \dots\dots\dots (II.30)$$

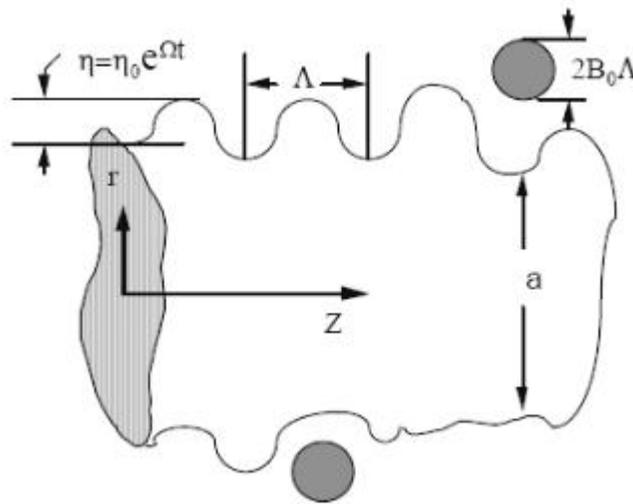


Figure II.2. Schéma de principe du modèle de Reitz [31]

Où We et Z sont définis avec le rayon du jet et $T_a = Z We^{0,5}$

Avec:

$$We = \frac{\rho_g u_r^2 r}{\sigma} \quad \text{Nombre de Weber}$$

$$Z = \frac{\sqrt{We_L}}{Re_L} \quad \text{Nombre d'Ohnesorge}$$

$$Ta = Z\sqrt{We} \quad \text{Nombre de Taylor}$$

$$We_L = \frac{\rho_L u_r^2 r}{\sigma} \quad \text{Nombre de Weber liquide}$$

$$Re_L = \frac{u_r r \rho_L}{\mu_L} \quad \text{Nombre de Reynolds}$$

Dans le modèle KH, le rayon des gouttes filles r , obtenu après un temps de rupture τ_{KH} , est donné par :

$$r = B_0 \Lambda_{KH} \dots\dots\dots (II.31)$$

$$\tau_{KH} = \frac{72.3 B_1 r_0}{\Lambda_{KH} \Omega_{KH}} \dots\dots\dots (II.32)$$

Où B_0 est une constante prise égale à 0, 61 [24], la constante $B1$ dépend du niveau des perturbations initiales dans le jet liquide et varie d'un injecteur à un autre. *Reitz* fixe cette constante, qui dépend de la géométrie de l'injecteur, à 10, la valeur typique dans *Converge* varie entre 5 et 100 [25, 26].

Durant le processus de fractionnement, le rayon (initialement égal au rayon de la colonne liquide r_0) décroît pour atteindre le rayon de stabilité r_1 , suivant la loi :

$$\frac{dr_0}{dt} = \frac{-(r_0 - r)}{\tau_{KH}}, \quad r \leq r_0 \dots\dots\dots (II.33)$$

Le modèle RT fonctionne d'une manière légèrement différente. La longueur d'onde Λ_{RT} et le taux d'accroissement Ω_{RT} de l'onde en fonction des nombres adimensionnels sont donnés comme suivant [25, 30] :

$$\Lambda = 2\pi \sqrt{\frac{3\sigma}{g_{RT} (\rho_l - \rho_g)}} \dots\dots\dots (II.34)$$

$$\Omega_{RT} = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{27\sigma}} \frac{|g_{RT} (\rho_l - \rho_g)|}{\rho_l + \rho_g}} \dots\dots\dots (II.35)$$

Avec g_{RT} c'est la décélération de gouttelette donnée par la relation suivante :

$$\gamma = 1.338 - 0.6 \times 10^{-5}T + 1.0 \times 10^{-8}T^2 \dots\dots\dots(\text{II.39})$$

II.4.4 .Modèle de transfert thermique (Loi de paroi)

Une manière traditionnelle pour traiter le transfert de chaleur à travers la paroi est basée sur l'analogie de Reynolds. Une mise à jour a été implantée dans Converge, conforme étroitement à l'expression d'origine proposée par Launder et Spalding, est donnée dans la section suivante [25] :

$$Q_w = \frac{\rho v_l c_p u^*}{Pr_l} (T - T_w) \dots\dots\dots (\text{II.40})$$

Avec

$$u^* = \begin{cases} \frac{y^* Pr_l^* RPR}{1/k \ln y^* + B + 11.05(Pr_l^* RPR - 1)} & y^* > 11.2 \\ 1.0 & y^* < 11.2 \end{cases} \dots\dots (\text{II.41})$$

Et

$$y^* = \frac{c_\mu^{1/4} K^{1/2} y}{v_l} \dots\dots\dots (\text{II.42})$$

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

Les équations (II.71), (II.72), et (II.73) peuvent être remplacées par la valeur u , qui peut être trouvée dans [25, 26]:

$$u = \frac{u^*}{K} \ln \frac{yu^*}{v_l} + B \dots\dots\dots (\text{II.43})$$

Où u^* est la vitesse de cisaillement de la couche de frontière, donnée par :

$$u^* = c_\mu^{1/4} K^{1/2} \dots\dots\dots (II.44)$$

II.5 Les Modèles chimiques [24-27,31-44]

II.5.1 .Modélisation de la combustion turbulente

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

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

II.5.1.1 *Aperçu sur les Modèles de combustion turbulente*

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

Pour la modélisation des écoulements réactifs, Convergence V2.1 propose divers modèles, parmi lesquels on distingue [25, 26]:

- ❖ Le modèle du temps caractéristique de la combustion (taux de progression CTC).
- ❖ Le modèle d'équilibre chimique (Chemical Equilibrium-CEQ).
- ❖ Modèle de chimie cinétique détaillée (Detailed Chemical Kinetics Model-SAGE).
- ❖ Modèle G-équation

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

❖ **Le modèle CTC**

Pour la combustion non pré mélangée, on cite le modèle de Abraham et al, 1985, Xin et al. 1997 [38, 39], pour lequel le taux de réaction du changement d'une quantité de la masse de l'espèce m , due à la conversion d'une espèce chimique à une autre, est donné par la relation :

$$\dot{\omega}_r = \frac{dY_m}{dt} = - \frac{Y_m - Y_m^*}{\tau_c} \dots\dots\dots (II.45)$$

Y_m Représente la fraction massique de l'espèce m , Y_m^* est la valeur de cette fraction à équilibre thermodynamique, et τ_c est le temps caractéristique de l'achèvement de l'équilibre. Il est donné par la relation :

$$\tau_c = \tau_{chim} + f\tau_t \dots\dots\dots (II.46)$$

Où τ_{chim} représente le temps chimique, τ_t est le temps de mélange turbulent, et

$f = (1 - e^{-\gamma})/0.632$ est le paramètre qui simule l'influence décroissante de la turbulence sur le processus de combustion.

$$\tau_{chim} = \frac{1}{2} A^{-1} [fuel]^{0.75} [O_2]^{-1.5} \exp \frac{E}{RT} \dots\dots\dots (II.47)$$

$$\tau_t = C_2 \frac{k}{\varepsilon} \dots\dots\dots (II.48)$$

Où $C_2 = 0.1$, $E = 77.3 \text{ kJ/mol}$ représente l'énergie d'activation, $A = 7.68 \times 10^8$ est la constante pré- exponentielle, R est la constante universelle des gaz, et T est la température du gaz [25, 26].

II.5.2 .Modèle d'Allumage

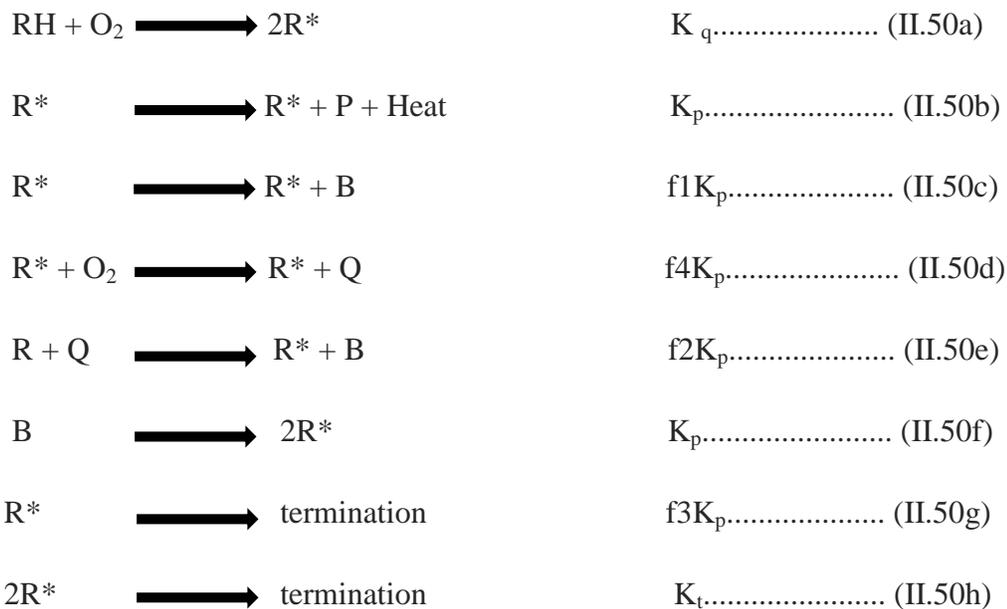
La cinétique de l'allumage est un processus à basse température de réactions en chaîne. Nous avons choisi un modèle global, le modèle Shell, puisque ce modèle représente bien les

étapes de base du phénomène d’allumage. Le modèle d’allumage Shell a été développé par Halstead [40]. C’est un modèle thermocinétique basé sur un mécanisme réduit pour l’oxydation d’un hydrocarbure. Il a été testé qualitativement en confrontation à des résultats expérimentaux pour des flammes froides et un allumage à deux étapes obtenu dans une bombe fermée. Ce modèle est basé sur un schéma général à huit étapes.

Cependant il est à noter qu’il existe un facteur influent sur la valeur de l’énergie d’activation de l’inflammation c’est l’indice de cétane (CN). Dans la littérature on trouve plusieurs suggestions estimant l’influence de ce dernier. Heywood [37] par exemple suggère la relation suivante :

$$E_A = \frac{618840}{CN + 25} \dots\dots\dots (II.49)$$

Le mécanisme simplifié se compose de huit réactions. Ces dernières se présentent comme suite [25,27, 29] :



Où RH est l’hydrocarbure introduit, R* radical composé à partir de l’hydrocarbure, B agent de branchement, Q espèce intermédiaire, et P est un produit d’oxydation constitué de CO, de

CO₂ et de H₂O. La définition des facteurs $K_q, K_p, K_b, K_t, f_1, f_2, f_3, f_4$ est donnée par Halstaed et al (1977) [25].

Les concentrations des différentes espèces peuvent être calculées comme:

$$\frac{d[R^*]}{dt} = 2 K_q [RH][O_2] + 2K_b [B] - f_3 K_p [R^*] - k_t [R^*]^2 \dots\dots\dots (II.51a)$$

$$\frac{d[B]}{dt} = f_1 K_p [R^*] + f_2 K_p [R^*][Q] - K_b [B] \dots\dots\dots (II.51b)$$

$$\frac{d[Q]}{dt} = f_4 K_p [R^*] + f_2 K_p [R^*][Q] \dots\dots\dots (II.51c)$$

$$\frac{d[O_2]}{dt} = -p K_p [R^*] \dots\dots\dots (II.51d)$$

$$\frac{d[RH]}{dt} = \frac{[O_2] - [O_2]_{(t=0)}}{p.m} + [RH]_{(t=0)} \dots\dots\dots (II.51e)$$

La quantité m dépend du nombre d'atome hydrogène dans une molécule de carburant C_nH_{2m} , $p = (n(2-\gamma) + m) / 2m$, et $\gamma \approx 0,67$ est le rapport de CO/CO₂. Les facteurs sont:

$$f_1 = A_{f_1} \exp(-E_{f_1}/RT) [O_2]^{x_1} [RH]^{y_1} \dots\dots\dots (II.52a)$$

$$f_2 = A_{f_2} \exp(-E_{f_2}/RT) \dots\dots\dots (II.52b)$$

$$f_3 = A_{f_3} \exp(-E_{f_3}/RT) [O_2]^{x_3} [RH]^{y_3} \dots\dots\dots (II.52c)$$

$$f_4 = A_{f_4} \exp(-E_{f_4}/RT) [O_2]^{x_4} [RH]^{y_4} \dots\dots\dots (II.52d)$$

$$k_i = A_i \exp(-E_i/RT), i = 1,2,3,4, q, b, t \dots\dots\dots (II.52e)$$

II.5.3 .Modèle de formations des polluants

II.5.3.1 Le modèle de formation de NOx

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

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

Contrairement aux moteurs à allumage commandé, la combustion en Diesel est hétérogène. Par conséquent, même si le mélange est globalement très pauvre en carburant, il y a toujours des zones de la charge gazeuse où le mélange est au voisinage de la stoechiométrie. La formation de NO se produit dans ces zones par simple effet d’augmentation de la température de l’air, qui contient les ingrédients clés : l’azote et l’oxygène.

Le mécanisme de formation du NO a été étudié par de nombreux chercheurs. *Zelzdovitch* et al [25, 41, 42] ont cependant montré le rôle particulier des réactions suivantes dans la formation de NO thermique :



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

$$k_{1f} = 7.6 * 10^{13} * exp [- 38000 / T] \dots\dots\dots (II.54a1)$$

$$k_{1b} = 1.6 * 10^{13} \dots\dots\dots (II.54a2)$$

$$k_{1f} = 6.4 * 10^9 T * exp [- 3150 / T] \dots\dots\dots (II.54b1)$$

$$k_{1b} = 1.5 * 10^9 T * \exp [-19500 / T] \dots\dots\dots (II.54b2)$$

$$k_{1f} = 4.1 * 10^{13} \dots\dots\dots (II.54c1)$$

$$k_{1b} = 2.0 * 10^{14} * \exp [-23650 / T] \dots\dots\dots (II.54c2)$$

En considérant que les propriétés thermochimiques des gaz et que la chaleur dégagée par les réactions chimiques n'est pas modifiée par la formation des oxydes d'azote en raison de leur faible concentration, le champ de température dans la chambre de combustion est supposé indépendant de la formation du NO-thermique. En considérant, par ailleurs, que les radicaux participant aux réactions de formation du NO par ce mécanisme sont à l'état d'équilibre partiel par rapport aux espèces majoritaires telles que N2 et O2, la concentration en NO est calculée de manière découplée par rapport au phénomène de combustion, c'est à dire par une procédure de post-traitement, par la relation (II.87), établie à partir des réactions réversibles du mécanisme de *Zeldovich* :

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{2R\{1-([NO]/[NO]_e)^2\}}{1+([NO]/[NO]_e)R_1/(R_2+R_3)} \dots\dots\dots (II. 55)$$

Où les notations suivantes ont été introduites, en désignant par []_e les concentrations à l'équilibre :

$$R1 = K_1^f [O]_e [N_2]_e = K_1^r [NO]_e [N]_e \dots\dots\dots (II.56a)$$

$$R2 = K_2^f [N]_e [O_2]_e = K_2^r [NO]_e [O]_e \dots\dots\dots (II.56b)$$

$$R3 = K_3^f [NO]_e [H]_e = K_3^r [OH]_e [N]_e \dots\dots\dots (II.56c)$$

La concentration de NO dans l'équation (II.87) peut être convertie en fraction massique comme :

$$\frac{dX_{NO}}{dt} = \frac{2(M_{NO}/\rho_{vc})R_1\{1-([NO]/[NO]_e)^2\}}{1+([NO]/[NO]_e)R_1/(R_1+R_3)} \dots\dots\dots (II.57)$$

Où X_{NO} est la fraction de masse de NO; M_{NO} est la masse moléculaire de NO; et ρ_{vc} est la masse du volume de contrôle.

En conséquence, la fraction de masse de NO de chaque zone ne peut pas être calculée en sollicitant le mécanisme de *Zeldovich* étendu simplement, équation (II.89). L'effet d'entraînement de l'air devrait être considéré. La dérivée de la fraction de masse du NO dans une zone par rapport au temps est:

$$\frac{DX_{NO}}{Dt} = \frac{D}{Dt} \left(\frac{m_{NO}}{m_{tot}} \right) = \frac{dX_{NO}}{dt} - \frac{X_{NO}}{m_{tot}} \cdot \frac{dm_{tot}}{dt} \dots\dots\dots (II.58)$$

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

$$m_f u_i = (m_f + m_a) \frac{dS}{dt} \dots\dots\dots (II.59)$$

m_f : Masse du carburant dans la zone considérée

m_a : Masse d'air dans cette zone.

S : Pénétration du jet.

u_i : Vitesse d'injection du carburant.

En réarrangeant l'équation (II.91) on obtient la relation reliant la masse de l'air d'entraînement à celle du carburant comme suit :

$$m_a = m_f \left(u_i \frac{dt}{dS} - 1 \right) \dots\dots\dots (II.60)$$

Par dérivation de l'équation (II.92) on aboutit à la relation du taux d'entraînement de l'air (débit d'air).

$$\dot{m}_a = \frac{m_f \cdot u_i \cdot d^2S}{(dS/dt)^2 \cdot dt^2} \dots\dots\dots (II.61)$$

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

Le taux de l'entraînement de l'air \dot{m}_a donné dans l'équation (II.94) est le même que le dernier terme de l'équation (II.93) tel que :

$$\dot{m}_a = \frac{dm_{tot}}{dt} \dots\dots\dots (II.62)$$

Ce qui implique que l'équation (II.90) devient:

$$\frac{DX_{NO}}{Dt} = \frac{dX_{NO}}{dt} - \frac{\dot{m}_a}{m_{tot}} X_{NO} \dots\dots\dots (II.63)$$

Et en substituant l'équation (II.89) dans l'équation (II.95), la dérivée de la fraction de massique de NO par apport au temps dans le système ouvert est obtenue:

$$\frac{DX_{NO}}{Dt} = \frac{2(M_{NO}/\rho_{vc})R_1\{1-([NO]/[NO]_e)^2\}}{1+([NO]/[NO]_e)R_1/(R_2+R_3)} - \frac{\dot{m}_a}{m_{tot}} X_{NO} \dots\dots\dots (II.64)$$

Enfin, la richesse augmente en fonction de la quantité de carburant injectée, les émissions de NO sont grossièrement proportionnelles à cette quantité de carburant.

II.5.3.2 Modèle de formation des suies [25]

Le mode de combustion par diffusion utilisé dans les moteurs Diesel est naturellement générateur de suies. Si le mélange carburant/air n'étant pas homogène, il existe des zones plus riches en carburant. Ces zones sont plus favorables à la formation de suies. En revanche, comme nous l'avons rappelé dans le paragraphe précédent, la formation des *NOx* est favorisée par une élévation de la température dans les zones où c'est l'excès d'air qui est plus important. Il en résulte donc un compromis *NOx*/particules qui sont illustrées par le diagramme de *Pischinger* [42], figure (II.3). Ce diagramme décrit les zones paramétriques de formation des *NOx* et des particules de suies en termes de température et de richesse locale.

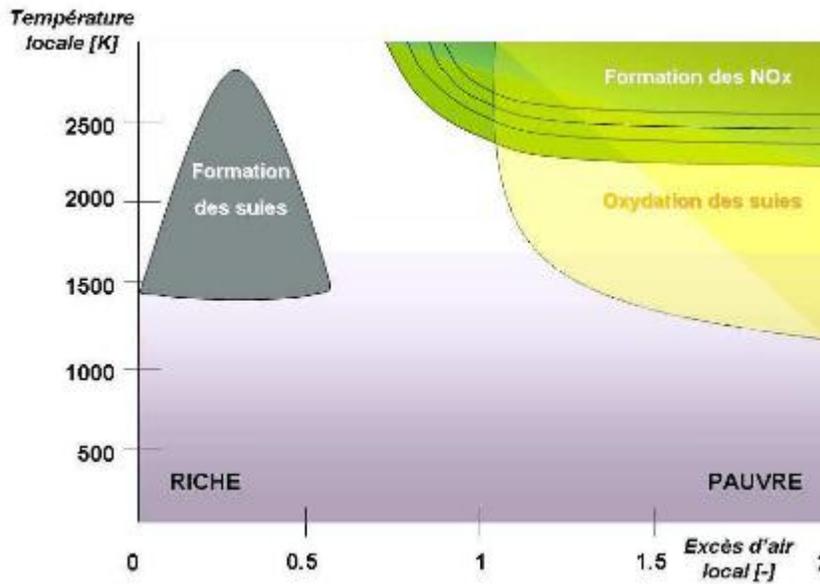


Figure II.3. Diagramme Φ -T de Pischinger [42].

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

$$\frac{dm_s}{dt} = \frac{dm_{sf}}{dt} - \frac{dm_{so}}{dt} \dots\dots\dots (II.65)$$

Les indices $,sf,so$, dénotent les suies émises, formées, et oxydées respectivement. La détermination des taux de formation des deux derniers types de suies a été l'objet de plusieurs modélisations. Le modèle de *Hiroyasu* [43, 44] est utilisé dans plusieurs modèles multi- zones, il exprime les deux taux précités sous la forme :

$$\frac{dm_{sf}}{dt} = A_f m_{fg} P^{0.5} \exp\left(\frac{-E_{sf}}{RT}\right) \dots\dots\dots (II.66)$$

$$\frac{dm_{so}}{dt} = A_o m_s \frac{P_{ox}}{P} P^{1.8} \exp\left(\frac{-E_{so}}{RT}\right) \dots\dots\dots (II.67)$$

$E_{sf} = 1.25 \times 10^4 \text{ Kcal/Kmol}$, $E_{so} = 1.40 \times 10^4 \text{ Kcal /Kmol}$, sont des énergies d'activation. Avec A_f et A_0 des constantes déterminées par l'expérience, m_{fg} et m_s représentent respectivement la masse du carburant vaporisé et les suies émises à l'échappement.

II.5.3.3 Modèle d'oxydation des suies [43]

Quand les particules de suie sont transportées dans les zones où l'oxygène est présent, elles peuvent être oxydées. Ce processus peut avoir lieu en même temps que les processus de formation et on assiste alors à une compétition entre production et oxydation des particules. Les principales espèces intervenant dans le processus d'oxydation sont l'oxygène mais également le radical OH. Ces molécules peuvent agir avec les suies au niveau de leur surface en arrachant des atomes de carbone. Divers facteurs influencent directement le processus de formation des suies tels que la température, la pression, la nature du combustible, les conditions de combustion (richesse,). Cependant, il n'existe pas encore, à l'heure actuelle,

Un modèle capable de prédire fidèlement ce phénomène dans une large gamme de conditions expérimentale et encore moins d'expliquer la structure des particules en fonction des conditions de formation.

Le modèle le plus largement utilisé d'oxydation par l'oxygène est le modèle semi-empirique de *Nagle* et *Strickland-Constable* (NSC), celui-ci a été implanté dans le code de calcul numérique *ConvergeV2.1* [25, 26] pour décrire le processus de formation et d'oxydation des suies pour la simulation des moteurs. Le modèle d'oxydation de NSC est basé sur des expériences d'oxydation de carbone dans un environnement O₂ sur une gamme de pression partielle. Dans ce modèle, l'oxydation de carbone se produit par deux mécanismes dont les taux dépendent de la chimie extérieure impliquant des emplacements plus réactifs *A* et des emplacements moins réactifs *B*. Les réactions chimiques sont :



Le taux d'oxydation de suie de NSC mis en application dans l'équation (II.99) est donné par :

$$\frac{dm_{so}}{dt} = \frac{M_C}{\rho_s d_s} m_s w \dots\dots\dots (II. 68)$$

Avec : M_C , Le poids moléculaire de carbone (12 g/mole),

ρ_s : La densité de suie (2.0 g/cm³)

d_s : Le diamètre de suie (4.5*10⁻⁹ m).

w : Le taux de réaction est défini comme

$$w = \left(\frac{K_A P_{ox}}{1+K_Z P_{ox}} \right) x + K_B P_{ox} (1 - x) \dots\dots\dots (II.69)$$

P_{ox} : Est la pression partielle de l'oxygène et elle est donnée comme suivant;

$$x = \frac{P_{ox}}{P_{ox} + (K_T + K_B)} \dots\dots\dots (II.70)$$

Les constantes de modèle d'oxydation NSC sont données dans le tableau (II.2).

Tableau II.2. Constantes du modèle d'oxydation NSC

K_A	20 exp (-15100/T)
K_B	4.46 exp(-76400/T)
K_T	1.51 exp (-48800/T)
K_Z	21.3 exp (-15100/T)

II.6 Conclusion

La combustion turbulente est un domaine très vaste, d'une grande complexité à cause des couplages et de la forme non-linéaire des équations régissantes. Les différents modèles proposés dans la littérature pour la résolution des équations de conservation ont été décrits dans ce chapitre.

Lors du traitement d'un phénomène de combustion turbulente, on se rend compte qu'on a, en effet, affaire à deux phénomènes combinés (turbulence-combustion): la turbulence est un problème cinétique, où il faudrait relever la fermeture par l'un des modèles de la turbulence (k - ϵ , RNG k - ϵ ,...) ainsi que les tensions de Reynolds par l'hypothèse de *Boussinesq*. La combustion est un phénomène thermo-chimique. Il faut donc choisir un modèle pour représenter le phénomène. Il doit respecter le genre de la combustion (pré mélange ou non pré mélange) car chaque type doit être modélisé par ses propres modèles.

Chapitre III.
Le code de calcul CFD
CONVERGE

III.1 Introduction [45]

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

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

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

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

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

III.2 L'outil CFD [45]

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

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

III.3 Description du code CFD converge [46]

Le laboratoire CONVERGENT Science basé à Middleton, Wisconsin a développé un code de simulation 3D appelé «Converge». En effet, ce code est bien connu par le monde industriel et universitaire aux USA. Il est structuré en modules permettant une prise en main rapide. Bien qu'il soit spécifiquement conçu pour exécuter des calculs sur des moteurs à combustion interne, la modularité du code permet des modifications faciles pour résoudre une variété de problèmes hydrodynamiques impliquant des réactions chimiques. Les équations de conservation de masse, d'espèces chimiques, de quantité de mouvement, d'énergie interne spécifique, d'énergie cinétique turbulente et du taux de dissipation sont résolues par

l'approche des volumes finis. Pour plus d'informations sur le code Converge, le lecteur peut consulter les références originales de Richards, K. J. et al.

En Algérie, suite à une convention de coopération, Converge a été doté le laboratoire de recherche LTE du code Converge pour effectuer des simulations de la combustion dans les moteurs et pour faire des développements de sous-modèles physiques. De nouvelles versions se développent pour intégrer davantage des sous-modèles physiques relatifs à la turbulence ou à la combustion.

III.3.1 Structure standard de Converge V 2.1 [46]

Converge V2.1 simule des écoulements très variés avec des configurations plus ou moins complexes. Il est composé, comme tout code de type CFD, de trois modules qui sont: le préprocesseur « **pre-processing** », le solveur "Converge" et le post-processeur "**postprocessing**".

III.3.2 Génération de maillage [45,46]

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

• **pre-processing**

L'étape de prétraitement consiste à préparer une surface triangulée qui est fait dans le préprocesseur GUI. Cette étape commence généralement par la lecture d'un fichier STL qui était sortie d'un logiciel de CAO, suivie par des trous de fixation, orienter les triangles, fixant

connectivité inadéquate, et la réparation d'autres problèmes avec la surface. Selon la qualité du fichier STL, ce qui peut soit prendre quelques minutes ou quelques heures.

Une fois que la surface est propre, les limites sont ensuite affectés numéros d'identification qui correspondent à des entrées dans le fichier de spécification de limite. Après l'attribution de numéros aux limites, le fichier est écrit et sera une entrée vers l'exécutable converge.

Prétraitement implique également la création les autres fichiers d'entrée nécessaires pour l'exécution du code. Ces fichiers d'entrée sont tous en format texte ASCII pour modifier facilement par l'utilisateur. La plupart de ce manuel traite de la préparation des fichiers d'entrée pour exécuter une simulation.

• **L'exécution du code**

Converge peut être exécuté en série (un processeur) ou en parallèle (plus d'un processeur).

Procédé d'exécution dépend du fait que la tâche est en série ou en parallèle.

• **Post-processing**

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

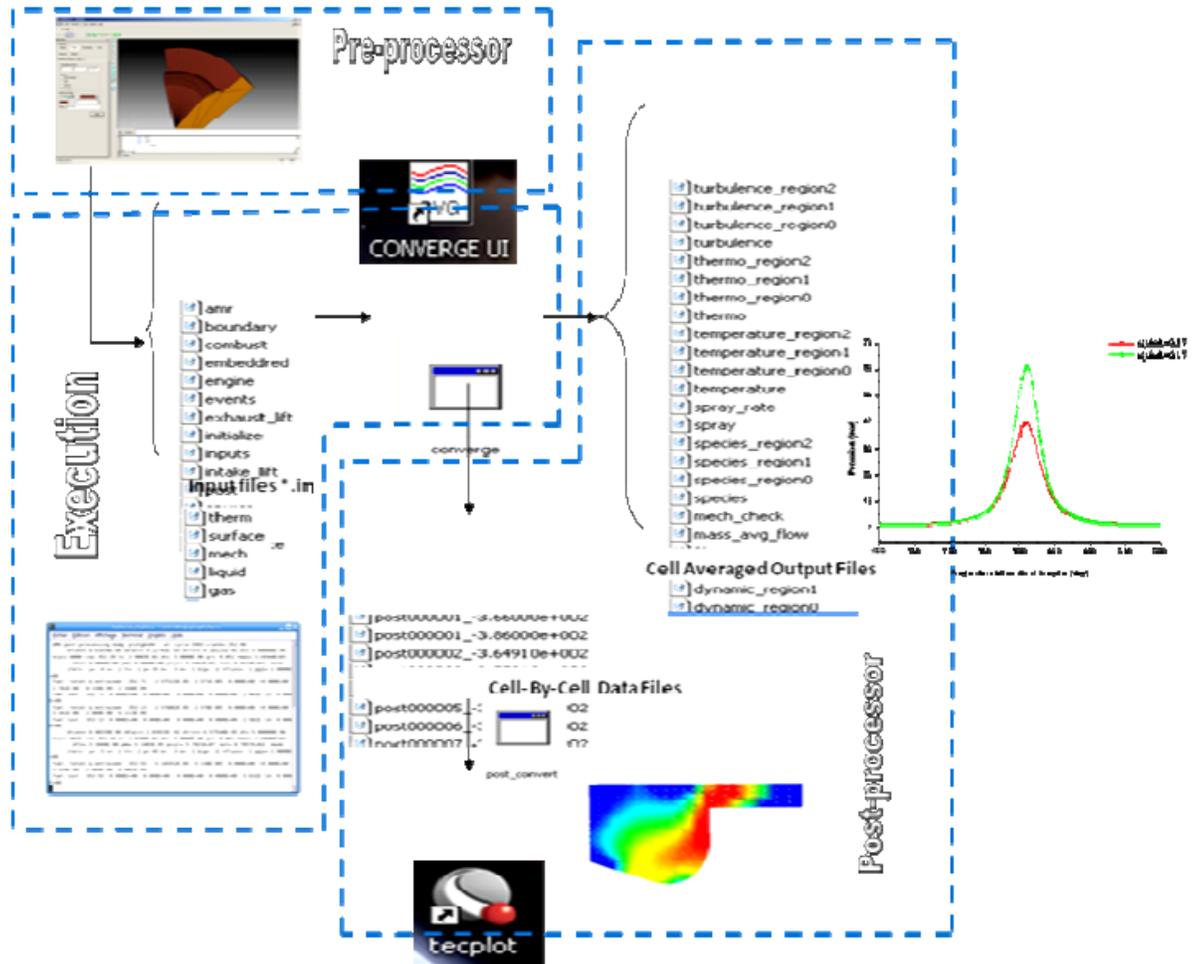


Figure III.1. La structure standard de Converse.

III.3.3 Les techniques de maillage [45,46]

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

ConvergeV2.1, et ConvergeV2.2 offrent la possibilité de réaliser un maillage structuré, d'ajouter des soupapes verticales, piston sans ou avec bowl ω et d'autres formes.

De plus, différentes techniques de raffinement du maillage ont été implémentées dans le code Converse parmi lesquelles: *Le raffinement de base*. *La technique AMR*, et la technique *Embedded*.

III.3.3.1 Raffinement du maillage de base

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

C'est une opération très importante et elle consiste à diviser le maillage de base dans tout le domaine de calcul en une série de sous mailles. Donc, il est très important d'évaluer la dépendance des résultats sur le maillage utilisé en répétant le même calcul sur des maillages différents, figure (III.2) et en comparant les résultats en termes de temps de calcul et de précision.

Cependant, cette démarche est très coûteuse en temps CPU et en espace mémoire et donc souvent difficile à utiliser. Dans ce qui suit, nous présentons deux méthodes de raffinement de maillage (AMR et EMB) afin d'optimiser nos calculs.

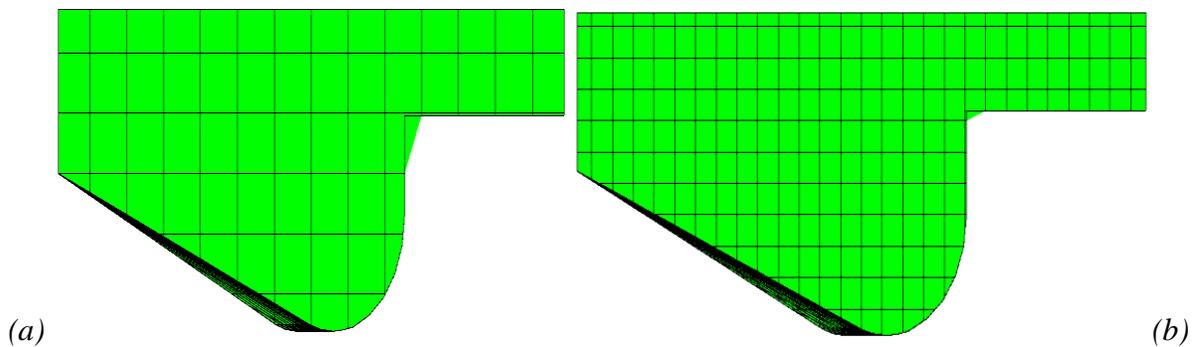


Figure III.2. (a) Maillage initial, (b) Maillage raffiné

Cependant, cette démarche est très coûteuse en temps CPU et en espace mémoire et donc souvent difficile à utiliser. Dans ce qui suit, nous présentons deux méthodes de raffinement de maillage (AMR et EMB) afin d'optimiser nos calculs.

III.3.3.2 Raffinement Adaptatif du Maillage (AMR).

Le principe de la technique AMR consiste à discrétiser l'espace physique à l'aide de plusieurs maillages qui sont engendrés par raffinements successifs. Au début, seul le maillage le plus grossier est spécifié par l'utilisateur. Il constitue le maillage de base puisqu'il demeure fixe durant la totalité du calcul. Ce maillage correspond, la plupart du temps, à une discrétisation très grossière de l'ensemble du domaine de calcul. Néanmoins, il doit permettre une première approximation de la solution recherchée afin de démarrer, selon certains critères, le processus de raffinement. On raffine ensuite une ou plusieurs parties du maillage de base, une même région pouvant être raffinée plusieurs fois successivement. Une discrétisation de plus en plus fine du domaine de calcul est ainsi obtenue. Généralement les mailles sont divisées uniformément par deux dans chaque direction d'espace. La figure (III.3) montre l'évolution du jet. L'utilité d'AMR peut être clairement vue.

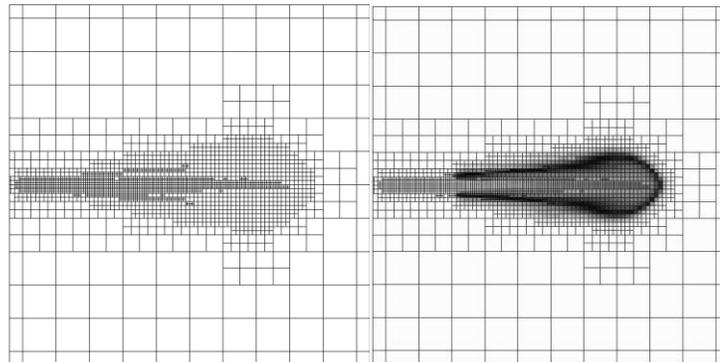


Figure III.3. Stratégie du maillage AMR.

Le raffinement du maillage peut se faire sous Converse et ce en utilisant la fonction `AMR_flag` dans `input.in`, cette fonction est amenée à utiliser une concentration de points

(raffinement) dans les zones de forts gradients dans certains intervalles de temps comme : la vitesse, la température et les suies, ...

III.3.3.3 *Embedded*

La technique 'Embedded' consiste à utiliser une concentration de points dans des parties bien spécifiées : Bound, Sphere, Cylinder, Nozzle, Injector et Box. Il est noté que dans la plupart du temps de calcul, le maillage le plus grossier spécifié par l'utilisateur est employé.

Par contre le raffinement avec la technique Embedding n'est employé que dans un temps bien défini. Ce dernier est activé avec l'utilisation de la fonction 'Embedded_flag' dans le fichier de données inpit.in. La figure (III.4) montre le raffinement dans la zone du jet et les frontières.

Dans cette figure l'utilité de la technique Embedded peut être clairement vue.

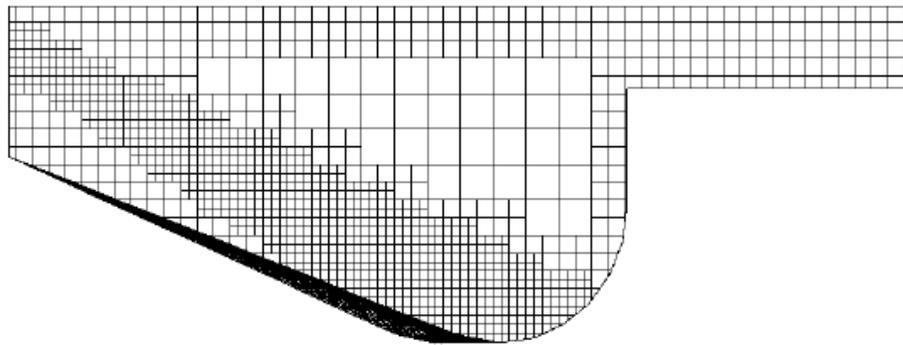


Figure III.4. Stratégie du maillage Embedding: fixed Nozzle embedding et fixed Bound embedding.

III.3.4 Les démarches numériques [46]

Pour résoudre les équations aux dérivées partielles non-linéaires et fortement couplées qui régissent l'écoulement du fluide dans les MCI, nous adoptons la méthode RANS, avec

l'algorithme PISO pour le traitement du couplage pression-vitesse dans les équations moyennées de Naviers-Stockes.

Le couplage Pression-Vitesse est traité en résolvant les équations de la quantité du mouvement et une équation pour la pression dérivée d'une combinaison de l'équation de continuité et celle de la quantité du mouvement. Converge V2.2 utilise l'algorithme de couplage PISO qui sera brièvement décrit ci-dessus.

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

III.3.4.1 Schéma numérique

L'intérêt d'utiliser le code Converge est que la structure globale existe et des fonctionnalités telles que les conditions de symétrie ou le mouvement de maillage est intégré dans le soft. Le code Converge emploie la méthodologie ALE et discrétise l'espace en utilisant une technique à volume fini. ALE : c'est une formulation mixte pour laquelle les éléments fluides se déplacent avec une vitesse arbitraire dite "vitesse de grille". Cette formulation a l'avantage, de traiter des domaines déformables et toutes les formes du maillage.

La procédure de solution pour les sprays et pour les équations de conservation de la phase gazeuse est effectuée en 3 étapes. Dans la première phase on utilise la méthode Eulérienne pour décrire les équations qui régissent l'écoulement de la phase gazeuse, avec l'injection du spray, Converge utilise la méthode Lagrangienne pour décrire les gouttelettes (phase 2), et lorsque le spray liquide s'évapore (phase 3), Converge revient vers la méthode Eulérienne.

III.3.4.2 Algorithme de calcul de CONVERGE V2.1

Il s'agit d'une méthode itérative dont la structure globale peut être résumée selon les étapes suivantes :

- Prédiction de la Pression. P^p
- Résolution de la vitesse (équation de la conservation de la quantité de mouvement).
- Résolution de l'équation d'énergie.
- Résolution de la pression, P^c Transport de pression (équation combinée).
- Teste de converge $\| P^p - P^c \| < TOL$.

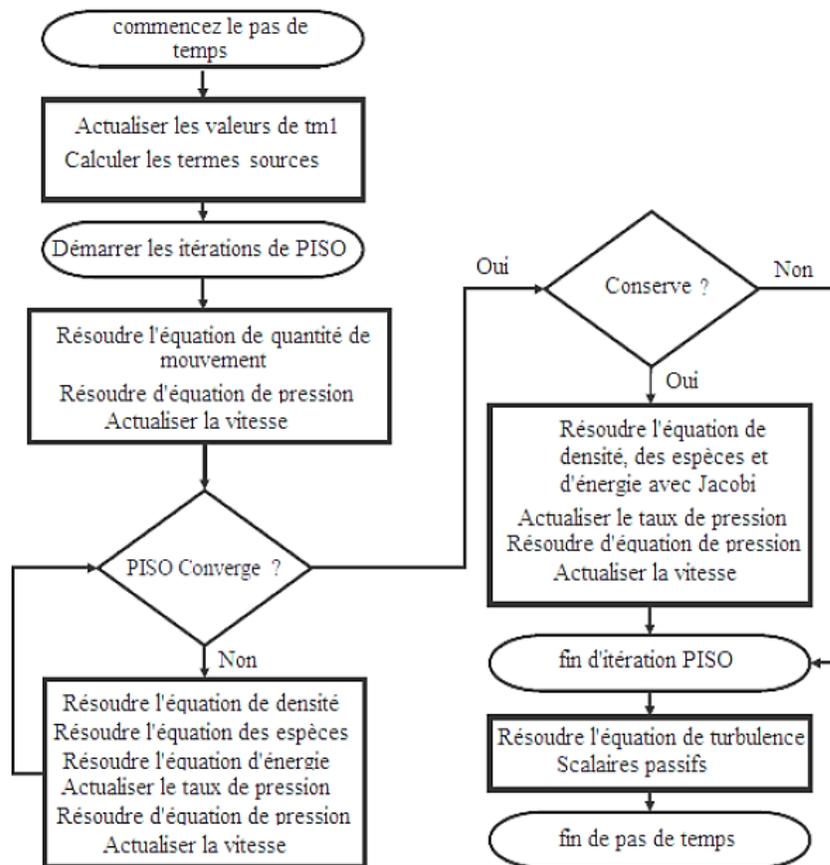


Figure III.5. Algorithme de calcul

III.4 Les fichiers de sortie et d'entrée dans converge [45,46]

Les fichiers d'entrée (*.in) contiennent des données géométriques, de conditions limites, et tandis que les entrées numériques des fichiers de données (*.dat) contiennent des propriétés thermodynamiques et des données de réaction chimique. Au début de la simulation, le (*.in) et (*.dat) sont lus par converge. Pendant la simulation, output, post, et les fichiers de restart sont présents.

III.4.1 Descriptions des fichiers d'entrée

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

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

Tous les fichiers d'entrée doivent résider dans le répertoire à partir duquel Converge est exécuté. Si tous les fichiers nécessaires ne sont pas trouvés, le code sera annulé. Un résumé des fichiers d'entrée peut être trouvé dans le tableau III.1 ci-dessous. Notez que seule l'entrée des fichiers inputs.in, boundary.in, surface.dat, initialize.in, mech.dat et therm.dat sont nécessaires pour une simulation, les fichiers d'entrée restants ne sont requis que quand un modèle ou caractéristique particulière est activé.

Tableau III.1. Les fichiers d'entrées.

Nom du fichier	Descriptions
<i>inputs.in</i>	Commande numérique et simulation, par exemple, les critères de convergence, et les facteurs détente, contrôler le pas de temps, après avoir tapé la fréquence, etc. Ce fichier contient les médias pour allumer et éteindre sous-modèles comme spray, la combustion, la turbulence.

<i>boundary.in</i>	Conditions aux limites, conformément aux limites identifiants utilisés dans <i>surface.dat</i>
<i>initialize.in</i>	Spécification des conditions initiales.
<i>embedded.in</i>	Informations sur où, quand, et comment l'intégration est à ajouter à la grille
<i>combust.in</i>	Modèle de combustion et des émissions.
<i>turbulence.in</i>	Sélection de quel modèle de turbulence à exécuter ainsi que les paramètres du modèle et les modèles muraux.
<i>spray.in</i>	Configuration et entrées pour les modèles de phase discrets.
<i>events.in</i>	Informations sur la connexion et la déconnexion régions.
<i>engine.in</i>	Entrées spécifiques à une simulation de moteur
<i>source.in</i>	Entrées pour les sources. (pour déterminer le temps d'allumage).
<i>amr.in</i>	Entrées de contrôle de raffinement adaptatif de maillage.
<i>post.in</i>	Le fichier <i>post.in</i> contient les noms des variables qui seront écrites sur les fichiers de poste. Les fichiers de poste peuvent ensuite être convertis en GMV, ou le format de la colonne du texte.
<i>surface.dat</i>	Spécification de surface triangulée et l'affectation limite.
<i>therm.dat</i>	NASA données formatées pour le calcul des propriétés thermodynamiques de l'espèce dans la simulation.
<i>mech.dat</i>	Éléments, espèces, et de réactions données pour la simulation.
<i>gas.dat</i>	Propriétés pour le gaz qui ne peut être calculé qu'à partir des données dans <i>therm.dat</i>

III.4.2 Description des fichiers de sortie

III.4.2.1 Fichiers Echo (*.echo)

Les fichiers (*.echo) sont placés dans le répertoire à partir duquel converge est exécuté.

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

III.4.2.2 Fichiers out (*.out)

Les fichiers (*.out) sont placés dans le même répertoire que l'entrée et les fichiers d'écho à partir de l'exécution de converge. Il est important de noter que lorsque converge est ré exécuté, les fichiers (*.out) seront écrasés les fichiers existants (*.out) dans le même répertoire sans demander à l'utilisateur. Un résumé des différents types des fichiers de sortie est indiqué au tableau.III.2 ci-dessous.

Tableau III.2. Les fichiers de sortie.

Nom du fichier	Descriptions
thermo.out	Données thermodynamiques et de dégagement de chaleur
emissions.out	Information sur les émissions pour la simulation
spray.out	L'évolution du jet.
species.out	Somme de la masse des espèces dans le domaine.
temperature.out	Informations sur fraction de la masse des températures supérieures fixes.
turbulence.out	La moyenne et l'écart type de la quantité de turbulence dans le domaine

mass_avg_flow.out	Débit massique et débit massique pondérés données thermiques moyennes dans les limites des entrées et de sorties.
area_avg_flow.out	Débit massique et surface pondérés données thermiques moyennes dans les limites des entrées et de sortie.

III.5 Présentation de la simulation

III.5.1 Spécification du moteur [47]

III.5.1.1 Spécifique géométrique

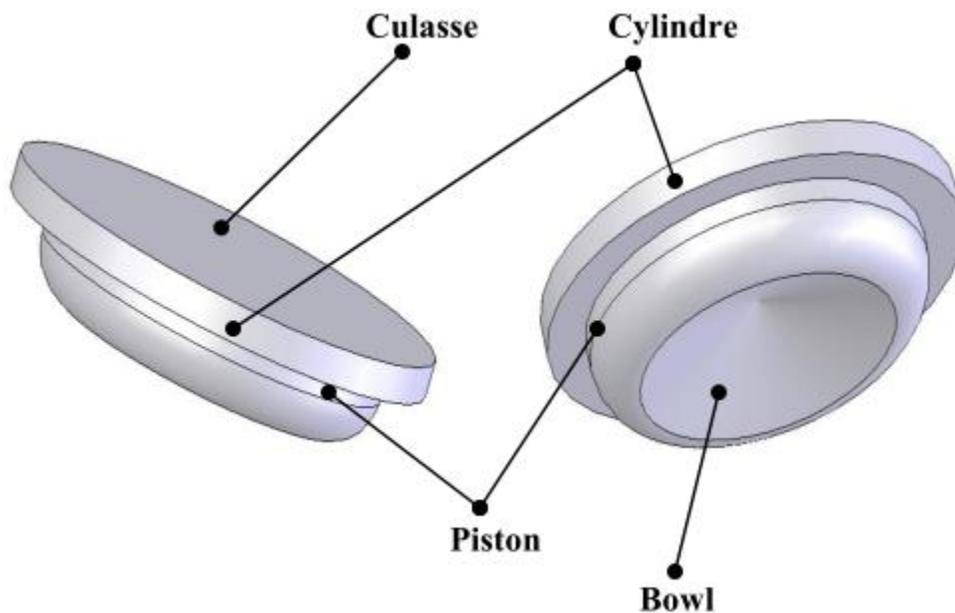


Figure III.6. Vue 3D du moteur Kirloskar TAF1.

Tableau III.3. Description des caractéristiques géométriques du moteur étudié.

Paramètres	Spécifications
Type du moteur/modèle	<i>Kirloskar TAF1</i> - Quatre temps, CI, refroidi par air, allumage par compression, injection directe, vitesse constante monocylindre, DI - moteur diesel
Orientation	Vertical
Diamètre decylindre/Alésage	80 mm
La course	110 mm
Volume balayé	0.553 L
Volume d'autorisation	0,036 L
Taux de compression	16,5
Puissance nominale	4,4 kW à 1500 tr / min
Vitesse nominale	1500 tr/min
Pression d'ouverture de la buse	200 bar
Type de chambre de combustion	chambre de combustion ouverte hémisphérique
Ouverture de la soupape d'admission	4,5 Avant PMH
Fermeture de la soupape d'admission	35.5 Après PMB
Ouverture de la vanne d'échappement	35.5 Avant PMB
Fermeture de la vanne d'échappement	4.5 Après PMH

III.5.2 Spécifications d'injections

Tableau III.4. Description des caractéristiques du système d'injection du moteur étudié.

Système d'injection du carburant utilisé		
Fuels	HDP	gazole
Mode d'injection	Profil	Profil
Système d'injection	Common Rail	Common Rail
Diamètre du trou d'injection	2.6×10^{-4}	2.6×10^{-4}
Masse du fuel injecté	0.2621 g/cycle	0.1750 g/cycle
Durée d'injection	20deg	20 deg
Début d'injection	-20 deg Avant PMH	-20 deg APMH
Température du fuel injecté	306 K	341 K
Nombres des Bec	6	6

III.5.3 Propriétés physico-chimiques des carburants utilisés [47]

Pour les deux carburants choisis les paramètres nécessaires pour la simulation sont illustrés dans le tableau ci-dessous :

Tableau III.5. Propriété physico-chimiques des carburants utilisés.

	HDP	gazole
Densité (g/ml)	0.8355	0.840
Viscosité (mPa.s) à 24.95°C	2.52	2.0
Indice d'Octane	/	/
Indice de Cétane	51	55
Pouvoir calorifique inférieur PCI (kJ/Kg)	44.340	46.500
Point d'éclair	42	50
Point d'inflammation	45	56

III.6 Préparation des calculs par converge V 2.1

La simulation numérique par le code CONVERGE V 2.1 nécessite que toutes les variables soient initialisées avant le démarrage du calcul.

Les conditions d’affichage dans le fichier input.in.

- ✓ Spécifications de moteur (diamètre, course, Squish, vitesse,...).
- ✓ Les conditions aux limites (température).
- ✓ Les conditions initiales (pression, température, fraction massique de gaz).
- ✓ Spécification de carburant (type, quantité, temps d’injection, durée d’injection...).

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

Finalement, le but de cette partie est de donner un aperçu sur la génération des géométries 3D, et de mettre en évidence les paramètres nécessaires pour de bons résultats; par la mise en application du code de calcul converge V 2.1.

Chapitre IV.

**Résultats des simulations
numériques**

IV.1 Introduction

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

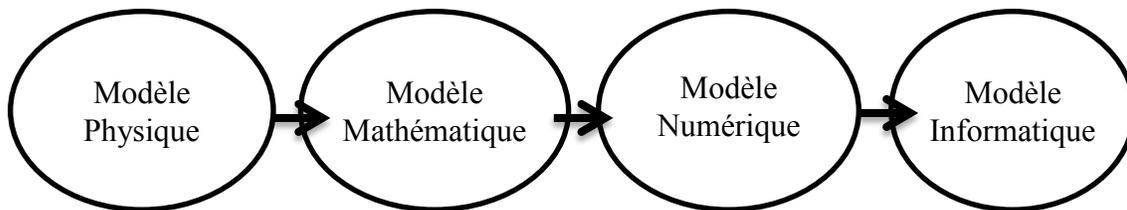


Figure IV.1. Boucle de modélisation

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

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

Dans le présent chapitre, on expose une série de résultats issus de la simulation numérique de la combustion dans un moteur diesel noté *Kirloskar, TAF1* à usage monocylindrique, quatre temps, CI, refroidi par air, allumage par compression, injection directe, vitesse constante, référencié précédemment (tableau III.3), alimenté par un carburant (huile) à base de déchets plastiques, effectuée à l'aide du code de calcul converge V2.1, Les résultats obtenus sont analysés, interprétés et discutés dans une investigation numérique

afin d'étudier les phénomènes qui se manifestent dans le cylindre. L'approche RANS est utilisée. La combustion est décrite par le modèle CTC, le spray par le modèle de KH-RT, la turbulence, l'allumage, la formation des suies, et les NOx par les modèles RNG k- ϵ .

Enfin, on exposera les résultats numériques accompagnés des commentaires et des explications. Les résultats seront comparés avec les données du gazole donné par le groupe converge pour une raisons de validation.

IV.2 Présentation de l'expérience

IV.2.1 Les conditions initiales

Quant aux conditions initiales nous avons introduit la pression «pres_init», la température de chambre «temp_init», l'énergie cinétique «tke_init», et le taux de dissipation «eps_init». Les données sont montrées dans le tableau (IV.1).

Tableau IV.1. Les conditions initiales.

pres_init [Pa]	0.9050e+05
temp_init [K]	350.0
tke_init [m ² /s ²]	62.02710
eps_ini [m ² /s ³]	17183.40

IV.2.2 Les conditions aux limites

Les conditions aux limites sont données par les températures de culasse (T_{cu}), du cylindre (T_{cy}) et du fond de piston (T_p). Les données sont montrées dans le tableau (IV.2).

Tableau IV.2. Les conditions aux limites

La température de la culasse (T_{cu}) [K]	413
La température du cylindre(T_{cy}) [K]	349
La température du piston (T_p) [K]	435
La température des valves [T_v]	349

IV.3 Domaine du calcul

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

La figure IV.2 (a et b) contient un maillage structuré créé par le préprocesseur de converge, il contient environ 124664 cellules à 180 °V et 15752 cellules à 25 °V pour le moteur Kirloskar, TAF.

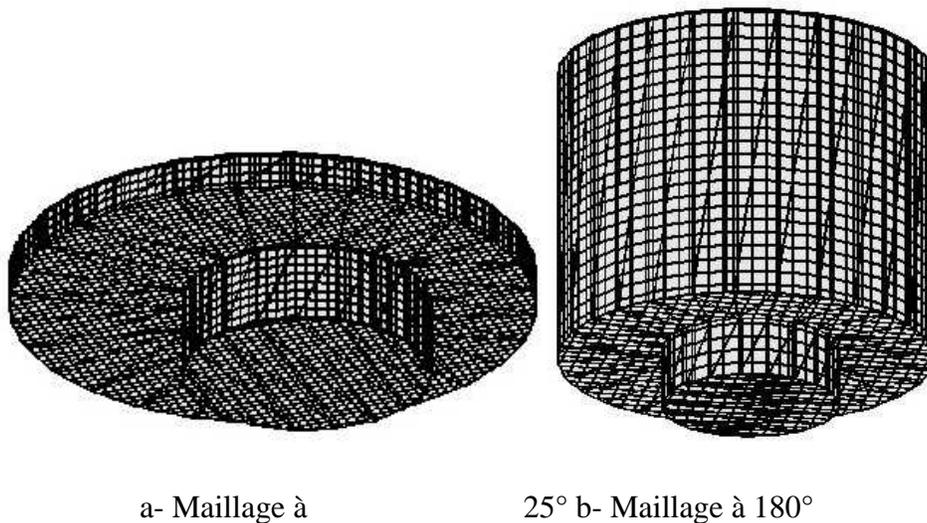


Figure IV.2. Maillage du domaine de calcul.

IV.4 Choix des modèles de simulation

Dans ce travail, nous nous sommes basés sur les modèles présentés dans le tableau (IV.3) afin de simuler la combustion au sein de la chambre de combustion d'un moteur diesel à injection directe.

Tableau IV.3. Choix des modèles

Processus	Modèle
Combustion	CTC
Spray	KH-RT
Turbulence	RNG $k-\varepsilon$
NOx	RNG $k-\varepsilon$ /Zeldovich

IV.5 Discussion des résultats de simulation

Une série de tests de performance, d'émission et de combustion effectués sur un moteur à vitesse constante de 4,4 kW en utilisant le gazole et les huiles des déchets plastiques, les résultats de cette dernière sont présentés ci-dessous.

IV.5.1 Ajustement du code de calcul

Les variations de la pression cylindre en fonction de l'angle du vilebrequin, pour les deux carburants testés (HDP, gazole), sont représentées sur les figures (IV.3-a, IV.3-b), On note une bonne concordance entre les valeurs mesurées et celles calculées. L'erreur affichée entre les pressions mesurées et calculées dans le cylindre est satisfaisante.

La comparaison de la pression calculée et mesurée montre bien que le modèle CTC est fort capable de prédire le phénomène de combustion au sein de la chambre de combustion avec le carburant alternatif.

Ces résultats obtenus de la simulation numérique d'un écoulement turbulent avec réaction chimique et une comparaison de ce résultat numériques avec le résultat expérimentale de «*Radu KUNCSEK, Université de Nantes*» [17], Pour valider les résultats numériques on se réfère tout d'abord au calage de la courbe de pression cylindre calculée avec celle mesurée sur banc d'essai moteur.

Nous avons remarqué, que le pic de pression dans le cylindre, pour le cas de gazole est plus important que celui du HDP, Ceci est dû au retard d'allumage, D'autre part, nous avons remarqué que, les pics de pressions dans le cylindre, dans le cas du gazole et de HDP, présentent une légère différence, d'environ 2%. Donc, une combustion plus importante dans le cas de gazole; ce qui se traduit par un pic de pression plus important dans la chambre de combustion.

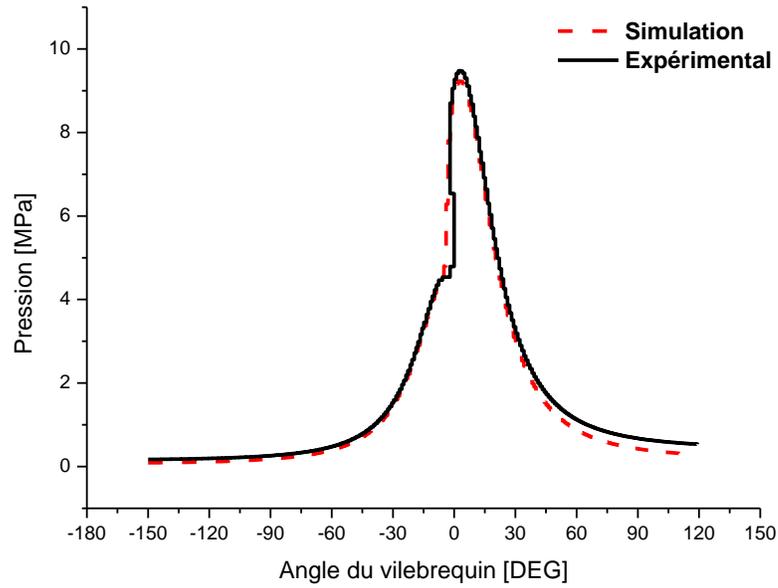


Figure IV.3-b. Pression en fonction de l'angle du vilebrequin. Cas du HDP.

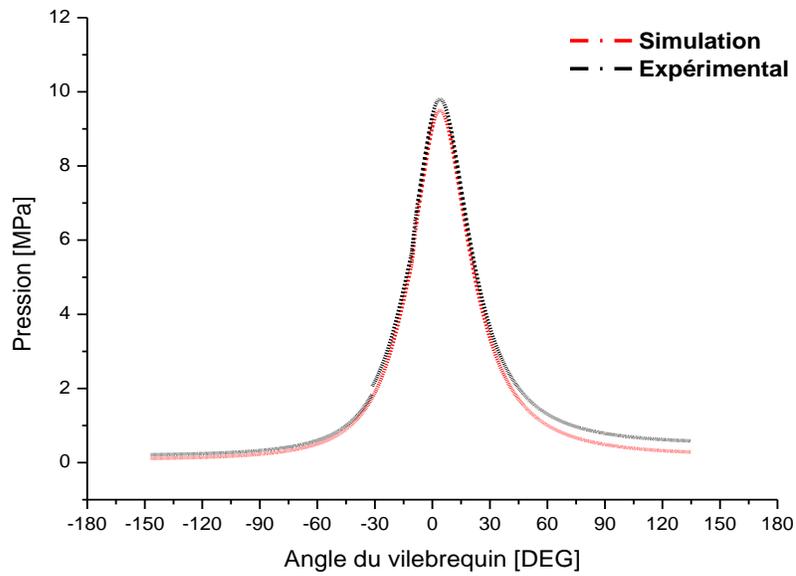


Figure IV.3-b. Pression en fonction de l'angle du vilebrequin. Cas du gazole.

IV.5.2 Paramètres de combustion

IV.5.2.1 Le Taux de dégagement de chaleur et la température

La figure (IV.4) représente l'évolution du taux de la chaleur dégagée par degré de vilebrequin (Heat Released) calculé pendant un cycle moteur pour les deux carburants. D'après l'analyse, on observe que la chaleur maximale libérée par la combustion est plus importante dans le cas de HDP en comparaison avec le gazole, qui signifie un taux de démarrage de combustion plus élevé. Le taux de dégagement de chaleur est de 45J/deg pour le gazole et 145J/deg pour le HDP. Notons, que le taux de dégagement de chaleur plus élevé entraîne une augmentation de la température des gaz d'échappement.

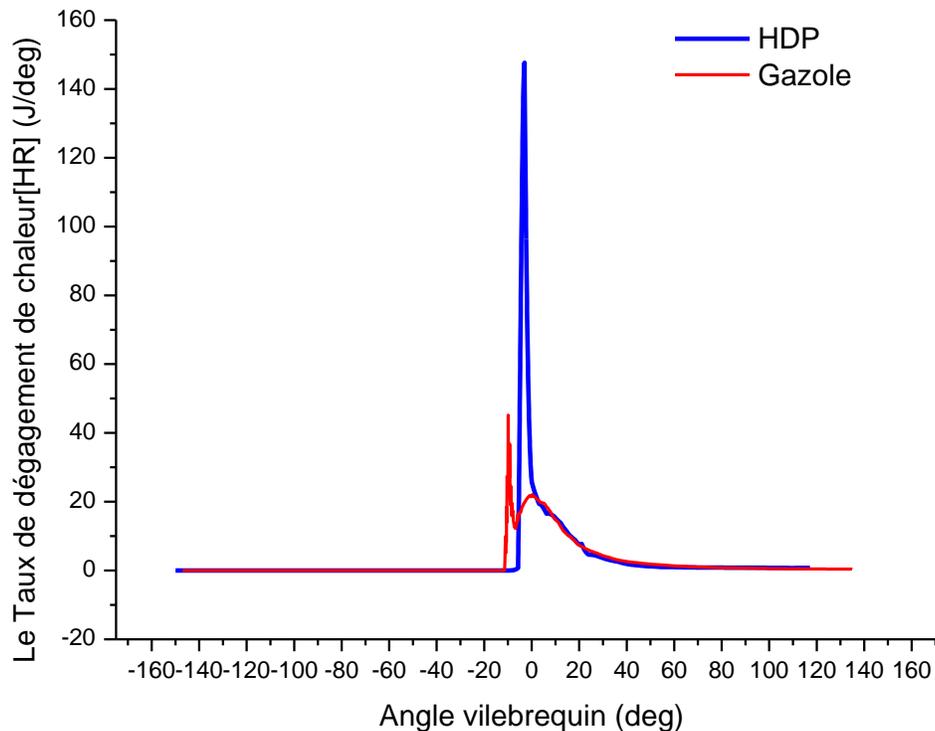


Figure IV.4. Taux de chaleur dégagée en fonction de l'angle de vilebrequin pour les deux carburants.

La figure (IV.5) représente l'évolution de la température moyenne des gaz dans le cylindre par degré de vilebrequin pour les deux carburants considérés : HDP, gazole. On observe une augmentation rapide de la température durant la phase de combustion de pré-mélange. La température moyenne maximale pour le HDP, gazole est respectivement de 1600°K, 1450°K,

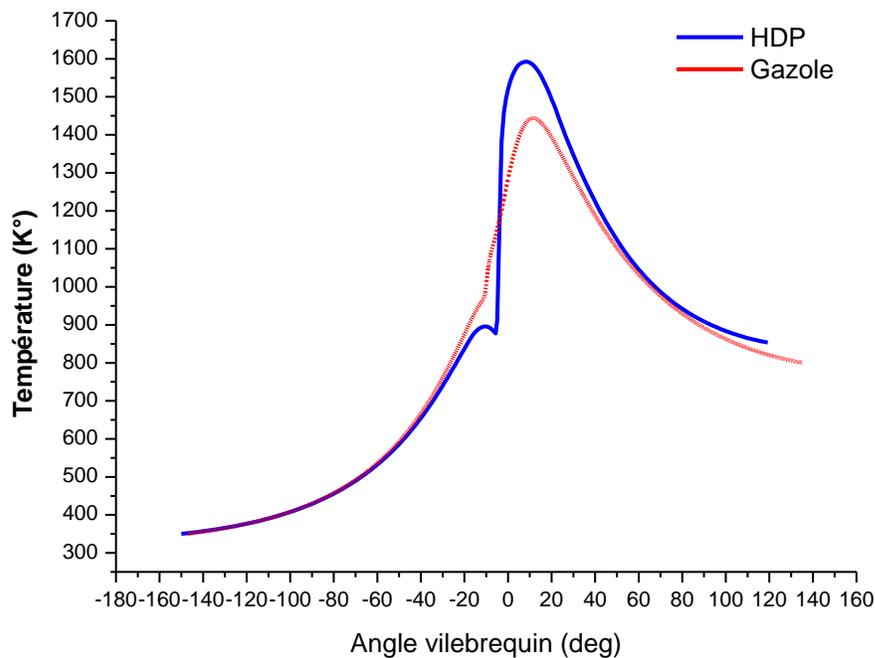


Figure IV.5. Evolution de la température moyenne en fonction de l'angle du vilebrequin pour les deux carburants.

IV.5.2.2 L'énergie cinétique turbulente (TKE)

La figure (IV.6), représente l'évolution de l'énergie cinétique turbulente moyenne (TKE) durant toutes les phases du moteur. La valeur de TKE augmente durant la phase de

compression et atteint une valeur maximale près du PMH, exactement à 2°V avant le PMH, $22\text{ m}^2/\text{s}^2$.

La diminution brutale de TKE à partir de son maximum peut s'expliquer par la conjonction des effets visqueux dus à la grande pression atteinte juste avant le PMH et la chute de température et de pression durant la phase de détente.

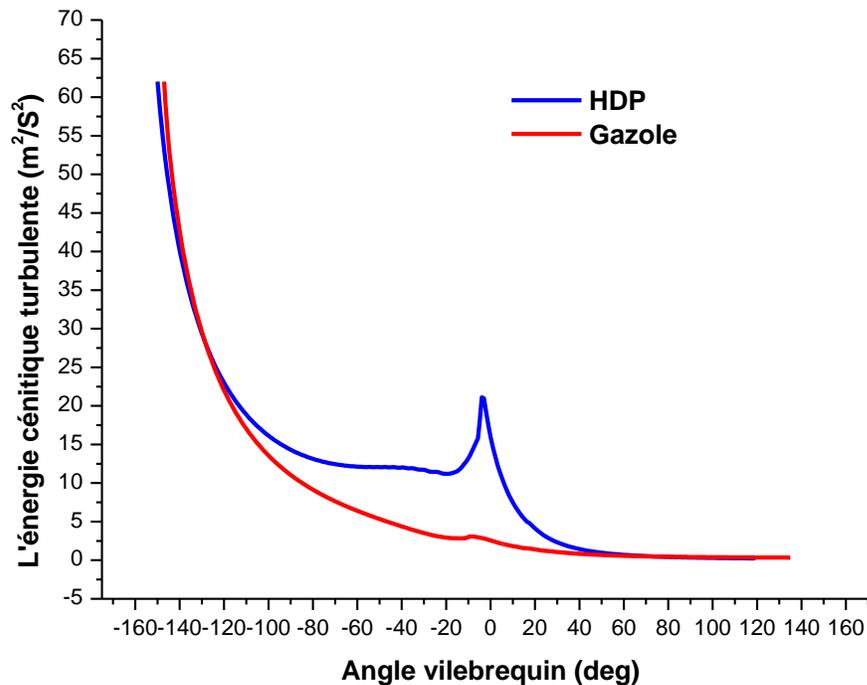


Figure IV.6. Variation de l'énergie cinétique turbulente en fonction de la course du piston pour les deux carburants.

IV.5.3 Emissions

IV.5.3.1 Oxydes d'azote (NO_x)

Le problème classique des émissions polluantes dans le moteur Diesel est les oxydes d'azote (NO_x), A cet effet, nous commençons par ce type d'émission, Les variations des émissions des NO_x pour les deux carburants sont représentées sur la figure (IV.7).

L'élévation de la concentration en NO_x se manifeste d'une manière rapide juste après le début de la combustion. Après le pic de la pression, les températures des gaz brûlés diminuent en raison de leur détente et à cause des transferts de chaleur à travers les parois du cylindre. Cette baisse de température amorti la chimie des NO_x et leur concentration demeure relativement constante.

Nous remarquons que le HDP présente des émissions élevées de NO_x par rapport au gazole. Ceci est probablement dû à la température élevée dans la chambre de combustion et à la difficulté de réaliser des mélanges locaux malgré un taux d'oxygène plus élevé dans le carburant HDP.

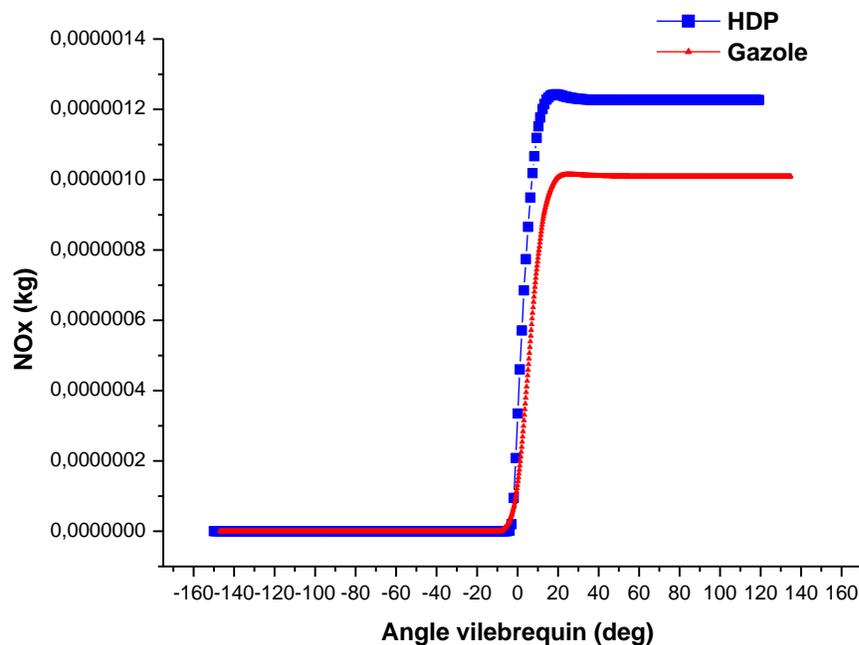


Figure IV.7. Prédiction des NO_x en fonction de l'angle du vilebrequin pour les deux carburants.

IV.5.3.2 Les hydrocarbures imbrûlés (HC)

La figure (IV.8) montre l'évolution des hydrocarbures imbrûlés (HC) en fonction de l'angle de vilebrequin. La cause de l'émission d'hydrocarbures est entièrement liée au processus de combustion. Les premières traces de HC apparaissent 7°V à 9°V après l'injection du carburant et leur quantité augmente pour atteindre le maximum vers 2°V à 4°V avant le PMH, on note que le taux d'émission des HC est plus faible avec l'utilisation du gazole, la raison de l'augmentation de l'hydrocarbure non brûlé (HC) dans HDP est probablement due à un taux de fumigation plus élevé donc à la teneur d'oxygène qui favorise la combustion et au non-disponibilité d'oxygène par rapport du gazole.

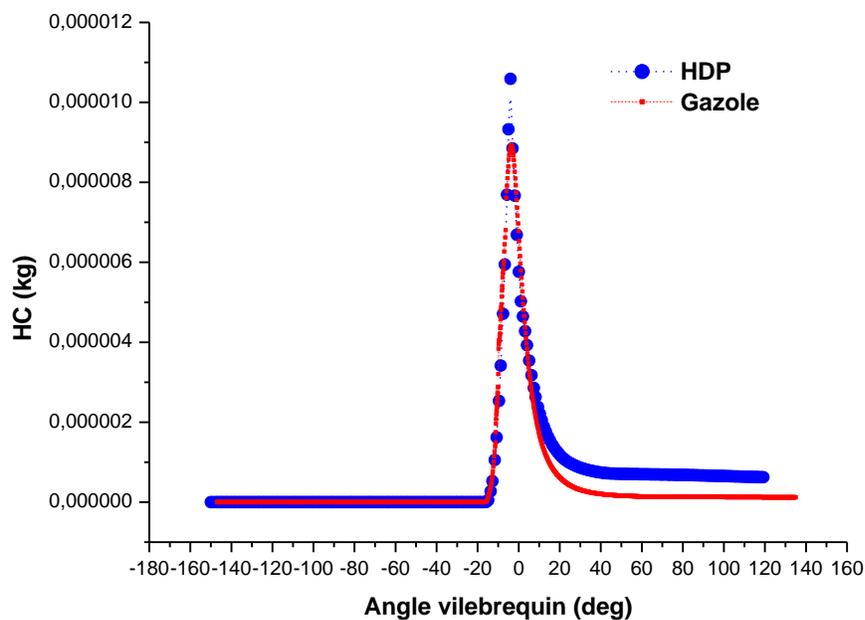


Figure IV.8. Prédiction des émissions HC en fonction de l'angle du vilebrequin pour les deux carburants.

IV.5.3.3 Monoxyde de carbone (CO)

L'évolution du monoxyde de carbone CO en fonction de l'angle de vilebrequin pour les carburants testés est illustrée sur la figure (IV.9), La combustion incomplète génère naturellement du CO qui croit rapidement durant la phase de combustion de pré-mélange par défaut d'oxygène à l'échelle locale. Cependant durant la phase de diffusion le CO s'oxyde pour former du CO₂ et cela à cause de l'excès d'air dans la chambre.

On remarque bien que le CO augmente au début de la combustion jusqu'à $1.6 \cdot 10^{-5}$ kg et $2.4 \cdot 10^{-5}$ kg respectivement pour le gazole et HDP ce qui est dû à la richesse de mélange carburé (excès d'O₂) et on explique leur diminution par le mélange pauvre.

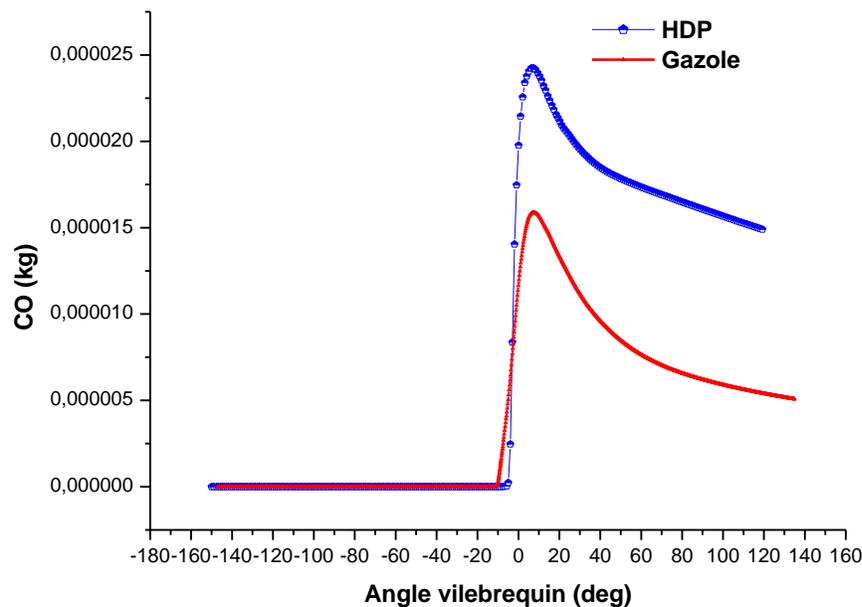


Figure IV.9. Prédiction des CO en fonction de l'angle de vilebrequin pour les deux carburants.

IV.5.3.4 Dioxyde de carbone (CO_2)

La figure (IV.10) ci-dessous montre l'évolution de gaz carbonique en fonction de l'angle de vilebrequin pour les deux carburants, On remarque bien que CO_2 augmente au début la combustion.

Au début de l'injection (dans ce cas, $21^\circ V$ avant le PMH), une fraction de CO_2 est présente dans le cylindre due aux gaz résiduels. Pendant le délai d'auto inflammation, cette fraction massique reste presque constante et juste avant l'allumage, le taux de réaction monte rapidement et on aura une augmentation rapide de la masse de CO_2 traduisant la combustion vive (flamme chaude).

Cette masse tend à se stabiliser à la fin de la phase de combustion de diffusion.

La combustion du HDP conduit à des émissions de CO et CO_2 supérieures à celles du gazole. Ce résultat peut être expliqué par les mêmes raisons explicitées précédemment. La richesse élevée et le manque d'oxygène local en sont responsables.

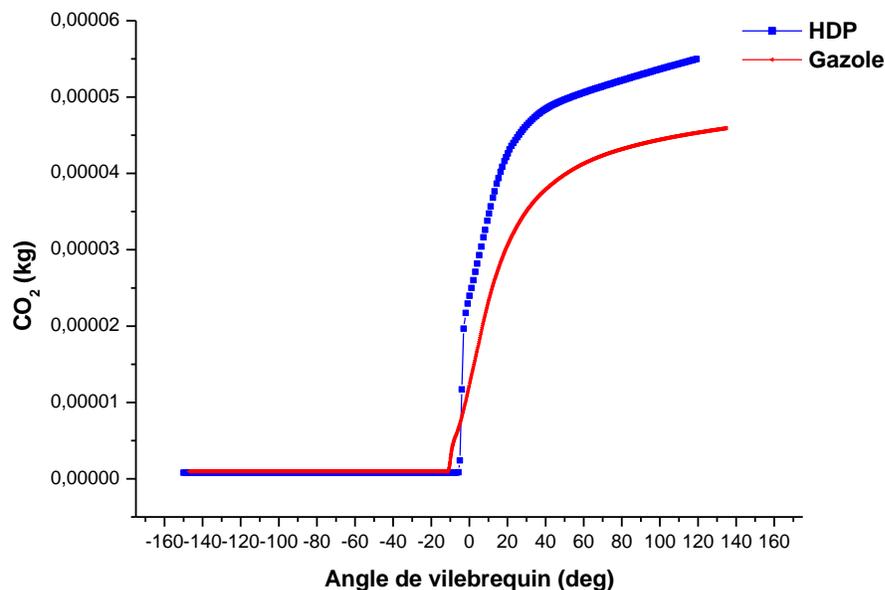


Figure IV.10. Prédiction des CO_2 en fonction de l'angle de vilebrequin pour les deux carburants.

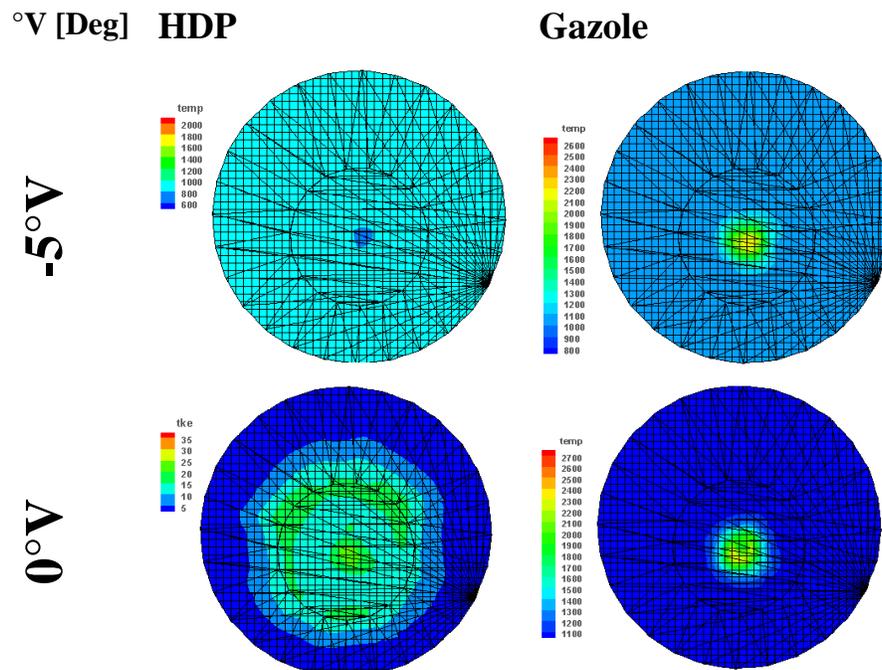
IV.6 Champs scalaires

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

IV.6.1 Champs de température

Les champs de température à différents angles du vilebrequin pour les deux carburants sont présentés sur la figure (IV.11).

L'évolution de la température dans la chambre de combustion augmente de façon régulière, jusqu'à sa valeur maximale. On observe une plus grande taille de la flamme quand le moteur est alimenté en HDP pour les différents angles. Ceci indique une plus grande quantité de mélange initial préparée au cours de la période du délai d'allumage.



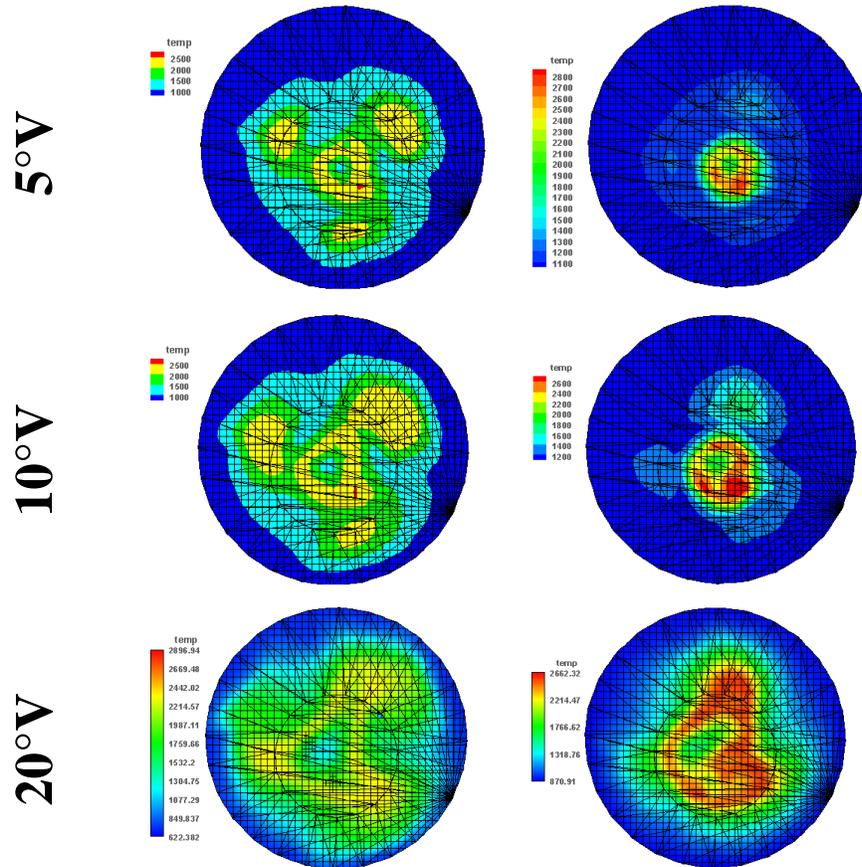


Figure IV.12. Evolution des champs de température à différents angle, pour les deux carburants.

IV.6.2 Contours de turbulence

La figure (IV.12) montre le contour de l'énergie cinétique turbulente pour les angles suivants : -5°V , 0°V , 5°V , 10°V , 20°V , On remarque que la turbulence prend globalement des valeurs plus élevées dues au mouvement ascendant du piston, Au centre du bowl de piston, l'intensité de l'énergie cinétique turbulente (TKE) est grande par rapport aux extrémités pour le carburant HDP par rapport au Gazole..

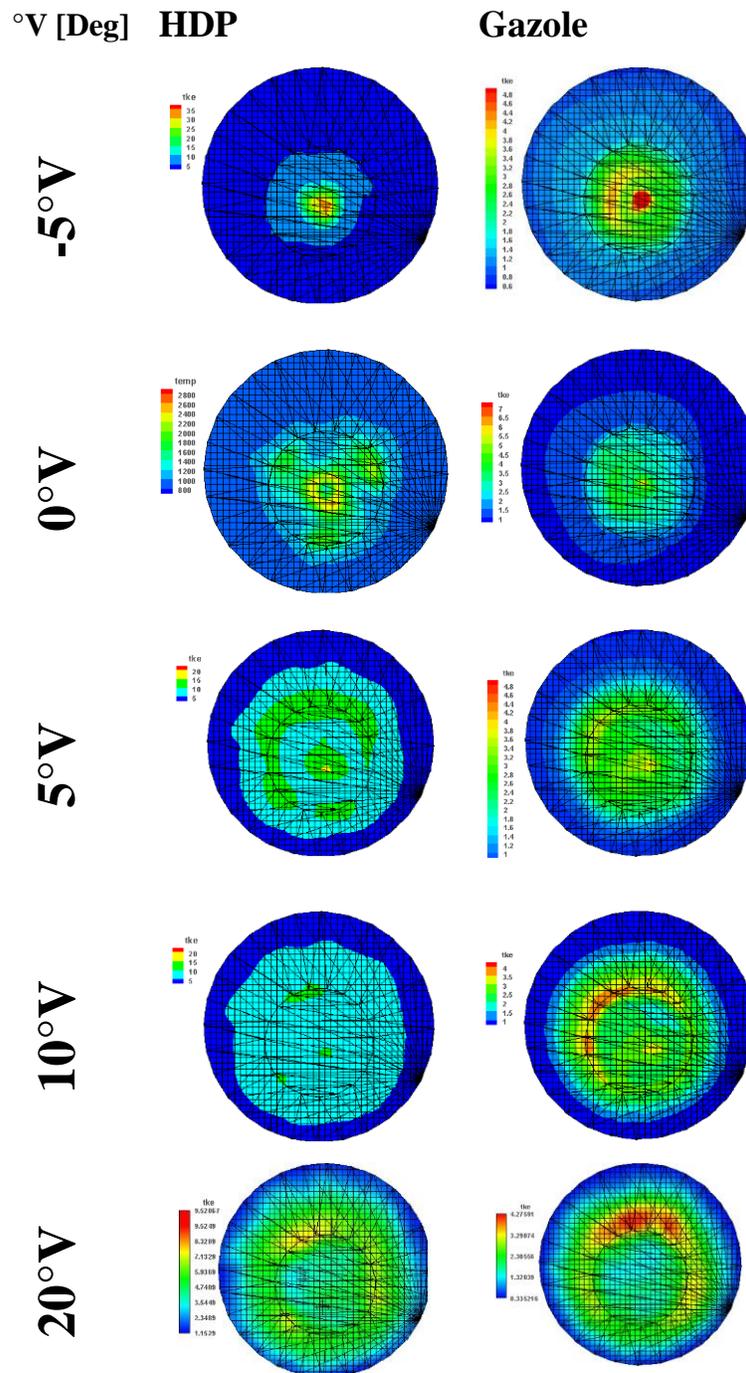


Figure IV.13. Evolution de l'énergie cinétique turbulente à différents angle, pour les deux carburants.

IV.6.3 Evolution du NOx

La figure (IV.13) montre l'évolution des émissions NOx sous forme des contours à différents angles du vilebrequin pour les deux carburants testés.

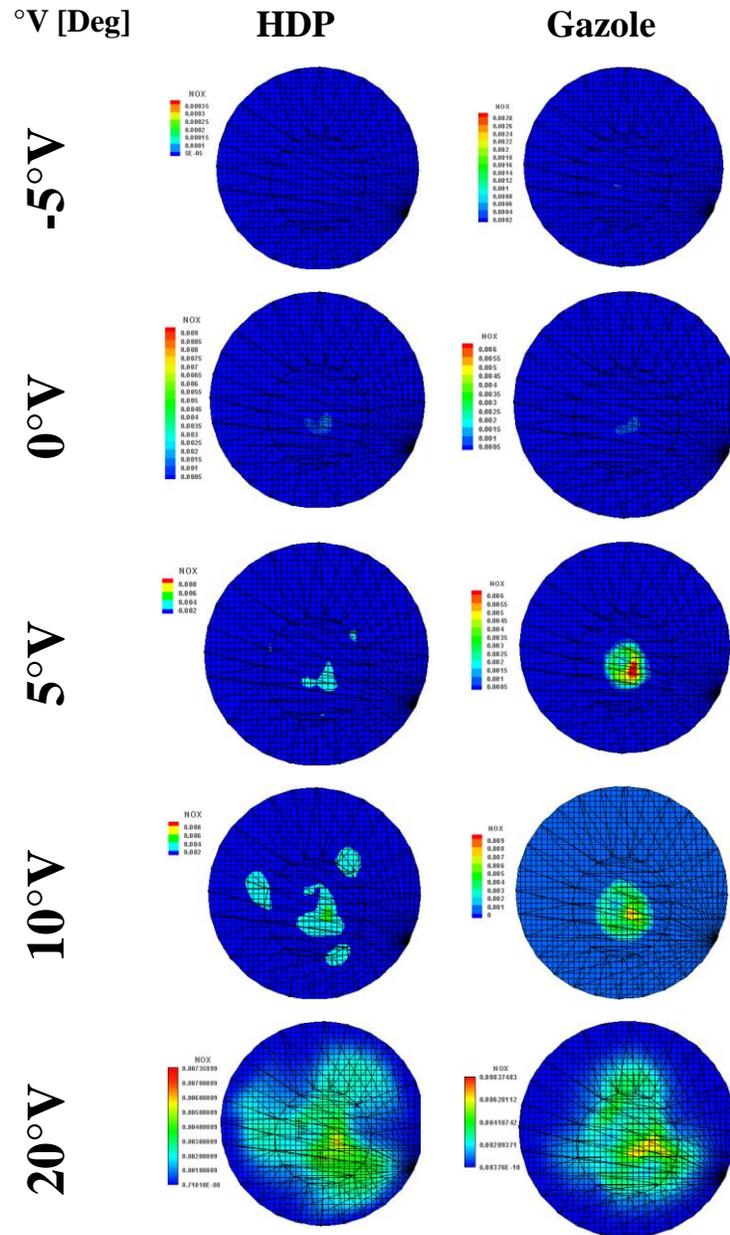


Figure IV.14. Evolution des émissions NOx sous forme de contours à différents angles pour les deux carburants.

IV.6.4 Evolution du CO

La figure (IV.14) montre l'évolution du CO sous forme de contours à différents angles du vilebrequin pour les deux carburants testés.

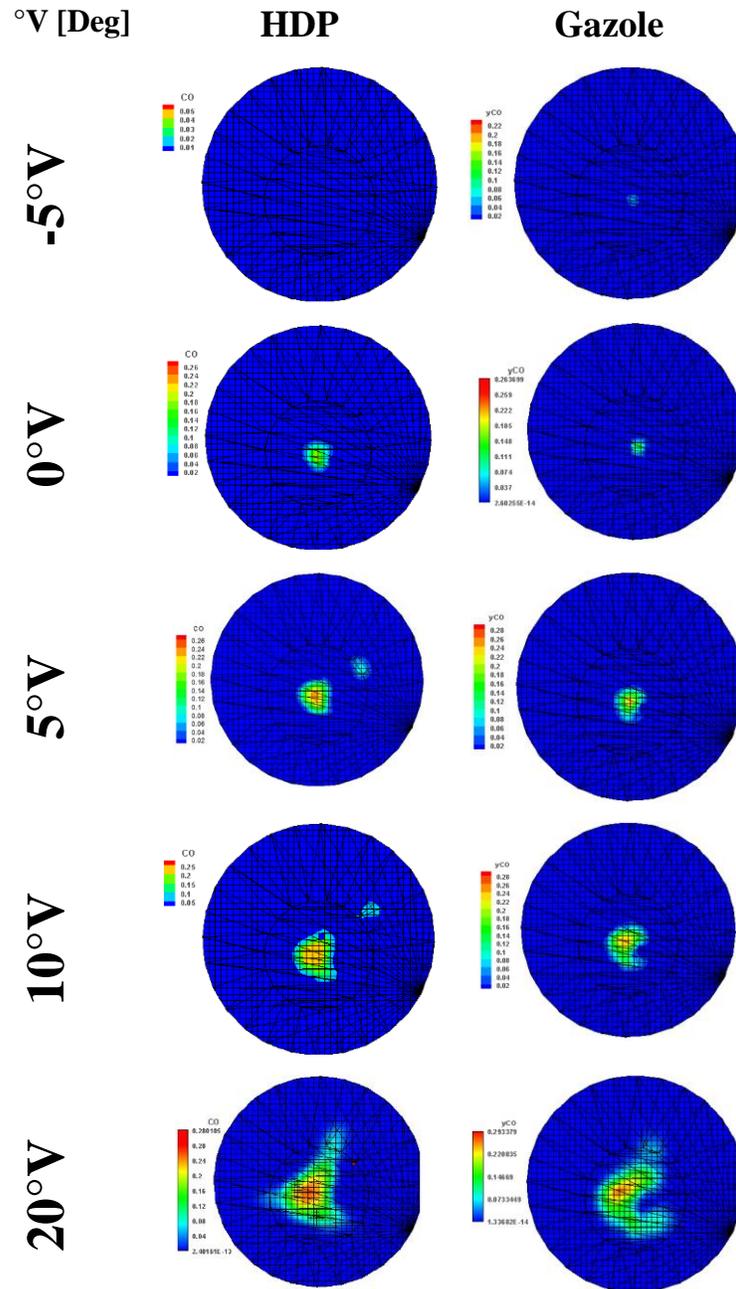


Figure IV.15. Evolution des émissions CO sous forme des contours à différents angles pour les deux carburants.

IV.6.5 Evolution du CO₂

La figure (IV.15) montre l'évolution du CO₂ sous forme des contours à différents angles du vilebrequin pour les deux carburants testés.

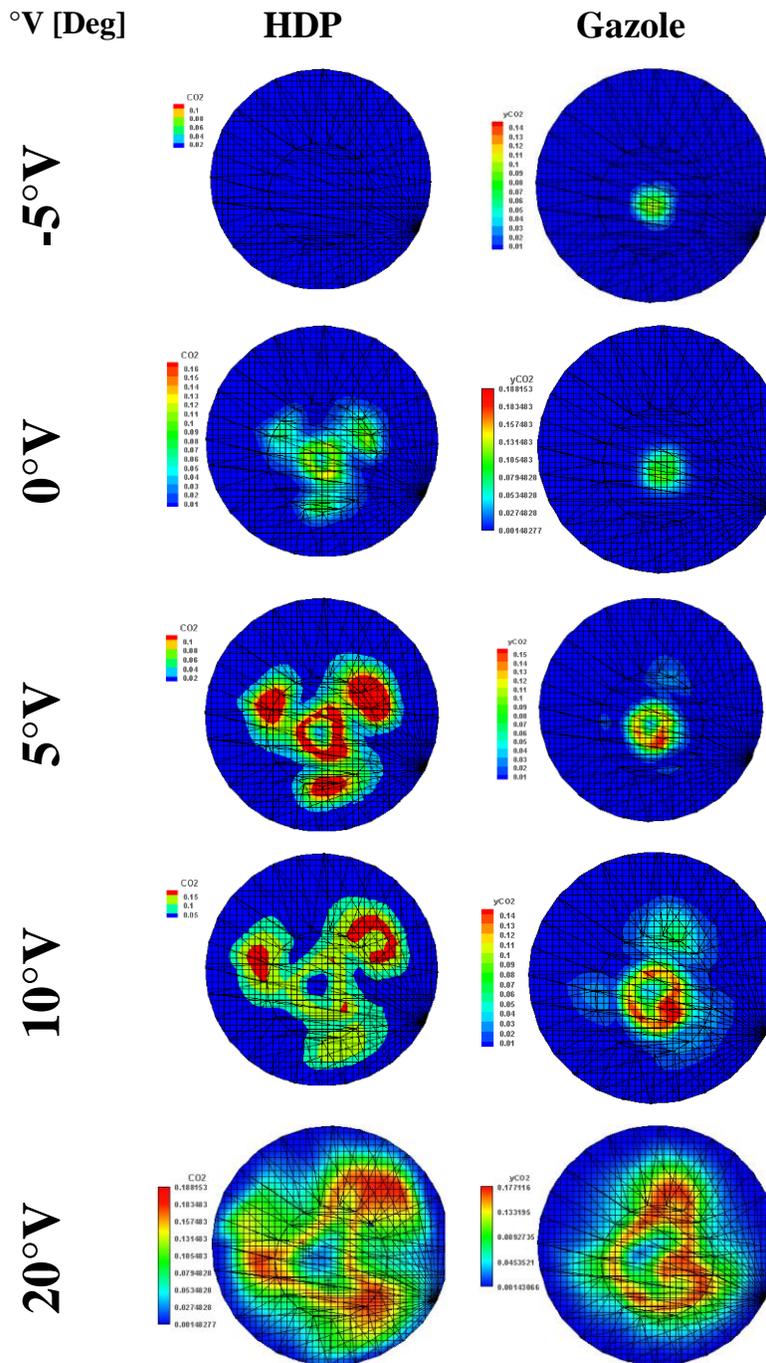


Figure IV.16. Evolution des émissions CO₂ sous forme des contours à différents angles pour les deux carburants.

IV.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons commencé par décrire le choix des différents paramètres du calcul numériques notons les conditions aux limites et initiales, ainsi que le domaine de calcul.

On a exposé la simulation numérique en utilisant un moteur diesel *Kirloskar TAF1*, L'écoulement étant turbulent, tel qu'on peut rencontrer dans les moteurs, en utilisant le modèle RNG k- ϵ . Nous avons utilisé le code *CFD CONVERGE 2.1V*, l'investigation a abouti aux résultats suivants:

- Sur le plan numérique, les modèles utilisés dans ce travail pour représenter les phénomènes thermo-aérochimiques qui se manifestent à l'intérieur de la chambre de combustion (Dégagement de chaleur ; Turbulence ; Combustion, ...) donnent de bons résultats.
- L'analyse des courbes de pression et des taux de dégagement de chaleur montre un délai d'inflammation du gazole plus court par rapport au HDP. Le maximum de la chaleur de combustion est toujours observé pour le gazole.
- Le présent travail constitue un outil à l'effet de comprendre le processus de combustion du carburant HDP dans un moteur Diesel.
- Le HDP peut être considéré comme un carburant alternatif pour les moteurs diesel. L'utilisation de ce carburant ne présente que des avantages à l'exception d'un seul inconvénient qui réside au niveau des émissions des NOx et de gaz non-brulé, le problème des NOx peut être résolu par l'ajout d'un faible pourcentage du diesel au carburant HDP. D'autre part, afin de réduire ces émissions, plusieurs motoristes ont fait appel à l'optimisation du système d'injection et à l'utilisation de systèmes de post-traitement (catalyseurs).

Conclusion générale et perspectives

Le secteur des transports est grandement dépendant des combustibles d'origines fossiles qui, selon de nombreuses prédictions, tendent vers un épuisement à plus ou moins long terme.

Trouver donc une solution de rechange appropriée est fortement une urgence.

Dans le présent travail, L'huile des déchets plastiques (HDP) a été utilisée comme carburant alternatif dans un moteur diesel sans aucune modification. L'enquête a consisté d'étudier les caractéristiques de performance, d'émission et de combustion d'un moteur diesel de type Kirloskar, TAF1 alimenté par l'huile des déchets plastique, en comparant les résultats trouvés par ceux du gasoil.

L'analyse des résultats a montré que la combustion du gazole, et du HDP se comportent globalement de la même manière. Les pics de pression cylindre pour le gasoil sont plus importants que ceux du HDP,

Au niveau des performances, l'analyse des résultats a montré qu'il y a une augmentation de la consommation spécifique lorsque le HDP est utilisé, Ceci est dû à la différence du pouvoir calorifique entre ce dernier et le gasoil. (Voir le Tableau III.5).

Par conséquent, l'efficacité thermique du moteur lorsqu'il est alimenté par ce carburant est légèrement inférieure par rapport à celle obtenue lorsque le moteur fonctionne au gazole. Donc, ce biocarburant peut constituer une alternative au gazole sans grande perte d'efficacité thermique du moteur.

Pour les émissions, les résultats obtenus ont montré que, les concentrations en NO_x , CO_2 et CO sont élevées et les émissions en HC sont faibles.

Les recherches futures pourraient être orientées vers l'optimisation du processus de combustion en optimisant les mélanges air-carburant (paramètres d'injection, swirl, turbulence). Par ailleurs il serait également intéressant de réduire les émissions de NO_x . Les codes de calcul comme Converge, permettent de comprendre la combustion au sein de la

chambre de combustion d'un moteur à combustion interne, notamment le moteur diesel alimenté par des carburants alternatifs. En vertu de ces résultats, il convient de proposer les perspectives suivantes:

- La valorisation des déchets thermoplastiques par le procédé de pyrolyse afin de produire un carburant alternatif pour les moteurs diesel.
- À fin d'améliorer le rendement écologique et économique, il faut faire une investigation numérique sur l'influence des paramètres d'injection, d'écoulement ainsi que la géométrie sur l'évolution de Suies, NO_x et consommation de carburant

Références bibliographiques

- [1] B.D JEMACI & M.A HMED ZAID-HERTOUK, 'La gestion intégrée des déchets solides en Algérie. Contraintes et limites de sa mise en œuvre', CIRIEC N° 2011/04
- [2] BELHANECHÉ Naima, 'Un gisement énorme qui mériterait d'être exploité, Journal de Liberté Algérie', 18-02-2010, P, 07
- [3] J. Scheirs. *Polymer Recycling*, J. Wiley & Sons, W. Sussex, 1998.
- [4] D.S. Achilias, G.P. Karayannidis. *The chemical recycling of PET in the framework of sustainable development*, Water Air Soil Pollut. Focus 4, 385–396, 2007
- [5] D.S. Achilias, C. Roupakias, P. Megalokonomos, A.A. Lappas , E.V. Antonakou. *Chemical recycling of plastic wastes made from polyethylene (LDPE and HDPE) and polypropylene (PP)*, Journal of Hazardous Materials 149, 536–542, 2007
- [6] G.P. Karayannidis, D.S. Achilias. *Chemical recycling of poly(ethyleneterephthalate)*, Macromol. Mater. Eng. 292, 128–146, 2007
- [7] L. Zhou, Y. Wang, Q. Huang, J. Cai. *Thermogravimetric characteristics and kinetic of plastic and biomass blends co-pyrolysis*, Fuel Processing Technology 87, 963–969, 2006
- [8] J.M. Encinar, J.F. González. *Pyrolysis of synthetic polymers and plastic wastes. Kinetic study*, Fuel Process. Technol., 2008
- [9] P.T. Williams, E. Slaney. *Analysis of products from the pyrolysis and liquefaction of single plastics and waste plastic mixtures*, Resources, Conservation and Recycling 51, 754–769, 2007
- [10] L. Ballice. *Classification of volatile products evolved during temperature-programmed co-pyrolysis of low-density polyethylene (LDPE) with polypropylene (PP)*, Fuel 81, 1233-1240, 2002
- [11] A. Demirbas. *Pyrolysis of municipal plastic wastes for recovery of gasoline-range hydrocarbons*, J. Anal. Appl. Pyrolysis 72, 97–102, 2004
- [12] A. Angyal , N. Miskolczi, L. Bartha. *Petrochemical feedstock by thermal cracking of plastic waste*, J. Anal. Appl. Pyrolysis 79, 409–414, 2007
- [13] C. E. Wilkes, J. W. Summers et C. A. Daniels. *PVC Handbook*, Munich, Hanser Verlag, 2005
- [14] J. G. Speight, N. A. Lange. *Lange's handbook of chemistry*, McGraw-Hill, 2005

- [15] J. Bost. *Matieres plastiques, Technique et documentation*, Lavoisier, Paris, 1985
- [16] M. Reyne. *Les plastiques*, Hermés, Paris, 1991
- [17] Radu KUNCSEK, '*Contribution à l'étude de la production et de la combustion en moteur Diesel d'huiles de pyrolyse de déchets thermoplastiques*', Université de Nantes.
- [16] E. G. Baker and , D. C. Elliott, *Catalytic Hydrotreating of Biomass-Derived Oils*, ACS Symposium Series, Vol. 376, pp 228–240, 1988.
- [18] R. Maggi, B. Delmon, *A review of catalytic hydrotreating processes for the upgrading of liquids produced by flash pyrolysis*, Studies in Surface Science and Catalysis, Vol.106,pp.99-113, 1997.
- [19] S. A. Khan, Rashmi, M. Z. Hussain, S. Prasad, U.C. Banerjee, *Prospects of biodiesel production from microalgae in India*, Renewable and Sustainable Energy Reviews 13,pp.2361–2372, 2009.
- [20] P. S. Nigam, A. Singh, *Production of liquid biofuels from renewable resources*, Progress in Energy and Combustion Science 37, pp.52-68, 2011.
- [21] S.N. Naik, Vaibhav V. Goud, Prasant K. Rout, Ajay K. Dalai, *Production of first and second generation biofuels: A comprehensive review*, Renewable and Sustainable Energy Reviews 14, pp.578–597, 2010.
- [12] A. Demirbas. *Pyrolysis of municipal plastic wastes for recovery of gasoline-range hydrocarbons*, J. Anal. Appl. Pyrolysis 72, 97–102, 2004
- [23] M. J. Holst, *Notes on the kiva-II software and chemically reactive fluid mechanics*, Numerical Mathematics Group Computing & Mathematics Research Division Lawrence Livermore National Laboratory, California, 1992
- [24] R. Aglave, *CFD Simulation of Combustion Using Automatically Reduced Reaction Mechanisms: A Case for Diesel Engine.*, thèse de doctorat, University of Heidelberg 2007.
- [25] K.J. Richards, P.K. Senecal, and E. Pomraning, *A Three-Dimensional Computational Fluid Dynamics Program for Transient or Steady State Flows with Complex Geometries*, CONVERGE (Version 1.3), Convergent Science, Inc., Middleton, WI. (2008).
- [26] Yakhot, V., and Orszag, S.A., *Renormalization Group Analysis of Turbulence. I. Basic Theory*, J. Sci. Comput., vol. 1, pp. 3-51, 1986.
- [27] B. Zuo, A.M. Gomes and C.J. Rutland, *Studies of Superheated Fuel Spray Structures and Vaporization in GDI engines*, 11th International Multidimensional engine Modeling User's Group Meeting, [Http://www.erc.wisc.edu](http://www.erc.wisc.edu), 2001. 147

- [28] S. C. Kong, P. K. Senecal and R. D. Reitz, *Developments in Spray Modeling in Diesel and Direct-Injection Gasoline Engines*, Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP, Vol. 54, No. 2, pp. 197-204, 1999.
- [29] A. d. Risi, T. Donato, D. Laforgia, *Theoretical investigation on the influence of physical parameters on soot and NOx engine emissions*, ASME, pp. 53-65, 2011.
- [30] Leguille, M., Ravet, F., Le Moine, J., Pomraning, E., Richards, K., and Senecal, P.K., “*Coupled Fluid-Solid Simulation for the Prediction of Gas-Exposed Surface Temperature Distribution in a SI Engine*” SAE Paper 2017-01-0669, 2017. DOI: 10.4271/2017-01-0669
- [31] C. Baumgarten, *Mixture Formation in Internal Combustion Engines*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006, New York.
- [32] H. Bousbaa, K. Naima, A. Liazid, *Numerical investigation on the combustion behaviors in a DI Diesel engine with various grid control strategies*, 7^{ème} Journées de Mécanique de l’Ecole Militaire Polytechnique, Avril 2010, Bordj El Bahri, Alger
- [33] A. Teraji, Y. Imaoka, T. Tsuda, T. Noda, M. Kubo, S. Kimura, *Development of a time-scale interaction combustion model and its application to gasoline and diesel engines*, Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 32, pp.2751-58, 2009.
- [34] J. P. McCrady, V. L. Stringer, A. C. Hansen and C.F. Lee, *Computational Analysis of Biodiesel Combustion in a Low-Temperature Combustion Engine using Well-Defined Fuel Properties*, SAE international, 2007.
- [35] R.D. Reitz, *Computer Modeling of Sprays*, Mechanical Engineering Department, University of Wisconsin Madison, WI 53706, 1996.
- [36] C. Correa, *Combustion Simulations in Diesel Engines using Reduced Reaction Mechanisms*, thèse de doctorat, University of Heidelberg, 2000.
- [37] J.B. Heywood, «*Internal combustion engine fundamentals*», Ed: Mc Graw Hill, 1988, 930 p.
- [38] J.Abraham, , F. V.Bracco, and R. D.Reitz, *Comparisons of Computed and Measured Premixed Charge Engine Combustion*, Combust. Flame, Vol. 60, p. 309, 1985.
- [39] J.Xin, D. T.Montgomery, Z.Han, and R. D.Reitz, *Computer Modeling of the Six-Mode Emissions Test Cycle of a DI Diesel Engine*, Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, Vol. 119, p. 683, 1997.

- [40] P. Belardini¹ and C. Bertoli, *Multi-Dimensional Modeling of Combustion and Pollutants Formation of New Technology Light Duty Diesel Engines*, Oil & Gas Science and Technology- Rev. IFP, Vol. 54, No. 2, pp. 251-257, 1999.
- [41] D. Jung and D. N. Assanis, *Multi-Zone DI Diesel Spray Combustion Model for Cycle Simulation Studies of Engine Performance and Emissions*, SAE Paper No 2001-01-1246, 2001.
- [42] F. Pischinger, H. Schutle, J. Hansen, *The Diesel engine's future*, VDI-Congress, Wolfsburg, 1988.
- [43] H. Hiroyasu, *Diesel Engine Combustion and Its Modeling*, International Symposium Comodia 94, Japan 1994.
- [44] V. Karel, M. Jan, B. Konstantinos, *Simulation of combustion in a heavy duty diesel engine with focus on soot formation*, www3.fs.cvut.cz/web/fileadmin/documents/12241-BOZEK/publikace/2002/F02V165.pdf
- [45] K.J. Richards, P.K. Senecal, and E. Pomraning, A Three-Dimensional Computational Fluid Dynamics Program for Transient or Steady State Flows with Complex Geometries, CONVERGE (Version 1.3), Convergent Science, Inc., Middleton, WI. (2008).
- [46] K.J. Richards, P.K. Senecal, and E. Pomraning, A Three-Dimensional Computational Fluid Dynamics Program for Transient or Steady State Flow with Complex Geometries, CONVERGE (Version 1.4.1), Convergent Science, Inc., Middleton, WI. (2012).
- [47] M. Mani, C.Subash, G.Nagarajan, '*Performance, emission and combustion characteristics of a DI diesel engine using waste plastic oil*', Applied Thermal Engineering 29 (2009) 2738–2744.