COLLEGES BRETAGNE LOIRE SCIENCES POUR L'INGENIEUR ET LE NUMERIQUE

IMT Atlantique
Bretagne-Pays de la Loire
École Mines-Télécom

THESE DE DOCTORAT DE

L'ÉCOLE NATIONALE SUPERIEURE
MINES-TELECOM ATLANTIQUE BRETAGNE PAYS DE LA LOIRE –
IMT ATLANTIQUE

ECOLE DOCTORALE N° 648
Sciences pour l'Ingénieur et le Numérique
Spécialité : Energétique, Thermique, Combustion

Par

Youcef SEHILI

Contribution à la modélisation pour l'optimisation des performances et des émissions polluantes d'un moteur diesel fonctionnant en mode dual fuel

Thèse présentée et soutenue à l'IMT Atlantique, Nantes, le 27/09/2024
Unité de recherche : Laboratoire Génie des Procédés-Environnement-Agroalimentaire (GEPEA)
Thèse N° : 2024IMTA0419

Rapporteurs avant soutenance :

Abdelkrim LIAZID	Professeur, Université Abou Bekr Belkaid, Algérie
Francesco CONTINO	Professeur, Ecole Polytechnique de Louvain, Belgique

Composition du Jury :

Président :	Jérome BELLETTRE	Professeur, Polytech Nantes
Examinateurs :	Camille HESPEL	Maître de conférences, Polytech Orléans
	Lyes TARABET	Professeur, Ecole Militaire Polytechnique, Algérie
Rapporteurs :	Abdelkrim LIAZID	Professeur, Université Abou Bekr Belkaid, Algérie
	Francesco CONTINO	Professeur, Ecole Polytechnique de Louvain, Belgique

Dir. de thèse :	Khaled LOUBAR	Maître de conférences, IMT Atlantique, Nantes
Encadrant de thèse :	Clément LACROIX	Maître de conférences, IMT Atlantique, Nantes

Invité(s)
Mahfoudh CERDOUN Maître de conférences, Ecole Militaire Polytechnique, Algérie

Remerciements

Je tiens à remercier tous ceux qui ont rendu ce travail possible grâce à leur aide précieuse, leurs conseils fructueux et leurs encouragements tout au long de la réalisation de ce projet.

Je voudrais exprimer ma profonde gratitude et mes sincères remerciements à mon directeur de thèse, Khaled LOUBAR, pour m'avoir offert l'opportunité de travailler sur ce sujet extrêmement intéressant, pour m'avoir encadré, éclairé, bien orienté et surtout, pour avoir veillé à l'aboutissement de mon projet de thèse.

Je n'oublie pas tous les techniciens de laboratoire, dont l'aide a été inestimable lors des tests moteurs, de la préparation et de la modification du banc d'essais. Leur expertise technique et leur dévouement ont grandement facilité la réalisation de mes expériences et ont permis de surmonter de nombreux défis techniques.

J'exprime ma gratitude à Monsieur Jérôme BELLETTRE, Professeur à Polytech Nantes, qui m'a honoré par sa présidence de mon jury de thèse. Je remercie également Monsieur Abdelkrim LIAZID, Professeur à l'Université Abou Bekr Belkaid (Algérie), et Monsieur Francesco CONTINO, Professeur à l'École polytechnique de Louvain (Belgique), d'avoir accepté d'être rapporteurs de ma thèse. Je tiens aussi à remercier Madame Camille HESPEL, Maître de conférences à Polytech Orléans, et Monsieur Lyes TARABET, Professeur à l'École Militaire Polytechnique (Algérie), d'avoir accepté d'être examinateurs de ma thèse.

Que Monsieur Mahfoudh CERDOUN accepte mes profonds remerciements pour son énergie et sa disponibilité tout au long de cette thèse.

Enfin, je ne pourrai jamais assez remercier mes chers parents, mes frères et ma sœur pour avoir partagé avec moi les hauts et les bas de ce parcours. Ils sont une source inépuisable de motivation, d'encouragement et de soutien. Ils m'ont soutenu tout au long de ma vie et durant ce parcours, ayant été mon pilier, et ont fait en sorte que tout cela en vaille la peine.

Liste des publications

Articles à comité de lecture

1. **Sehili Y.**, Loubar K., Lounici M.S., Tarabet L., Cerdoun M., Lacroix C. "*Development of knock prediction technique in dual fuel engines and its mitigation with direct water injection*". Fuel, 2024, vol. 358, p. 130297. (DOI: https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.130297)

2. **Sehili Y.**, Cerdoun M., Tarabet L., Loubar K., Lacroix C. "*Development of a novel multi-fidelity meta modeling approach for robust multi-objective optimization of a natural gas-hydrogen/diesel dual fuel engine*". Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D : Journal of Automobile Engineering, 2024, p. 09544070231226349. (DOI: https://doi.org/10.1177/09544070231226349)

3. **Sehili Y.**, Cerdoun M., Loubar K., Tarabet L. "*Dual fuel engine injector temperature monitoring : An innovative thermal analysis approach*". Applied Thermal Engineering, 2024, vol. 249, p. 123370. (DOI: https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2024.123370)

4. **Sehili Y.**, Loubar K., Tarabet L., Cerdoun M., Lacroix C. "*Development of Predictive Model for Hydrogen-Natural Gas/Diesel Dual Fuel Engine*". Energies, 2023, vol. 16, no 19, p. 6943. (DOI: https://doi.org/10.3390/en16196943)

5. **Sehili Y.**, Loubar K., Tarabet L., Cerdoun M., Lacroix C. "*Computational Investigation of the Influence of Combustion Chamber Characteristics on a Heavy-Duty Ammonia Diesel Dual Fuel Engine*". Energies, 2024, vol. 17, no 5, p. 1231. (DOI: https://doi.org/10.3390/en17051231)

6. **Sehili Y.**, Tarabet L., Cerdoun M., Loubar K., Lacroix C. "*Towards improving efficiency and mitigating emissions in a natural gas/diesel direct injection dual fuel engine using EGR*". International Journal of Engine Research, 2024, p. 14680874241261003. (DOI: https://doi.org/10.1177/146808742

Conférences internationales

1. **Sehili Y.**, Loubar K., Tarabet L., Cerdoun M., Lacroix C. "*Meta-model optimization of dual-fuel engine performance and emissions using emulsified diesel with varying water percentages and injection timing*". SAE Technical Paper, 2023. (DOI: https://doi.org/10.4271/2023-24-0032)

2. **Sehili Y.**, Loubar K., Tarabet L., Cerdoun M., Lacroix C. "*Effect of composition variability of a syngas in a spark ignition engine : an experimental study*". Chemical Engineering Transactions, 2022, vol. 96, p. 301-306. (DOI: https://doi.org/10.3303/CET2296051)

Table des matières

Remerciements i

Liste des publications iii

Table des matières v

Liste des symboles et abréviations ix

Liste des figures xi

Liste des tableaux xvii

Introduction générale 1
1 Contexte et justification . . . 2
2 Objectifs de la recherche . . . 2
3 Méthodologie . . . 3
4 Contributions attendues . . . 3
5 Plan du mémoire . . . 4

1 État de l'art et revue bibliographique 7
1 Généralités sur les moteurs diesel fonctionnant en mode dual fuel . . . 8
1.1 Principe de fonctionnement . . . 8
1.2 Combustion et taux de dégagement de chaleur . . . 9
1.3 Turbulence dans le cylindre . . . 14
1.4 Émissions polluantes . . . 15
1.5 Valorisation des combustibles gazeux dans les moteurs dual fuel . . . 17
1.6 Avantages et limitations de la combustion dual fuel . . . 18
1.6.1 Avantages du moteur dual fuel . . . 18
1.6.2 Limitations du moteur dual fuel . . . 19
1.6.3 Pistes d'amélioration en cours de développement . . . 20
2 Modélisation thermodynamique 0D dans les moteurs à combustion interne . . . 21
2.1 Modèles à une zone . . . 23
2.1.1 Modèle de Wiebe . . . 23
2.1.2 Modèles de diffusion prémélangée . . . 27
2.2 Modèles à deux zones . . . 30
2.3 Modèles multizones . . . 31
2.3.1 Modèles avec découpage qualitatif . . . 32
2.3.2 Modèles avec découpage systématique Lagrangien . . . 34
2.3.3 Modèles avec un découpage systématique Eulérien . . . 36

3 Sous modèles de combustion dans les moteurs à combustion interne 38
3.1 Modèles d'évaporation 38
3.2 Modèles de délai d'auto-inflammation 39
3.3 Modèles des émissions polluantes 40
3.3.1 Formation des oxydes d'azote (NO_x) 41
3.3.2 Formation des particules, des hydrocarbures non brûlés (HC), et des monoxydes de carbone (CO) 43
4 Modélisation thermodynamique 0D de la combustion dual fuel 44
5 Modélisation CFD 50
6 Méta-modélisation des performances et émissions 52
7 Conclusion 56

2 Modélisation 0D des moteurs à combustion interne 59
1 Généralités sur les modèles de combustion 60
1.1 Les modèles de dégagement de chaleur 60
1.2 Les modèles 0D de transfert thermique 63
1.3 Les sous modèles phénoménologiques 64
1.3.1 Injection et pulvérisation 64
1.3.2 Évaporation 67
1.3.3 Délai d'auto-inflammation 69
2 Modèle développé 69
2.1 Contexte général du modèle 70
2.2 Cas d'étude 71
2.2.1 Procédure expérimentale 72
2.2.2 Taux de dégagement de chaleur 73
2.3 Méthodologie et développement du modèle 74
2.3.1 Discrétisation du taux de dégagement de chaleur 74
2.3.2 Modélisation de la première phase 77
2.3.3 Modélisation de la deuxième phase 83
3 Résultats et discussions 86
3.1 Discrétisation du taux de dégagement de chaleur 86
3.2 Modélisation des délais d'auto-inflammation 88
3.3 Taux de dégagement de chaleur 98
4 Conclusion 104

3 Limitations du moteur dual fuel : cliquetis et surchauffe d'injecteurs 107
1 Traitement du cliquetis dans les moteurs dual fuel 108
1.1 Contexte général du modèle 108
1.2 Méthodologie 110
1.2.1 Modélisation du cliquetis 110
1.2.2 Suppression de cliquetis 113
1.3 Résultats et discussions 115
1.3.1 Modélisation du cliquetis 115
1.3.2 Suppression de cliquetis 121
2 Analyse thermique des injecteurs 124
2.1 Contexte général de l'étude 125
2.2 Développement de l'approche 126
2.2.1 Subdivision de la géométrie de l'injecteur 127
2.2.2 Estimation des conditions aux limites 129
2.3 Application : Injecteur pour moteur dual fuel gaz naturel/gazole 134

2.3.1 Modèle du moteur dual fuel gaz naturel/gazole . . . 134
2.3.2 Analyse des éléments finis . . . 134
2.4 Résultats du modèle . . . 135
2.4.1 Caractéristiques de l'injection . . . 135
2.4.2 Conditions aux limites . . . 136
2.4.3 Cartographie de température de l'injecteur . . . 140
2.4.4 Cartographie de température de l'injecteur : Cas général . . . 142
3 Conclusion . . . 144

4 Modélisation CFD : Application à la décarbonation 145
1 Modélisation CFD des moteurs diesel en mode dual fuel . . . 146
1.1 Contexte de l'étude . . . 146
1.2 Logiciel Converge^{TM} et schéma numérique . . . 146
1.3 Méthodes de maillage . . . 147
1.4 Modèle de turbulence . . . 148
1.5 Modélisation de la pulvérisation . . . 149
1.5.1 Structure du jet . . . 150
1.5.2 Nombres adimensionnels caractéristiques d'un jet . . . 151
1.6 Modélisation de la combustion . . . 152
1.7 Modélisation des émissions polluantes . . . 153
2 Moteur dual fuel ammoniac/gazole : Effet de la forme du bol et de l'enrichissement par l'hydrogène . . . 153
2.1 Contexte général . . . 154
2.2 Données expérimentales pour validation . . . 155
2.3 Modèle numérique et sa validation . . . 155
2.4 Description de l'approche et adaptation du bol . . . 158
2.5 Résultats et analyse de la combustion . . . 162
2.5.1 Influence des caractéristiques de la chambre de combustion . . . 162
2.5.2 Validation de la configuration optimale en termes de charge moteur 166
2.5.3 Effet de l'ajout d'hydrogène . . . 167
3 Moteur dual fuel méthanol/gazole pour véhicule poids lourd . . . 170
3.1 Contexte général . . . 170
3.2 Approche numérique adoptée . . . 172
3.2.1 Cas référence : données expérimentales . . . 172
3.2.2 Validation du modèle numérique . . . 172
3.3 Adaptation des injections pilote et primaire . . . 174
3.4 Résultats et discussion . . . 176
3.5 Conclusion . . . 180

5 Méta-modèles et optimisation des moteurs à combustion interne 183
1 Modélisation-Optimisation ON-line (parallèle) de l'injection pilote émulsifié . . . 184
1.1 Contexte général . . . 184
1.2 Description de l'approche . . . 187
1.3 Résultats et discussions . . . 190
1.3.1 Validation de l'approche . . . 190
1.3.2 Principaux résultats . . . 192
2 Modélisation multi-fidélité . . . 198
2.1 Contexte général . . . 199
2.2 Développement de l'approche . . . 200
2.3 Optimisation basée sur le modèle développé . . . 207

2.4 Validation de l'approche 207
2.5 Application à l'optimisation d'un moteur dual fuel 213
3 Conclusion 219

Conclusion et perspectives **221**
1 Conclusions de l'étude 221
2 Ouverture et perspectives 225

Bibliographie **227**

Liste des symboles et abréviations

Mécanique des Fluides et Thermodynamique

CFD	Computational Fluid Dynamics	
Re	Nombre de Reynolds	
We	Nombre de Weber	
Nu	Nombre de Nusselt	
μ	Viscosité dynamique	Pa s
P	Pression	Pa
T	Température	K
V	Volume	m^3
ϕ	Richesse	
τ_c	Taux de compression	
Q	Chaleur dégagée	J
η_{th}	Rendement thermique indiqué	%
PCI	Pouvoir calorifique inférieur	J/kg
ρ	Masse volumique	kg/m^3
t	Temps	s
TDC	Taux de dégagement de chaleur	J/°V
E_A	Énergie d'activation	J/mol
R	Constante universelle des gaz parfaits	J/mol.K
CTC	Coefficient de transfert de chaleur	$W/m^2.K$
TAP	Température adiabatique de la paroi	K
D_h	Diamètre hydraulique	m
SMD	Diamètre moyen de Sauter	m

Chimie et Gaz

NO	Monoxyde d'azote
NO_2	Dioxyde d'azote
NO_x	Oxydes d'azote
NH_3	Ammoniac
CO_2	Dioxyde de carbone
CO	Monoxyde de carbone
O_2	Oxygène
CH_4	Méthane
HC	Hydrocarbures imbrûlés
C_7H_{16}	n-heptane
H_2	Hydrogène

GN	Gaz naturel	
HGN	Hydrogène-gaz naturel	

Moteurs et Combustion

DF	Dual Fuel	
DFAG	Dual fuel ammoniac/gazole	
DFMG	Dual fuel méthanol/gazole	
PMB	Point mort bas	
PMH	Point mort haut	
CI	Allumage par compression	
SI	Allumage commandé	
PM	Particules fines	
eff_{comb}	Efficacité de combustion	%
T_{inj}	Instant d'injection	°V
IC	Indice de cliquetis	bar
IO	Indice d'octane	
ID	Délai d'auto-inflammation	°V
D	Alésage du cylindre	m
CI	Indice de cétane	
AOSA	Avance ouverture soupape admission	°V
RFSA	Retard fermeture soupape admission	°V
AOSE	Avance ouverture soupape échappement	°V
RFSE	Retard fermeture soupape échappement	°V
θ	Angle vilebrequin	°V

Modélisation et Simulation

MFM	Modèle multi-fidélité	
BF	Basse-fidélité	
HF	Haute-fidélité	
DOE	Plan d'expérience	
RNA	Réseaux de neurones artificiels	
RBF	Fonction de base radiale	

Paramètres Physiques et Mathématiques

$\dot{m}$	Débit massique	kg/s
N	Vitesse de rotation	tr/min
m	Masse	kg
E_{sh}	Énergie partagée	%

Liste des figures

1 Gouvernements ayant fixé des objectifs pour l'élimination progressive de toutes les nouvelles ventes de voitures particulières à moteur à combustion interne[1] (CC BY-SA 4.0). . . . 2
2 Structure de la thèse. . . . 4

1.1 Principe de fonctionnement du moteur dual fuel. . . . 9
1.2 Étapes de combustion typique dans le moteur diesel. (La figure est reproduite de [2] avec la permission de McGraw-Hill LLC). . . . 10
1.3 Différents modes opérationnels du moteur dual fuel. (La figure est reproduite de [7] avec la permission de Taylor and Francis Group LLC). . . . 12
1.4 Courbe schématique pour les contributions possibles au dégagement de chaleur en mode dual fuel. (La figure est reproduite de [10] avec la permission de SAGE Publications Ltd. Journals). . . . 13
1.5 Phénomènes de turbulence dans la chambre de combustion. (La figure est reproduite de [18] avec la permission de Springer Nature BV). . . . 15
1.6 Schématisation de la différence entre une combustion normale et une combustion cliquetante. (La figure est reproduite de [37] avec la permission de SAE International). . . . 20
1.7 Types de modélisation de la combustion dans les moteurs à combustion interne. . 22
1.8 Paramètres de Wiebe pour la combustion de prémélange et diffusive. (La figure est reproduite de [46] avec la permission de SAE International). . . . 24
1.9 Comparaison des six paramètres de la fonction de Wiebe pour les moteurs ID et IDI sous charge variable à gauche et différents calages d'injection à droite. Régime moteur, ID 2500 tr/min, IDI 1400 tr/min. (La figure est reproduite de [46] avec la permission de SAE International). . . . 25
1.10 Comparaison des résultats de la double fonction de Wiebe (DFW) avec des résultats expérimentaux. (La figure est reproduite de [49] avec la permission de SAE International). . . . 26
1.11 Processus de combustion. (La figure est reproduite de [50] avec la permission de SAE International). . . . 28
1.12 Développement du jet après l'injection. (La figure est reproduite de [52] avec la permission de SAE International). . . . 29
1.13 Chambre de combustion discrétisée en deux zones. . . . 31
1.14 Développement de jet dans la chambre de combustion et processus de combustion. (La figure est reproduite de [56] avec la permission de American Chemical Society). 33
1.15 Discrétisation et développement de jet avant et après interaction avec la paroi. (La figure est reproduite de [61] avec la permission de SAE International). . . . 33

1.16 Discrétisation Lagrangienne du jet. (La figure est reproduite de [62] avec la permission de Japan Society of Mechanical Engineers). 34
1.17 Processus de combustion dans un paquet de fuel. (La figure est reproduite de [62] avec la permission de Japan Society of Mechanical Engineers). 35
1.18 Discrétisation Eulérienne du spray. (La figure est reproduite de [66] avec la permission de Elsevier). 37
1.19 Développement de jet au nez de l'injecteur. (La figure est reproduite de [69] avec la permission de Elsevier). 38
1.20 Développement de jet dans la combustion dual fuel [81] (CC BY 4.0). 46
1.21 Processus de combustion dual fuel [81] (CC BY 4.0). 46
1.22 Intégration du jet avec l'air ambiant dans la chambre de combustion et la turbulence. (La figure est reproduite de [83] avec la permission de SAE International). 47
1.23 Formes de bol de la chambre de combustion. (La figure est reproduite de [99] avec la permission de Elsevier). 51
1.24 Influence de la forme du bol sur la combustion. (La figure est reproduite de [99] avec la permission de Elsevier). 51
1.25 Schéma d'apprentissage du modèle SVM. 54
1.26 Construction et validation du modèle de réseau neuronal représentant le débit d'air dans un moteur 2,4 litres VVT. (La figure est reproduite de [105] avec la permission de SAE International). 55

2.1 Paramètres du jet liquide injecté. (La figure est reproduite de [112] avec la permission de Elsevier). 65
2.2 Représentation détaillée de l'installation expérimentale. 72
2.3 Variation des taux de dégagement de chaleur pour un moteur dual fuel méthane/gazole. (La figure est reproduite de [7] avec la permission de Taylor and Francis Group LLC). 74
2.4 Exemple de taux de dégagement de chaleur en mode dual fuel. 75
2.5 Illustration de l'allure des signaux de Gauss multiples. 76
2.6 Méthodologie du modèle développé. 77
2.7 Scénario illustratif pour le développement du jet carburant. 79
2.8 Méthodologie du modèle de jet quasi-dimensionnel. 82
2.9 Représentation des phases : (a) discrétisation du TDC en multi-signaux de Gauss, (b) discrétisation du TDC en deux phases. 83
2.10 Principe de modélisation de la deuxième phase. 84
2.11 Séparation des phases pour les résultats expérimentaux. 87
2.12 (a) Taux de dégagement de chaleur et (b) cumul de dégagement de chaleur. . . . 88
2.13 Surface de réponse du délai d'auto-inflammation du gazole pilote. 89
2.14 Comparaison entre le ID expérimental et calculé. 89
2.15 Organigramme pour la construction du modèle de ID_g. 90
2.16 Évaluation de ID_g par l'outil CFD Converge. 91
2.17 Comparaison entre le délai d'auto-inflammation (ID) expérimental et simulé. . . 91
2.18 Architecture du modèle RNA-PA. 92
2.19 Variation de l'EQM en fonction du nombre de neurones pour différents algorithme de rétropropagation. 94
2.20 Valeurs globales de R pour le modèle développé. 95
2.21 Variations de ID en fonction des paramètres d'entrée du modèle RNA-PA. 96
2.22 Délai d'allumage du mélange air-gaz. 98
2.23 Illustration du modèle quasi-dimensionnel. 98
2.24 Distribution des signaux de Gauss pour la deuxième phase. 99

2.25 Modélisation Gaussienne de la seconde phase pour différentes compositions de gaz (charge = 40%). . . . 100
2.26 Modélisation globale des deux phases pour 40% de charge avec différentes compositions de gaz. . . . 101
2.27 Modélisation Gaussienne globale pour une charge de 80% avec différentes compositions de gaz. . . . 102
2.28 Surfaces de réponse pour les exemples de modélisation des paramètres c_6 et a_6. . . 103
2.29 Validation du modèle de prédiction de NO_x. . . . 103
2.30 Variations de NO_x selon la charge moteur et le taux d'enrichissement avec l'hydrogène. . . . 104

3.1 Organigramme de l'approche de modélisation du cliquetis. . . . 113
3.2 Configuration simulée en 3D. . . . 114
3.3 Processus d'injection d'eau. . . . 114
3.4 Détection du cliquetis sur le signal de pression expérimental. . . . 116
3.5 Surfaces de réponse pour les paramètres X_1 et X_2. . . . 117
3.6 Approche de correction des paramètres : (a) X_1 et (b) X_2. . . . 118
3.7 Variations de X_3 en fonction du pourcentage de H_2 et de la charge. . . . 118
3.8 Surface de réponse du paramètre X_3. . . . 119
3.9 Limites de cliquetis selon les conditions de fonctionnement. . . . 120
3.10 Modélisation du cliquetis selon les conditions de fonctionnement. . . . 120
3.11 Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées : (a) pression dans le cylindre, (b) NO_x. . . . 121
3.12 Effet de la quantité d'eau injectée sur : (a) la température interne, (b) le travail indiqué. . . . 122
3.13 Effet d'injection d'eau sur le cliquetis. . . . 123
3.14 Variation de l'intensité du cliquetis en fonction du moment d'injection d'eau. . . . 124
3.15 Illustration des configurations des injecteurs. . . . 127
3.16 Taille de l'injecteur étudié. . . . 127
3.17 Zones d'injecteur. . . . 128
3.18 Organigramme de la simulation globale. . . . 129
3.19 Illustration du processus de transfert de chaleur dans la zone "Inj bloc 1". . . . 131
3.20 (a) Modèle réel et (b) modèle idéal adopté pour la zone "Siège". . . . 132
3.21 Illustration du processus de transfert de chaleur dans la zone "Conduite". . . . 134
3.22 (a) Maillage de la géométrie de l'injecteur, (b) variation de la température maximale dans l'injecteur en fonction du nombre d'éléments de maillage. . . . 135
3.23 Profil d'injection réel et simplifié pour : (a) le mode diesel, (b) le mode dual fuel. 136
3.24 Variation de CTC et de TAP. . . . 137
3.25 Variation de CTC et de TAP pour la zone "Buse" dans le cas : (a) diesel, (b) dual fuel. . . . 137
3.26 Variation de CTC et de TAP pour la zone "Siège" dans le cas : (a) diesel, (b) dual fuel. . . . 138
3.27 Variation de CTC et de TAP pour la zone "Conduite" dans le cas : (a) diesel, (b) dual fuel. . . . 139
3.28 Cartographies des températures de l'injecteur à différents cycles moteurs pour un fonctionnement diesel et dual fuel. . . . 141
3.29 (a) Points de contrôle et variation de la température dans ces points pour différents cycles moteur en mode : (b) diesel, (c) dual fuel. . . . 141

3.30 (a) Variation de la température d'équilibre pour chaque point de contrôle, (b) variation de l'écart-type des températures d'équilibre dans la zone de la pointe de l'injecteur. . . . 142
3.31 Cartographie de la température maximale des injecteurs en fonction de la charge du moteur et de la quantité de carburant pilote injectée. . . . 143

4.1 Structure typique d'un jet[2] (Reproduit avec la permission de ARCHIE-West). . . . 151
4.2 Domaine de calcul considéré. . . . 156
4.3 Différents raffinements de la grille par Converge^{TM} : (a) -14,3 °V Après PMH, (b) -3,9 °V Après PMH, (c) +10,0 °V Après PMH. . . . 156
4.4 Effet du nombre de cellules sur l'erreur relative basée sur le travail du moteur et les émissions de NO_x. . . . 157
4.5 Validation du modèle CFD : (a) signal de pression et (b) performances et émissions. 158
4.6 (a) Plage de déformation du bol, (b) paramètres de contrôle de déformation. . . . 159
4.7 Organigramme de l'approche proposée. . . . 160
4.8 Architecture du modèle RNA. . . . 161
4.9 Historique des sept derniers fronts de Pareto. . . . 162
4.10 Front de Pareto final. . . . 163
4.11 Effet de la géométrie et du taux de Swirl sur le développement de la combustion. 164
4.12 Effet de la géométrie sur la vitesse perpendiculaire à l'axe de révolution du cylindre (V_w). . . . 165
4.13 Variations de : (a) CO, (b) CO_2 pour les cas de fonctionnement de référence. . . . 165
4.14 Variation du rendement thermique pour les différentes charges. . . . 166
4.15 Variation de : (a) NO_x, (b) CO, (c) CO_2 pour les différentes charges. . . . 167
4.16 Effet de l'enrichissement en hydrogène sur : (a) la distribution de l'énergie, (b) les émissions de NO_x. . . . 168
4.17 Effet de l'enrichissement en hydrogène sur : (a) la pression, (b) la température dans le cylindre. . . . 169
4.18 Effet de l'enrichissement en hydrogène sur le développement de la combustion. . . . 169
4.19 Configuration géométrique de simulation 3D. . . . 173
4.20 Validation du modèle numérique en termes de : (a) pression cylindre, (b) émissions. 174
4.21 Comparaison des cas selon η_{th}, NO_x, et CO. . . . 177
4.22 Variations de : (a) NO_x, (b) CO en fonction du η_{th}. . . . 177
4.23 Effets de la stratégie d'injection gazole et méthanol sur : (a) CA10, (b) CA50, (c) CA10-90. . . . 179
4.24 Variations de la température dans le cylindre en fonction de l'instant d'injection du méthanol. . . . 180

5.1 Organigramme de l'approche proposée pour l'optimisation multi-objectifs basée sur un méta-modèle. . . . 188
5.2 Fronts de Pareto pour les deux scénarios. . . . 192
5.3 Fronts de Pareto pour le deuxième scénario et population totale. . . . 193
5.4 Évolution de la température interne en fonction du degré vilebrequin pour les trois cas de référence. . . . 194
5.5 Variation de η_{th}, NO_x, et IC en fonction de T_{inj} et $q_{\%}$. . . . 195
5.6 Variations de la pression dans le cylindre en fonction de la fraction d'eau dans l'émulsion. . . . 197
5.7 Variations de : (a) HC, (b) CO, (c) CO_2 en fonction de $q_{\%}$. . . . 198
5.8 Organigramme de la stratégie de la modélisation MF proposée. . . . 201
5.9 Caractérisation des zones pour le modèle BF. . . . 203

5.10 Algorithme de génération du plan d'expérience du modèle HF. 204
5.11 Variations des valeurs de pondération α et β. 205
5.12 Analyse de l'erreur de modélisation pour les deux méthodes d'optimisation pour la détermination de a_i et b_i. 206
5.13 Comparaison de coûts des approches pour les fonctions de validation pour chaque cas d'étude. 210
5.14 Variation de gain de l'approche développée par rapport aux autres approches. . . 211
5.15 Variation de : (a) la moyenne, (b) l'écart type des erreurs pour chaque approche. 213
5.16 Validation du modèle CFD en termes de : (a) signal de pression, (b) performances et émissions. 216
5.17 Fronts de Pareto des cas optimaux pour chaque scénario. 217
5.18 Fronts de Pareto des cas optimaux pour le scénario 2 selon une optimisation robuste et non-robuste. 218

Liste des tableaux

1.1 Constante de vitesse pour le mécanisme de formation de NO [76]. 41
1.2 Récapitulatif des avantages, des limitations et des applications des différents types de modélisation. 57

2.1 Longueur de pénétration du jet selon différentes corrélations. 66
2.2 Corrélation des angles du jet. 67
2.3 Corrélation du SMD. 67
2.4 Corrélation du délai d'auto-inflammation. 69
2.5 Résumé de l'état de l'art en matière de modélisation de la combustion dual fuel. 71
2.6 Caractéristiques principales du moteur. 72
2.7 Composition et pouvoir calorifique du GN. 73
2.8 Coefficients de transfert de masse. 81
2.9 Coefficients de transfert de chaleur. 81
2.10 Calcul de la pénétration et de l'atomisation de la pulvérisation. 83
2.11 Paramètres de calcul pour le test d'indépendance de RNA. 93
2.12 Paramètres d'entrée et résultats du modèle RPA-PA. 95

3.1 Récapitulatif sur les différents types de modélisation du cliquetis en mode de combustion dual fuel. 109
3.2 Résultats expérimentaux du cliquetis. 115
3.3 Résultats de l'analyse des variables. 116
3.4 Récapitulatif sur les différents types de modélisation de la température dans l'injecteur. 125
3.5 Définitions des zones d'injecteurs. 128
3.6 Caractéristiques d'injection. 136
3.7 Paramètres géométriques de la zone "Siège". 138
3.8 Paramètres géométriques des zones "Inj bloc 1" et "Inj bloc 2". 139
3.9 Valeurs moyennes de TAP et de CTC pour le mode diesel et dual fuel. 140

4.1 Stratégies d'amélioration de la combustion d'ammoniac. 154
4.2 Caractéristiques du moteur [198]. 155
4.3 Sous modèles de la simulation. 157
4.4 Paramètres de définition du problème d'optimisation. 159
4.5 Plages de variation des paramètres de contrôle de la géométrie du bol. 159
4.6 Perturbations maximales des derniers fronts de Pareto par rapport au front final. 162
4.7 Comparaison des cas de fonctionnement de référence. 163
4.8 Taux de contribution énergétique des combustibles 168
4.9 Propriétés des carburants. 170

4.10 Performances et émissions pour le Cas 2 avec enrichissement en hydrogène. . . . 170
4.11 Caractéristiques du moteur [212]. 172
4.12 Paramètres d'injection (°V Avant PMH) considérés pour les simulations numériques. 175
4.13 Caractéristiques des cas de référence. 176
4.14 Cas optimaux et leurs caractéristiques. 178

5.1 Analyse d'introduction d'eau dans les moteurs. 186
5.2 Plages de variation des variables de décision. 191
5.3 Paramètres des deux scénarios définissant l'approche. 192
5.4 Caractéristiques des cas de référence. 193
5.5 Fonctions de validation. 208
5.6 Paramètres de réglage de modèle multi-fidélité. 209
5.7 Coût du basse et haute-fidélité pour les fonctions de validation selon les différentes approches. 210
5.8 Définitions des erreurs de validation. 211
5.9 Variations des erreurs pour chaque fonction de validation selon les approches. . . 212
5.10 Spécifications du moteur diesel AVL 5402. 214
5.11 Intervalles de variations des variables de décisions. 214
5.12 Paramètres et modèles de simulation. 215
5.13 Paramètres de réglage du modèle multi-fidélité selon les scénarios adoptés. 216
5.14 Caractéristiques des cas de référence. 218
5.15 Validation d'un cas optimal avec des résultats expérimentaux. 219

Introduction générale

Dans un contexte mondial où la transition énergétique et la réduction des émissions polluantes sont des priorités impératives, l'industrie automobile et le secteur énergétique se tournent de plus en plus vers des solutions innovantes pour répondre à ces exigences. Les moteurs à allumage par compression fonctionnant en mode dual fuel, qui combinent l'utilisation de plusieurs carburants, se révèlent être une alternative prometteuse. En effet, ces moteurs ont le potentiel de réduire les émissions de gaz à effet de serre tout en offrant une grande flexibilité opérationnelle. Cependant, malgré ces avantages, plusieurs défis subsistent, limitant le fonctionnement du moteur. Dans la perspective de contourner ces problèmes, la modélisation du fonctionnement du moteur, notamment de la combustion, est primordiale.

De plus, il est crucial de souligner l'importance du développement et de l'amélioration des moteurs dual fuel, en particulier en considérant les interdictions potentielles des moteurs thermiques dans le futur pour certains pays. Malgré ces mesures restrictives prévues, la transition vers des moteurs moins polluants peut être facilitée par l'optimisation et le développement des moteurs dual fuel, offrant ainsi une solution pour réduire significativement la pollution pendant cette phase transitoire. Il est également essentiel de noter que de nombreux pays ne sont pas encore prêts à adopter une stratégie d'interdiction des moteurs thermiques (Figure 1), mettant en avant la nécessité de continuer à investir dans l'optimisation des moteurs dual fuel pour une transition énergétique efficace.

Cette thèse vise à relever ces défis en développant et explorant différentes techniques et approches de modélisation afin de les utiliser dans le but d'optimiser le fonctionnement des moteurs dual fuel.

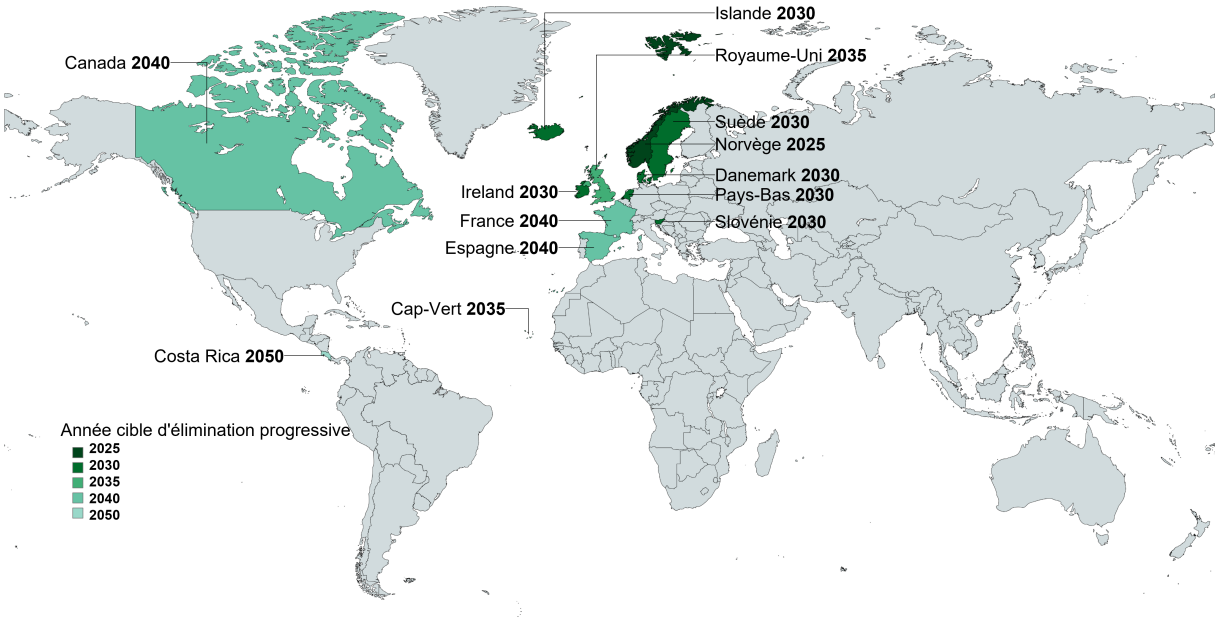


FIGURE 1 – Gouvernements ayant fixé des objectifs pour l'élimination progressive de toutes les nouvelles ventes de voitures particulières à moteur à combustion interne[1] (CC BY-SA 4.0).

1 Contexte et justification

Le besoin croissant de réduire les émissions de gaz à effet de serre et d'améliorer l'efficacité énergétique des moteurs à combustion interne a conduit à une recherche intensive dans le domaine des moteurs dual fuel. Ces moteurs offrent la possibilité d'utiliser une combinaison de différents type de carburant, ce qui permet de réduire les émissions tout en maintenant des performances élevées. Cependant, la complexité de la combustion dans ces moteurs nécessite des outils de modélisation performants pour prédire et optimiser leur fonctionnement avec un coût de calcul réduit. Le phénomène de cliquetis, causé par des auto-inflammations incontrôlées dans la chambre de combustion, et la surchauffe des injecteurs, due à des conditions de fonctionnement sévères, sont des problèmes critiques qui nécessitent des approches de modélisation précises et efficaces. De plus, le besoin de décarbonation impose l'étude de carburants alternatifs, tels que l'ammoniac et le méthanol, qui présentent leurs propres défis et opportunités.

2 Objectifs de la recherche

L'objectif principal de cette thèse est de développer des méthodes de modélisation et d'optimisation avancées pour améliorer les performances des moteurs dual fuel en termes de rendement, d'émissions polluantes et de durabilité des composants clés. Les objectifs spécifiques incluent :

• La création de modèles 0D pour une prédiction précise des dynamiques de combustion dans les moteurs dual fuel fonctionnant avec une variété de carburants.

• La conception de modèles prédictifs pour éliminer le cliquetis et éviter la surchauffe des injecteurs.

1. https://theicct.org/growing-momentum-global-overview-of-government-targets-for-phasing-out-sales-of-new-inte

• L'investigation de l'utilisation de combustibles alternatifs, notamment l'ammoniac et le méthanol, pour une décarbonation efficace des moteurs.
• L'élaboration de nouvelles technique de méta-modélisation pour optimiser les paramètres de fonctionnement des moteurs, les caractéristiques géométriques et les conditions de fonctionnement.

3 Méthodologie

La méthodologie adoptée dans cette thèse est structurée en plusieurs étapes clés, en lien avec les objectifs visés et les outils utilisés, comme détaillé ci-dessous.

• **Revue de la littérature :** Une analyse exhaustive des études existantes sur les moteurs dual fuel et les méthodes de modélisation associées sera réalisée pour mettre en évidence les lacunes et les opportunités de recherche.
• **Développement du modèle :** Un modèle 0D sera développé et validé à l'aide de données expérimentales provenant de tests sur un moteur dual fuel. Ce modèle sera utilisé pour simuler et analyser les dynamiques de combustion sous différentes conditions de fonctionnement.
• **Modélisation prédictive :** Des modèles prédictifs seront conçus pour anticiper et atténuer les problèmes de cliquetis et de surchauffe des injecteurs. Ceci inclura le développement des modèles basés sur la combustion, la thermodynamique et les transferts de chaleur.
• **Étude des combustibles alternatifs :** L'utilisation de l'ammoniac et du méthanol comme combustibles alternatifs sera investiguée, avec une analyse approfondie de leurs impacts sur les performances et les émissions des moteurs dual fuel.
• **Optimisation via méta-modélisation :** Des méta-modèles seront créés pour optimiser les paramètres de fonctionnement des moteurs dual fuel utilisant des outils mathématiques et statistiques. De plus, des processus d'optimisation multi-objectifs permettront d'identifier les configurations optimales.

4 Contributions attendues

Cette thèse vise à apporter plusieurs contributions significatives à la compréhension, la modélisation et à l'optimisation du fonctionnement des moteurs à combustion interne. Les contributions attendues comprennent plusieurs investigations traitant le moteur dual fuel en termes de modélisation de combustion et des différentes limitations du moteur ainsi que l'exploration de différents carburants alternatifs. Ces contributions sont essentielles pour répondre aux défis environnementaux et énergétiques actuels et futurs via les questions de recherche (QR) suivantes :
QR1 : Quelle sont les limites de la modélisation des moteurs à combustion interne fonctionnant en mode dual fuel, et à quel point les modèles 0D et les méta-modèles peuvent répondre au compromis entre le coût de calcul et la précision ?
QR2 : Quelle sont les limitations du fonctionnement dual fuel et comment les surmonter en traitant leurs causes ?
QR3 : Quelles sont les pistes d'amélioration du moteurs dual fuel adaptant le type de carbu-

rant utilisé et contrôlant les caractéristiques géométriques et opérationnelles du moteur via des modèles innovants ?

5 Plan du mémoire

Cette thèse se compose de cinq chapitres, comme l'indique la Figure 2, traitant différent type de modélisation (modélisation 0D, CFD, méta-modélisation) afin d'optimiser le fonctionnement des moteurs et de mettre en œuvre leurs limitations en termes de cliquetis et de surchauffe des injecteurs de carburant. Une étude de décarbonation est aussi investiguée en considérant différents types de carburants alternatifs. Les chapitres de cette thèse sont présentés ci-dessous.

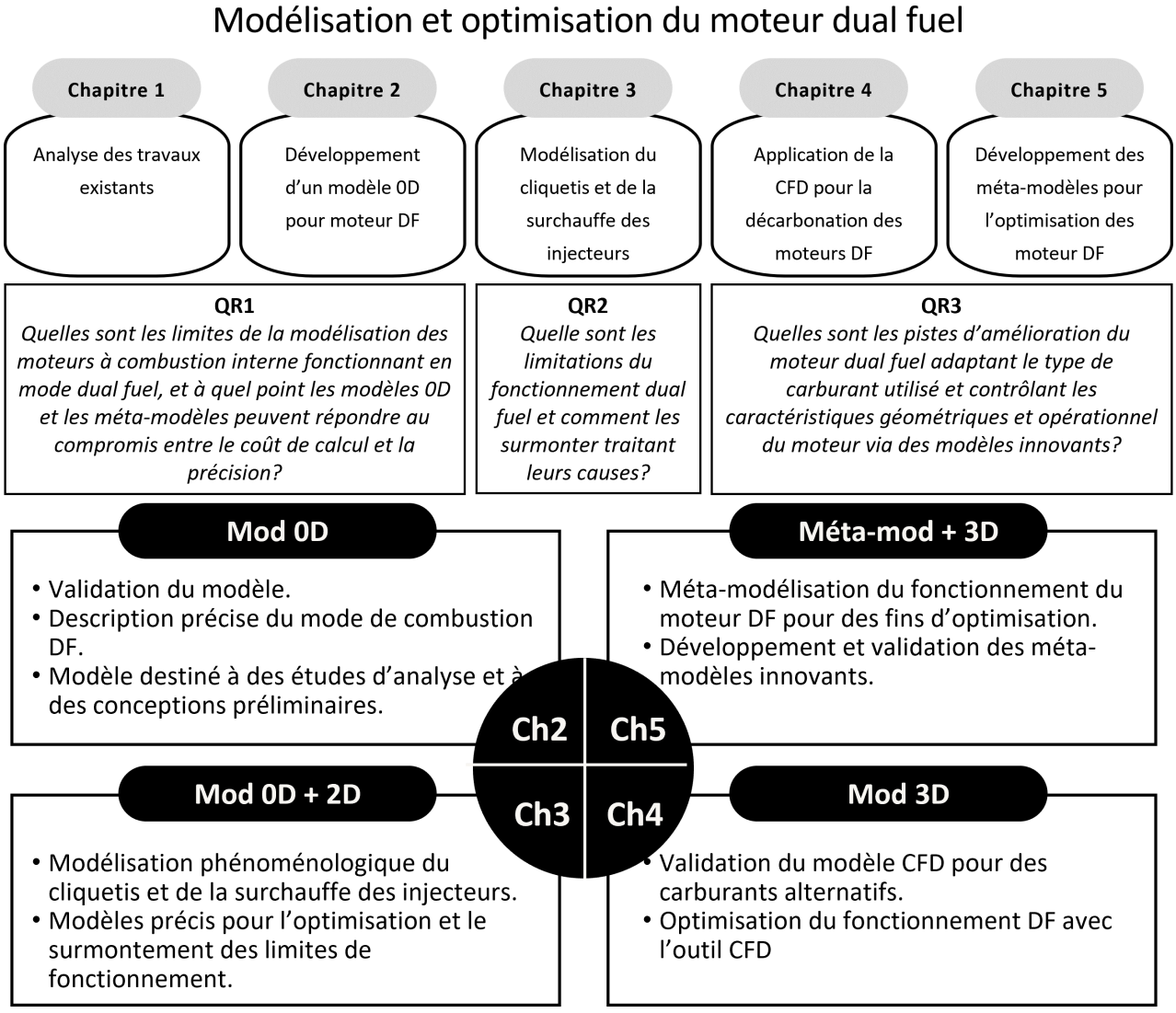


FIGURE 2 – Structure de la thèse.

- ***Chapitre 1 :***

Le premier chapitre s'adresse en particulier aux lecteurs pour les familiariser avec le fonctionnement des moteurs à allumage par compression fonctionnant en mode dual fuel. Par la

suite, les différents types de modélisation de ces moteurs sont présentés, donnant les principes, les applications, les avantages et les inconvénients de ces modèles ainsi qu'un résumé de la littérature pour une situation des principaux travaux qui sont développés utilisant les modèles en question. En se basant sur les caractéristiques et les propriétés de ces modèles, une comparaison est mise en œuvre prenant en considération : la prédiction, la précision et le coût de calcul de chaque type de modélisation.

- ***Chapitre 2 :***

Ce chapitre se concentre sur la modélisation 0D/quasi-D dans un moteur à combustion interne fonctionnant en mode dual fuel. Cette modélisation est primordiale vu qu'elle répond au compromis entre la maîtrise du temps de calcul et le niveau de prédiction acceptable, ce qui permettra d'explorer les différentes études sur le mode dual fuel avec un coût de calcul réduit.

L'objectif de ce chapitre est de développer un modèle de combustion adapté au moteur dual fuel hydrogène-gaz naturel (HGN)/gazole pour assurer des simulations 0D sur une large plage de charge et sous différentes compositions de mélanges gazeux. Ce modèle est basé sur la séparation des différentes phases de combustion dans ce mode, en traitant d'abord la combustion du carburant pilote par la modélisation du jet, puis la combustion du mélange gazeux (HGN) par un modèle mathématique basé sur une fonction Gaussienne. Cette séparation des phases est soigneusement combinée avec un traitement mathématique du taux de dégagement de chaleur, afin de déterminer les délais d'allumage pour les deux phases et de modéliser chacun de ces délais séparément. L'approche de modélisation dévoilée dans ce chapitre est basée sur un aspect phénoménologique, où la distinction entre la combustion du combustible pilote et celle du combustible primaire est assurée avec une séparation de phase permettant un suivi précis de la séquence de combustion avec la détection du début et de la fin de chaque phase et la contribution de chacune au taux de dégagement de chaleur global.

- ***Chapitre 3 :***

Ce chapitre repose sur la modélisation de deux problèmes majeurs qui se manifestent dans les moteurs à combustion interne fonctionnant en mode dual fuel.
Dans le but de remédier au problème de cliquetis en mode dual fuel, un nouveau modèle prédictif est mis en œuvre dans la première section pour la modélisation du cliquetis dans les moteurs dual fuel (HGN/gazole). Dans le but d'étudier la suppression du cliquetis, ce modèle est couplé avec un code de calcul CFD afin d'investiguer la technique d'injection directe d'eau dans la chambre de combustion en fonction de l'instant prédit pour le cliquetis.
Dans le but de maintenir un fonctionnement optimal et durable des injecteurs sous le mode de fonctionnement dual fuel, le suivi et la régulation de la température maximale dans cette composante est nécessaire. La deuxième section traite la modélisation de la température dans l'injecteur. L'approche mise en œuvre vise à surveiller cette température dans l'injecteur en fonction du cycle moteur et des conditions de fonctionnement en subdivisant l'injecteur en plusieurs

zones en fonction des conditions limites, en termes de température adiabatique de la paroi et de coefficient de transfert de chaleur. L'objectif final est de déterminer l'influence du mode dual fuel sur la température maximale, qui se manifeste au niveau du nez d'injecteur.

- ***Chapitre 4 :***

Ce chapitre aborde le sujet de la décarbonation des moteurs à combustion interne fonctionnant en mode dual fuel. Dans une première section, l'outil CFD Converge^{TM} est présenté en détaillant les différents modèles utilisés dans ce code pour reproduire les phénomènes physiques se déroulant dans le cylindre lors de la combustion. La deuxième section se concentre principalement sur l'exploration de l'utilisation de deux combustibles alternatifs, notamment l'ammoniac et le méthanol, comme carburant primaire dans des gros moteurs dual fuel. Pour cela les limites de ces alternatives sont exposées en mettant en œuvre des techniques d'optimisation pour les surmonter.

- ***Chapitre 5 :***

Ce chapitre se concentre sur le développement et la mise en œuvre des méta-modèles afin de les utiliser dans le cadre de l'optimisation des moteurs à combustion interne. Il porte principalement sur deux volets essentiels.

Le premier volet met en œuvre une technique de méta-modélisation combinée avec une approche d'optimisation multi-objectifs afin d'optimiser l'injection du carburant pilote émulsifié lors d'un fonctionnement dual fuel (HGN/gazole). Cette optimisation vise l'atténuation de cliquetis, la réduction de NO_x et la maximisation du rendement thermique. A l'aide de la technique présentée dans ce chapitre, la variation de ces fonctions objectives est modélisée en fonction de l'instant d'injection du carburant pilote et de la quantité d'eau portée par ce carburant.

Dans le but de répondre au compromis entre le coût de calcul et la précision, le deuxième volet traite l'axe de la modélisation multi-fidélité (MFM) qui est un domaine en pleine évolution jouant un rôle clé dans les problématiques d'ingénierie. Ce type de modélisation est présenté dans ce chapitre comme un outil alternatif afin de traiter les problèmes complexes où les modèles de basse-fidélité (BF) et les modèles de haute-fidélité (HF) sont bien adaptés pour obtenir de meilleures solutions avec un faible coût de calcul.
L'approche originale développée dans ce chapitre consiste à entraîner un modèle BF de manière itérative à l'aide d'un modèle HF, afin d'augmenter sa précision sans trop pénaliser le coût de calcul, en utilisant divers outils avancés de gestion de plan d'expérience, d'évaluation, de validation et d'apprentissage. Après la validation de l'approche en termes de précision et de robustesse, une application sur un cas d'ingénierie est mise en œuvre. Dans ce cadre, l'approche est utilisée dans le but d'optimiser le fonctionnement d'un moteur dual fuel en contrôlant différents paramètres d'entrée, notamment le taux de compression, l'instant d'injection du carburant pilote, et le taux de recirculation des gaz d'échappement.

Chapitre 1

État de l'art et revue bibliographique

Objectifs

Dans ce chapitre, une étude bibliographique exhaustive de l'état actuel des connaissances est entreprise. Pour commencer, de brèves généralités sur les moteurs diesel fonctionnant en mode dual fuel sont exposées. Ensuite, les différentes approches de modélisation sont détaillées en termes de principes, d'applications, de résultats majeurs, ainsi que de leurs avantages et inconvénients respectifs.

Introduction

La modélisation de la combustion dans les moteurs à combustion interne est un domaine de recherche important pour la conception et l'optimisation des moteurs. La compréhension approfondie des phénomènes physiques interagissant dans ces moteurs est essentielle pour améliorer le rendement, réduire la consommation de carburant et les émissions polluantes, et répondre aux exigences environnementales et réglementaires en constante évolution. La simulation numérique permet de prédire les performances du moteur et d'analyser les phénomènes complexes de combustion, avec des coûts et temps de développement plus intéressants que ceux des études expérimentales sur banc d'essais. Dans cette partie bibliographie, il sera passé en revue les travaux de la littérature portant sur la modélisation de la combustion dans les moteurs à combustion interne fonctionnant en mode dual fuel, en mettant l'accent sur les approches thermodynamique et dimensionnelle CFD. Il sera également discuté des défis et des opportunités pour l'amélioration de la fiabilité des modèles, ainsi que des applications potentielles de ces modèles pour la conception et l'optimisation des moteurs à combustion interne.

1 Généralités sur les moteurs diesel fonctionnant en mode dual fuel

Depuis l'avènement de l'ère industrielle, les moteurs à combustion interne ont été des piliers fondamentaux propulsant notre monde moderne. Parmi ceux-ci, le moteur diesel conventionnel a longtemps régné en maître, offrant un rendement et une fiabilité intéressants dans une gamme diversifiée d'applications, allant des transports commerciaux aux équipements industriels.
Cependant, les préoccupations environnementales et les impératifs de durabilité ont gagné en importance, les chercheurs se sont tournés vers des alternatives novatrices pour répondre aux défis imposés par les émissions de gaz à effet de serre et la raréfaction des ressources fossiles. C'est dans ce contexte que le concept révolutionnaire du moteur dual fuel est apparu, offrant une voie prometteuse vers une propulsion plus propre et plus efficace.

1.1 Principe de fonctionnement

Les moteurs diesel adaptés au fonctionnement dual fuel constituent une avancée majeure dans le domaine de la propulsion automobile et industrielle. Ils sont conçus pour fonctionner avec deux types de carburants simultanément, offrant ainsi une flexibilité accrue en matière de choix de carburants. Ce concept repose sur l'utilisation de deux carburants ayant des propriétés de réactivité distinctes dans le processus de combustion interne. Typiquement, ces carburants sont :
(i) Gaz, caractérisé par une valeur énergétique importante et une résistance à l'auto-inflammation élevée (indice d'octane important), ce qui le rend idéal pour un moteur à allumage commandé afin d'éliminer les risques d'auto-inflammation indésirable qui pourraient affecter le fonctionnement du moteur.
(ii) Gazole, présentant une bonne tendance à l'auto-inflammation (indice de cétane élevé), ce

qui le rend idéal pour un moteur à allumage par compression.
En combinant ces deux carburants, le moteur dual fuel peut être considéré comme une hybridation entre un moteur à allumage commandé et un moteur à allumage par compression.

Le processus de combustion dans un tel moteur se déroule comme suit : lors de la phase d'admission, un mélange M_1, constitué de combustible gazeux (carburant primaire) et de l'air, est introduit dans le cylindre.
À proximité du point mort haut (PMH), un carburant pilote ayant un indice de cétane élevé (souvent du gazole) est injecté. Ce carburant s'évapore et se disperse à travers le mélange homogène M_1 pour former localement un mélange M_2 fortement stratifié en composition et réactivité, comme illustré dans la Figure 1.1. La forte réactivité du carburant pilote génère des noyaux d'auto-inflammation à travers la chambre, entraînant ainsi un allumage dispersé. La combustion se propage des zones les plus réactives vers les moins réactives. La charge prémélangée fournit la majeure partie du travail moteur, tandis que le carburant pilote représente généralement environ 10% à 30% de l'énergie primaire fournie au moteur [1].

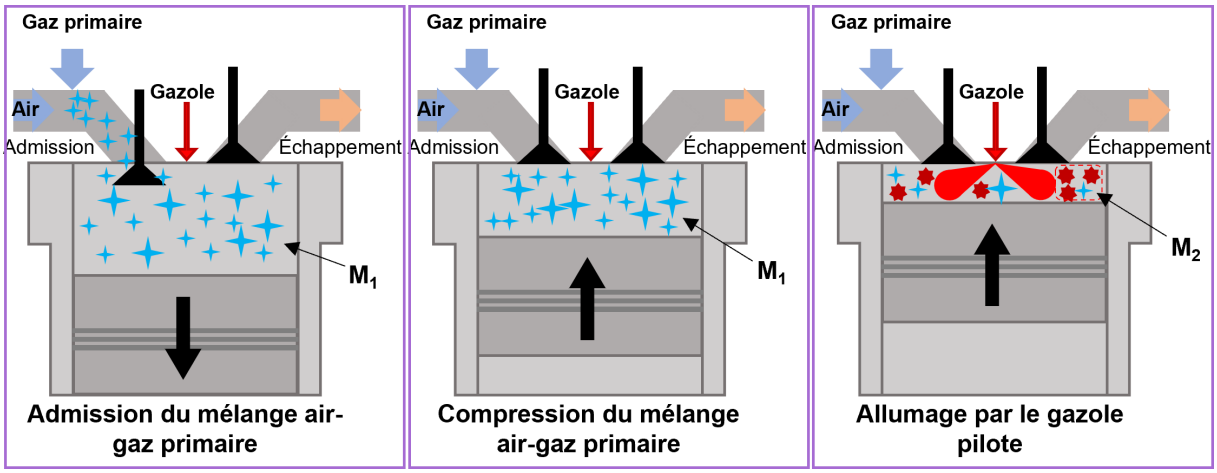


FIGURE 1.1 – Principe de fonctionnement du moteur dual fuel.

1.2 Combustion et taux de dégagement de chaleur

Le diagramme typique propre au taux de dégagement de chaleur pour un moteur diesel conventionnel à injection directe, illustré par la Figure 1.2, présente les étapes du processus global de la combustion du gazole, définies par : le délai d'auto-inflammation, la phase de combustion prémélangée ou rapide, la phase de combustion de diffusion, et la phase de combustion tardive.

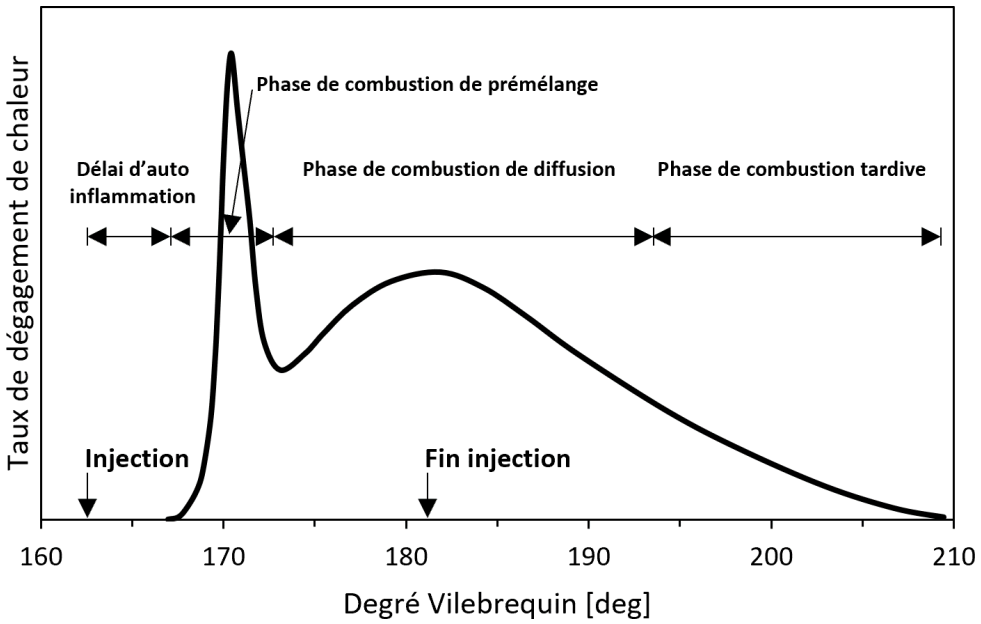


FIGURE 1.2 – Étapes de combustion typique dans le moteur diesel. (La figure est reproduite de [2] avec la permission de McGraw-Hill LLC).

Dans le contexte des moteurs dual fuel, le processus de combustion se décompose en cinq étapes distinctes [3], chacune joue un rôle crucial dans le fonctionnement global du moteur :

• **Délai d'allumage du combustible pilote :** Contrairement au fonctionnement conventionnel des moteurs diesel, le délai d'auto-inflammation du combustible pilote dans les moteurs dual fuel est notablement prolongé. Cette extension découle principalement de la substitution partielle de l'air par le carburant gazeux, entraînant une réduction de la concentration en oxygène dans le mélange. En conséquence, la pression augmente de manière modérée.

• **Combustion pré-mélangée du pilote :** Cette phase implique la combustion pré-mélangée du combustible pilote. Pendant cette période, une augmentation de pression modérée se poursuit jusqu'à ce que la combustion du gaz est initiée.

• **Délai d'allumage du carburant primaire :** À la suite de la combustion du combustible pilote, survient le délai d'allumage du carburant primaire. Cette étape est marquée par une montée en pression progressive, bien que la combustion effective du carburant primaire ne soit pas encore survenue.

• **Combustion rapide du carburant primaire :** Une fois que le carburant primaire s'allume, la combustion rapide s'ensuit, caractérisée par une propagation de flamme initiée par l'allumage spontané du carburant pilote. Cette phase de combustion est souvent instable mais ne pose généralement pas de problèmes majeurs de fonctionnement, car elle se produit dans un volume de cylindre croissant.

• **Étape de combustion par diffusion :** Enfin, la combustion par diffusion se poursuit à la fin de la montée rapide de la pression et s'étend bien dans la course de détente. Cette prolongation est attribuable à la vitesse de combustion plus lente du carburant gazeux et à la présence de

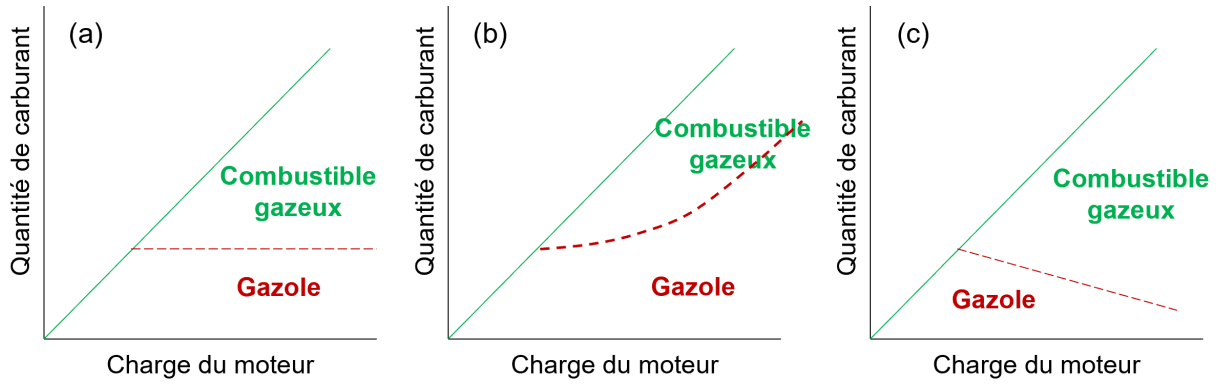
diluants provenant du combustible pilote, ce qui contribue à stabiliser le processus de combustion.

La combustion dans un moteur dual fuel dépend fortement de la manière dont le carburant gazeux est introduit et distribué dans le cylindre. Les méthodes d'alimentation en carburant gazeux pour ces moteurs varient largement en conception et en fonctionnement. Il est important que l'admission du carburant gazeux dans le cylindre du moteur et son mélange avec l'air produisent un mélange suffisamment homogène au moment de l'injection pilote, ce qui peut être délicat à assurer.
Plusieurs méthodes ont été utilisées pour l'introduction de gaz dans les moteurs dual fuel, telles que la carburation, l'injection dans le collecteur d'admission (injection continue dans le collecteur), l'injection dans le conduit d'admission (injection contrôlée dans le collecteur) et l'injection directe dans la chambre de combustion. La stratégie de base pour introduire les carburants gazeux dans le cylindre est souvent décrite comme une fumigation. Elle consiste à introduire le carburant gazeux dans le collecteur d'admission du moteur, avec une pression d'alimentation relativement basse pour se mélanger avec l'air frais d'admission, indépendamment de l'action des soupapes [4].

Une autre stratégie d'injection de carburant gazeux consiste en l'admission contrôlée du gaz à haute pression via un injecteur placé dans le collecteur d'admission du moteur, en amont de la soupape d'admission [5]. Ces méthodes offrent des améliorations des performances du moteur et permettent d'économiser du carburant gazeux, puisque la quantité et le moment d'injection du carburant pilote et gazeux peuvent être réglés selon les conditions de fonctionnement.
L'injection contrôlée du carburant gazeux, plutôt que sa fumigation, est une méthode efficace pour une meilleure introduction du carburant qui réduit le taux de combustible non brûlé parmi les gaz d'échappement. Elle est censée améliorer le rendement global du moteur et réduire les émissions polluantes, notamment lors du fonctionnement aux faibles charges. Cette injection est généralement effectuée juste avant la fermeture de la soupape d'admission pour assurer une stratification adéquate du mélange [6].

Les moteurs dual fuel présentent une puissance et un rendement suffisamment élevé, ainsi qu'un dégagement de chaleur plus faible, tout en étant capables de fonctionner avec différents types de combustibles gazeux. Le fonctionnement de tels moteurs, dépendant largement de la quantité de carburant gazeux utilisée par rapport à celle du carburant gazole liquide. La stratégie la plus courante et la plus simple consiste à n'injecter qu'une quantité pilote relativement faible du gazole liquide à un taux fixe sur l'ensemble des plages de charge et de vitesse. Il s'agit principalement d'assurer l'initiation de l'allumage programmé du contenu du cylindre, généralement constitué de mélanges gazeux air-carburant pauvres, comme montré schématiquement dans la Figure 1.3-a. L'essentiel de l'énergie libérée provient alors de plus en plus de la combustion du carburant gazeux.
Une autre catégorie peut être considérée en complétant les apports variables de carburant liquide d'un moteur diesel pleinement opérationnel, à moyenne et forte charge, par un ajout croissant

de carburant gazeux dans l'air admis au cylindre, comme illustré dans la Figure 1.3-b.
Toutefois, il serait plus intéressant de faire varier de manière optimale la quantité de carburant liquide par rapport à celle du carburant gazeux et ses taux d'approvisionnement en fonction des conditions de fonctionnement et du type de carburant utilisé. En général, il n'est pas nécessaire de maintenir des pilotes relativement importants avec l'augmentation de la charge du moteur (Figure 1.3-c). De cette manière, il devient possible d'obtenir des performances supérieures sur l'ensemble des plages de charge et de vitesse. Cette forme d'approche peut ne pas être incorporée dans certaines installations de moteurs dual fuel, principalement en raison de la complexité relativement exigeante de son contrôle.



Variations de la quantité de combustible gazeux par rapport à une quantité constante de combustible pilote

L'ajout de combustible pilote en fonction de l'augmentation de la quantité de combustible gazeux

Variation de la quantité de combustible pilote en fonction de la charge

FIGURE 1.3 – Différents modes opérationnels du moteur dual fuel. (La figure est reproduite de [7] avec la permission de Taylor and Francis Group LLC).

Les travaux de recherche réalisés expérimentalement ont mis en lumière l'importance de la pression dans le cylindre et du taux de dégagement de chaleur pour comprendre la dynamique de combustion dans les moteurs à combustion interne. Papagiannakis et al. [8] ont réalisé une étude sur l'impact des proportions de gaz naturel sur la combustion dans les moteurs dual fuel, mettant en évidence une réduction notable de la pression maximale dans le cylindre par rapport à celle du fonctionnement diesel conventionnel, sous différentes conditions de charge et de vitesse.
La spécificité de la combustion en mode dual fuel est mise en évidence par la présence de deux pics distincts dans l'évolution du taux de dégagement de chaleur. Le premier pic correspond à la combustion prémélangée du combustible pilote, tandis que le second pic représente la combustion du mélange air-gaz, créant un profil de combustion unique pour le mode dual fuel [9].

Le dégagement de chaleur des moteurs dual fuel, souvent considéré comme une hybridation de la combustion à allumage par compression et à allumage commandé, comprend généralement quatre composantes clés comme le montre la courbe dans la Figure 1.4 propre à un mode de combustion dual fuel méthane/gazole :

1• **Combustion du gazole pilote :** Cela implique l'allumage et la combustion du gazole, qui sert de pilote pour le processus de combustion global. Le gazole pilote s'enflamme en premier sous l'effet de la compression, initiant ainsi le processus de combustion.

2• **Combustion du méthane dans la région du pilote pré-mélangé :** Dans cette région, le mélange air-méthane est allumé et brûlé dans plusieurs sites de combustion proche du jet du combustible pilote injecté.

3• **Propagation de la flamme à travers le mélange air-méthane :** Après l'allumage, le front de flamme se propage à travers le mélange pré-mélangé air-méthane, conduisant à la combustion de l'ensemble de la charge dans la chambre de combustion.

4• **Possibilité d'allumage en masse du gaz :** En plus des composants susmentionnés, il peut y avoir une quatrième contribution à la libération de chaleur, qui est l'allumage en masse dans la région du gaz loin de l'injecteur, c'est-à-dire près des parois latérales du cylindre. Cela fait référence à l'allumage et à la combustion de tout le mélange air-carburant non brûlé restant au niveau de l'extrémité de la chambre de combustion, qui peut se produire en raison de températures et de pressions élevées.

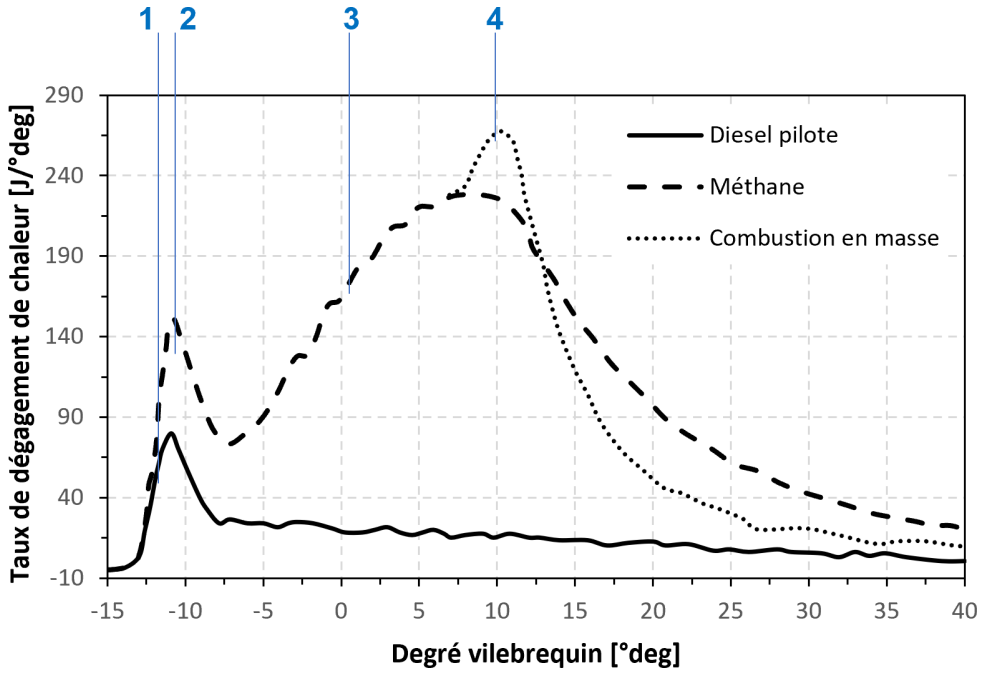


FIGURE 1.4 – Courbe schématique pour les contributions possibles au dégagement de chaleur en mode dual fuel. (La figure est reproduite de [10] avec la permission de SAGE Publications Ltd. Journals).

La quatrième étape dépend directement de la nature du gaz utilisé comme combustible primaire. Dans le cas d'un gaz fortement réactif, cette étape est pratiquement absente. En revanche, pour un gaz présentant une faible réactivité, cette étape est clairement distinguée des autres. En d'autres termes, la capacité du gaz à s'enflammer et à brûler rapidement influence directement la nécessité ou non de cette étape dans le processus global de combustion.

La pression maximale dans le cylindre varie en fonction de la charge dans les moteurs dual fuel. À pleine charge, il a été observé que la pression maximale à l'intérieur du cylindre est la plus élevée par rapport au fonctionnement à d'autres charges. Cette constatation met en évidence une augmentation significative de la pression maximale lorsque le moteur dual fuel fonctionne à pleine charge [11]. Par conséquent, la pression maximale dans le cylindre dépend directement du niveau de charge du moteur lorsqu'il opère en mode dual fuel.
L'impact de la pression maximale dans le cylindre sur le rendement des moteurs dual fuel est significatif. Une pression maximale plus élevée à l'intérieur du cylindre peut améliorer le rendement du moteur dual fuel, qui se traduit par une meilleure conversion de l'énergie thermique en énergie mécanique [12].

La comparaison de la combustion en mode diesel conventionnel avec le mode dual fuel a été réalisée par plusieurs chercheurs. En plus des travaux de Papagiannakis et al. [8], d'autres études ont également apporté des éclairages intéressant sur ce sujet.
Les travaux de Zhao et al. [13] ont souligné la réduction significative de la pression maximale dans le cylindre lors du fonctionnement en mode dual fuel, en mettant en évidence l'amélioration de la combustion du carburant gazeux. Des résultats similaires ont été remarqués par Pedrozo et al. [14], qui ont confirmé la réduction de la pression dans le cylindre, surtout à moyenne et à forte charge.
Par ailleurs, les conclusions de Lee et al. [15] ont soulevé une tendance inversée, avec des pressions plus importantes en mode dual fuel, en particulier aux fortes charges. Cette constatation a été attribuée à l'amélioration de la distribution de la charge et à la stabilité de la combustion. De plus, les recherches de Tarot [16] se sont concentrées sur l'analyse des aspects thermodynamiques de la combustion dans les moteurs dual fuel, mettant en évidence l'augmentation du taux de dégagement de chaleur lors de l'utilisation de fortes proportions de carburant gazeux. Ces résultats ont été confirmés par plusieurs travaux [17], qui ont également souligné la réduction des émissions polluantes.

1.3 Turbulence dans le cylindre

La turbulence est un phénomène complexe qui se produit dans le cylindre d'un moteur à combustion interne pendant tout le cycle du moteur. Cela est réalisé généralement lorsque le piston comprime le mélange air-carburant dans le cylindre. La turbulence est cruciale pour assurer une combustion stable et régulière, car elle joue un rôle essentiel dans l'amélioration de la vitesse de propagation de la flamme, ce qui a un impact positif sur le rendement de la combustion. Sans turbulence adéquate, la combustion peut être irrégulière et entraîne des problèmes tels que des ratés d'allumage, une consommation excessive de carburant et une production accrue de polluants. Dans les moteurs à combustion interne, le phénomène de la turbulence est contrôlé principalement par trois facteurs essentiels qui sont définis comme suit :

- **Swirl :** Il est généralement défini comme étant la rotation du mélange à l'intérieure de la

chambre de combustion autour de l'axe de révolution du cylindre (Figure 1.5-a). Ceci est dû à l'admission de flux avec un moment cinétique initial. Ce mouvement rotationnel s'amplifie davantage principalement dans la phase de compression surtout dans certains cas où le bol du piston est conçu pour favoriser ce phénomène. Le Swirl est adopté généralement dans les moteurs diesel pour améliorer la qualité du mélange dans la chambre de combustion entre l'air admis et le carburant injecté directement avant la fin de course du piston lors de la compression.

• **Tumble :** C'est un mouvement de rotation du mélange du fluide frais par rapport au plan longitudinal du cylindre (Figure 1.5-b). Il se produit à cause de l'impact du fluide avec la tête du piston. Ce mouvement a un effet négatif sur l'efficacité volumétrique des conduites, mais il améliore considérablement la qualité de la combustion.

• **Squish :** C'est un mouvement qui se produit vers la fin de la course de compression lorsqu'une partie de la face du piston et de la culasse se rapprochent étroitement. C'est un mouvement de gaz radial vers l'intérieur (Figure 1.5-c). Ce phénomène est affecté fortement par la forme du bol de piston, le taux de compression, la cinétique du piston, et les forces de frottement qui se génèrent dans la chambre de combustion surtout à la fin de la compression.

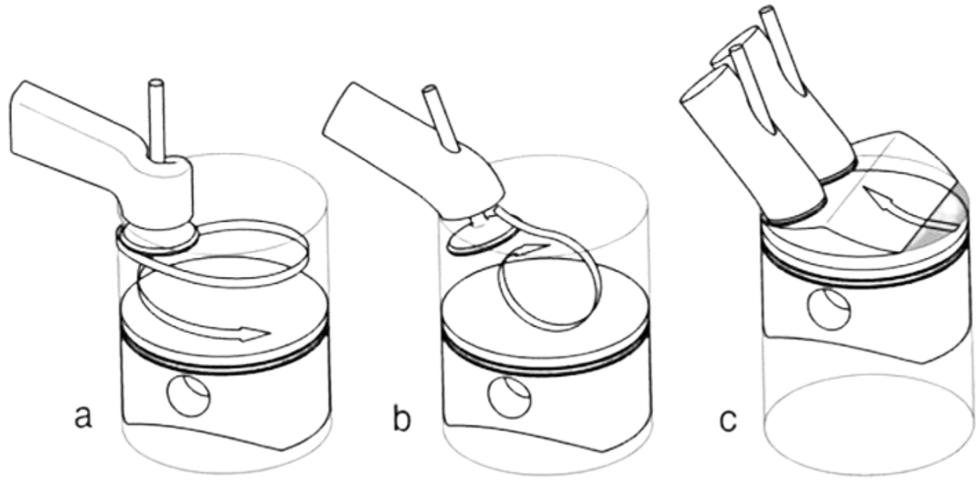


FIGURE 1.5 – Phénomènes de turbulence dans la chambre de combustion. (La figure est reproduite de [18] avec la permission de Springer Nature BV).

1.4 Émissions polluantes

Les émissions polluantes des moteurs dual fuel représentent un axe de recherche complexe où une multitude de facteurs interagissent pour influencer la composition des gaz d'échappement. Contrairement aux moteurs à allumage commandé ou par compression, les émissions des moteurs dual fuel sont soumises à plusieurs variables. L'entrelacs complexe des facteurs dictant les émissions des moteurs dual fuel est présenté ci-dessous, englobant la composition du carburant, les paramètres du moteur et la dynamique de combustion.

• **Composition du carburant et dynamique d'injection :**

Le choix et la composition du carburant gazeux a un effet considérable sur la formation des

émissions polluantes. Des facteurs tels que le type de carburant, sa composition, la méthode d'injection et les conditions ambiantes façonnent de manière complexe les caractéristiques des émissions. Parallèlement, les propriétés du carburant pilote, notamment l'avance à l'injection et la pression, exercent une influence substantielle sur les caractéristiques des émissions [19].

• **Paramètres du moteur et dynamique de combustion :**

Les paramètres spécifiques au moteur, tels que la taille, la géométrie, la plage de vitesse, le taux de compression et la suralimentation, modulent de manière complexe les émissions.
La dynamique de combustion, influencée par des facteurs tels que la température de l'air, la pression et les processus de mélange, affecte considérablement les profils d'émissions [20].

• **Constituants des gaz d'échappement :**

Les gaz d'échappement des moteurs dual fuel sont principalement composés d'hydrocarbures non brûlés, de monoxyde de carbone, de dioxyde de carbone, d'oxydes d'azote et de particules [21], comme il est détaillé ci-dessous :

- Hydrocarbures non brûlés et leur impact environnemental : Les Hydrocarbures, issues du carburant non brûlé, ont un impact significatif sur la qualité environnementale. Bien moins significatives pour le smog photochimique, ces émissions nécessitent des mesures de contrôle rigoureuses en raison de leur puissant effet de serre [22]. L'efficacité des méthodes d'oxydation catalytique pour atténuer ces émissions est limitée, exigeant des approches spécialisées pour un contrôle efficace.
Les hydrocarbures non brûlés sont produits lorsque le carburant gazeux n'est pas complètement brûlé dans le moteur dual fuel. Ces hydrocarbures peuvent réagir avec d'autres composés dans l'air pour former des polluants tels que l'ozone et les particules fines.

- Monoxyde de carbone et oxydes d'azote : Les émissions de monoxyde de carbone, influencées par les conditions de combustion et les caractéristiques du carburant pilote, soulignent l'importance de l'optimisation des paramètres de combustion pour une oxydation efficace. Elles sont formées lorsque le carburant est partiellement brûlé et qu'il y a un manque d'oxygène dans le système.
La production d'oxydes d'azote, associée principalement aux zones de combustion à haute température, est influencée par la quantité du carburant pilote, la richersse du mélange et la durée de combustion [23]. Les oxydes d'azote sont formés généralement lorsque l'azote et l'oxygène de l'air réagissent à des températures élevées, et sont principalement émis pendant la combustion du carburant dans le moteur. Les oxydes d'azote comprennent l'oxyde nitrique (NO) et le dioxyde d'azote (NO_2). Les oxydes d'azote peuvent également réagir avec d'autres composés dans l'air pour former des particules fines, qui représentent une autre source de pollution atmosphérique.

- Émissions de particules et réduction de la fumée : Les moteurs dual fuel présentent des émissions de particules réduites par rapport aux moteurs diesel, attribuées à la prévalence de la combustion pauvre en mélange. Cependant, des mesures de contrôle restent vitales, surtout

lors des opérations transitoires. Les efforts pour minimiser l'injection du gazole et utiliser des méthodes de post-traitement devront contribuer efficacement à l'atténuation des émissions de particules [23].

- Émissions d'aldéhydes et de composés sulfurés : Les émissions d'aldéhydes, principalement de formaldéhyde, sont minimes dans les moteurs dual fuel mais varient avec le type de carburant et la méthode d'injection. Les composés sulfurés, néfastes pour la santé et l'environnement, sont pratiquement éliminés des gaz d'échappement des moteurs dual fuel, grâce à des processus de purification des carburants [24].

1.5 Valorisation des combustibles gazeux dans les moteurs dual fuel

Les moteurs dual fuel ont gagné en popularité en raison de leur capacité à utiliser deux types de carburants, généralement un combustible liquide tel que le gazole, et un combustible gazeux tels que le biogaz, le biométhane, l'hydrogène (H_2), ou l'ammoniac (NH_3). L'utilisation de bio-combustibles dans ces moteurs offre des perspectives prometteuses pour la réduction des émissions de gaz à effet de serre et la dépendance aux combustibles fossiles, comme présenté ci-dessous selon le carburant utilisé :

• **Hydrogène (H_2) :** L'hydrogène est considéré comme l'un des carburants les plus prometteurs pour la décarbonation du secteur des transports. Les études montrent que l'utilisation de l'hydrogène dans les moteurs dual fuel peut réduire significativement les émissions de CO_2 et de polluants atmosphériques [25]. Une étude menée par Muralidhara et al. [26] a confirmé que l'injection d'hydrogène dans un moteur dual fuel peut réduire les émissions de CO_2 de plus de 50%. Cependant, des défis persistent, notamment en termes de stockage et de distribution de l'hydrogène, ainsi que la nécessité de développer des moteurs plus efficaces pour maximiser l'utilisation de ce combustible.

• **Biogaz :** Le biogaz, produit à partir de la transformation anaérobique de déchets végétaux ou animales, est une source d'énergie renouvelable prometteuse pour les moteurs dual fuel. Les études ont montré que l'utilisation de biogaz peut réduire les émissions de gaz à effet de serre et contribuer à la gestion des déchets organiques [27]. La recherche de Verma et al. [28] a examiné l'impact de l'utilisation de biogaz dans les moteurs dual fuel sur les émissions de particules et d'oxydes d'azote (NO_x), démontrant des réductions significatives par rapport aux carburants conventionnels. Cependant, la disponibilité limitée de biogaz et les défis liés au stockage et à la purification restent des obstacles à surmonter.

• **Ammoniac (NH_3) :** L'ammoniac est un autre combustible potentiel pour les moteurs dual fuel en raison de l'absence de la molécule carbone dans sa composition et de sa capacité à réduire les émissions polluantes. Des recherches récentes ont exploré l'utilisation de l'ammoniac dans les moteurs dual fuel, en mettant en évidence ses avantages en termes de réduction des émissions de CO_2 et de polluants. Une étude réalisée par Nadimi al. [29] a évalué l'efficacité de l'ammoniac

comme combustible dans les moteurs dual fuel, montrant des réductions significatives des émissions de NO_x par rapport au mode gazole conventionnel. Cependant, des contraintes subsistent concernant la faible réactivité de l'ammoniac et son impact sur les systèmes de post-traitement des gaz d'échappement.

• **Gaz de synthèse (Syngas) :** Le gaz de synthèse, ou syngas, est un mélange gazeux composé principalement d'hydrogène (H_2) et de monoxyde de carbone (CO), produit par la gazéification de la biomasse. Ce combustible peut être utilisé dans les moteurs dual fuel pour réduire les émissions de CO_2 et de polluants atmosphériques. Des études [30] ont montré que l'utilisation du syngas dans les moteurs dual fuel peut offrir des avantages similaires à ceux du biogaz, notamment la réduction significative des émissions polluantes. Cependant, des verrous persistent en termes de purification du syngas pour garantir sa qualité et sa compatibilité avec les moteurs, ainsi que des considérations économiques liées à sa production à grande échelle.

• **Biométhane :** Le biométhane est un gaz naturel renouvelable produit par le traitement du biogaz pour éliminer les impuretés et augmenter sa teneur en méthane. Contrairement au biogaz brut, le biométhane présente des caractéristiques similaires au gaz naturel et peut être injecté dans les réseaux de gaz naturel existants ou utilisé comme carburant dans les moteurs dual fuel. Des recherches [31] ont montré que l'utilisation du biométhane dans les moteurs dual fuel peut offrir des performances comparables voire supérieures à celles des carburants fossiles, tout en réduisant les émissions polluantes et en favorisant la valorisation des déchets organiques. Cependant, des considérations telles que la disponibilité de la matière première, les coûts de production et la logistique de distribution doivent être prises en compte pour assurer la viabilité à long terme de cette technologie.

1.6 Avantages et limitations de la combustion dual fuel

La combustion dual fuel, une méthode novatrice dans le domaine de l'ingénierie des moteurs, présente un ensemble d'avantages significatifs, mais aussi des limitations qu'il convient de prendre en compte lors de sa mise en œuvre.

1.6.1 Avantages du moteur dual fuel

Le moteur dual fuel est caractérisé par des avantages innombrables. Les plus pertinents sont présentés ci-dessous :

- **Réduction des émissions polluantes :** L'adoption de la combustion dual fuel dans les moteurs a démontré une capacité notable à réduire les émissions de polluants atmosphériques tels que les oxydes d'azote (NO_x), les particules fines (PM) et les gaz à effet de serre (GES) comme le dioxyde de carbone (CO_2). Les études de référence, telles que celles menées par Mustafi et al. [32], ont confirmé ces réductions significatives, ce qui en fait une option attrayante pour répondre aux normes environnementales de plus en plus strictes.

- **Flexibilité opérationnelle :** Une caractéristique majeure de la combustion dual fuel est sa capacité à s'adapter à différents carburants. En utilisant une combinaison de gazole et de gaz naturel, par exemple, les moteurs peuvent fonctionner de manière plus flexible en ajustant la composition du mélange en fonction des conditions de fonctionnement. Cette flexibilité offre une adaptabilité précieuse pour diverses applications, comme en témoignent les recherches menées par Kozarac et al. [33].

- **Optimisation de l'efficacité énergétique :** Plusieurs études [34] ont montré que la combustion dual fuel peut améliorer l'efficacité énergétique des moteurs en permettant une combustion plus complète et contrôlée. En ajustant les proportions de carburants et en utilisant des techniques avancées de contrôle de la combustion, il est possible d'optimiser le processus de combustion pour obtenir des rendements plus élevés.

- **Diversification des sources d'énergie :** En combinant différents carburants, la combustion dual fuel offre une voie vers une plus grande diversification des sources d'énergie pour les moteurs. Cela réduit la dépendance à un seul type de carburant et ouvre la porte à l'utilisation de ressources énergétiques alternatives. Cette diversification est cruciale pour la résilience énergétique [35].

1.6.2 Limitations du moteur dual fuel

Plusieurs limitations du moteurs dual fuel sont présentées comme des défis pour les chercheurs dans le domaine des moteurs à combustion interne. Les plus importantes sont présentées ci-dessous :

- **Complexité de conception et de contrôle :** La mise en œuvre de la combustion dual fuel nécessite des systèmes de gestion de carburant complexes et des contrôles sophistiqués pour garantir un fonctionnement efficace et sûr. Les recherches de Boretti [35] ont mis en évidence les défis associés à la conception et au calibrage de ces systèmes, ce qui peut entraîner des coûts de développement et de maintenance plus élevés.

- **Sensibilité aux conditions de fonctionnement :** La performance de la combustion dual fuel peut être influencée par divers facteurs, tels que la charge du moteur, la vitesse de combustion et la température, qui peuvent pousser le moteur à des fonctionnements non adaptés souffrants du cliquetis par exemple (Figure 1.6). Des études [36] ont montré que ces facteurs peuvent présenter des performances variables dans différentes conditions de fonctionnement, ce qui nécessite une optimisation continue pour assurer une rendement maximal.

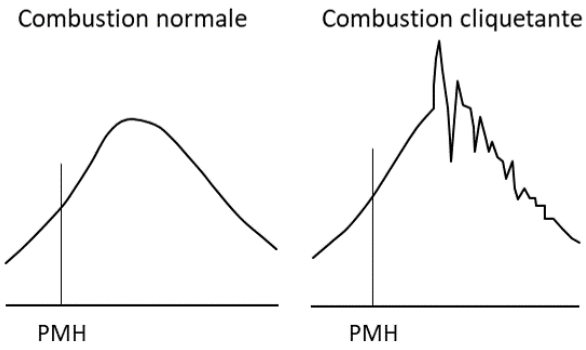


FIGURE 1.6 – Schématisation de la différence entre une combustion normale et une combustion cliquetante. (La figure est reproduite de [37] avec la permission de SAE International).

- **Émissions de gaz non brûlés :** Bien que la combustion dual fuel puisse réduire les émissions de certains polluants, elle peut également entraîner une augmentation des émissions de certains composés, tels que le méthane non brûlé dans certains cas notamment le cas des moteurs dual fuel gaz naturel/gazole. Des recherches ont identifié des défis liés à la combustion incomplète et à la formation de produits de combustion indésirables, ce qui nécessite une attention particulière pour minimiser ces effets indésirables [38].

- **Exigences en matière de carburant :** La performance de la combustion dual fuel est étroitement liée à la qualité et à la composition des carburants utilisés. Des études [39] ont montré que des variations dans la composition du gaz naturel, peuvent avoir un impact significatif sur les performances du moteur, ce qui soulève des défis en termes de gestion de la qualité du carburant et de standardisation des spécifications.

1.6.3 Pistes d'amélioration en cours de développement

Dans le but de surmonter les limitations actuelles et de renforcer encore les avantages liés à la combustion dual fuel, plusieurs pistes d'amélioration prometteuses sont actuellement explorées dans la littérature :

- **Optimisation du contrôle de la combustion :** Des recherches sont en cours pour développer des techniques de contrôle avancées qui permettent une gestion plus précise de la combustion dual fuel. Cela inclut l'utilisation de capteurs avancés, de systèmes de gestion électronique sophistiqués et de modèles de simulation plus précis pour ajuster en temps réel les paramètres de fonctionnement du moteur afin d'optimiser l'efficacité énergétique et de réduire les émissions [40].

- **Amélioration de la compatibilité des carburants :** Des efforts sont déployés pour rendre la combustion dual fuel plus adaptable à une gamme plus large de carburants, en particulier en ce qui concerne le gaz naturel. Cela comprend le développement de technologies de traitement du gaz naturel pour garantir une composition constante et optimale, ainsi que l'exploration de l'utilisation de biogaz et d'autres sources alternatives de gaz pour diversifier les options de carburant

en se basant sur l'optimisation des paramètres moteurs afin de garantir un bon fonctionnement [41].

- **Réduction des émissions de gaz non brûlés :** Des recherches sont menées pour minimiser les émissions de composés non brûlés, tels que le méthane, associés à la combustion dual fuel. Cela implique l'amélioration des systèmes d'injection de carburant, la conception de chambres de combustion plus efficaces et l'optimisation des stratégies de mélange pour favoriser une combustion plus complète et uniforme. Park et al. [42] ont combiné le mode de combustion dual fuel avec la technique de la recirculation des gaz d'échappement afin de réduire les hydrocarbures non brûlés spécialement à faible charge.

- **Intégration de technologies de post-traitement des émissions :** Pour répondre aux normes environnementales de plus en plus strictes, des solutions de post-traitement des émissions sont explorées pour compléter les avantages de la combustion dual fuel. Cela inclut l'intégration de systèmes de recirculation des gaz d'échappement, de filtres à particules et des catalyseurs pour réduire davantage les émissions de NO_x et de particules fines [43].

- **Développement de moteurs spécifiquement conçus pour la combustion dual fuel :** Certains chercheurs, comme Gulcan et al. [44], explorent la conception de moteurs spécifiquement optimisés pour la combustion dual fuel, intégrant des caractéristiques telles que des chambres de combustion adaptées, des systèmes d'injection de carburant innovants et des technologies de refroidissement avancées pour maximiser l'efficacité et la fiabilité du processus de combustion.

2 Modélisation thermodynamique 0D dans les moteurs à combustion interne

Les modèles de combustion dédiés aux moteurs à combustion interne peuvent être catégorisés en deux groupes principaux, comme l'indique la Figure 1.7 ; les modèles thermodynamiques et les modèles multidimensionnels présentés dans cette revue par les modèles CFD. Les modèles thermodynamiques se subdivisent eux-mêmes en trois sous-groupes ; les modèles monozones, les modèles à deux zones et les modèles multizones.

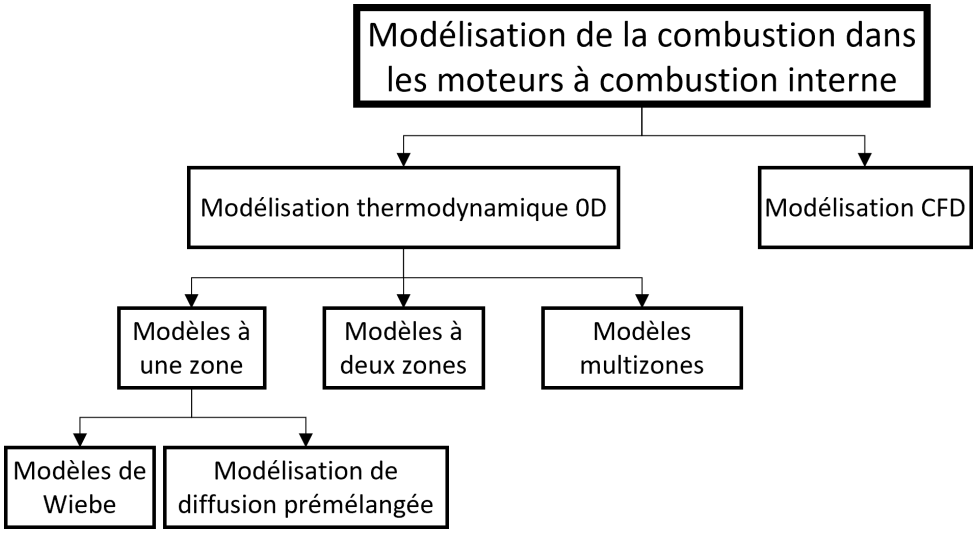


FIGURE 1.7 – Types de modélisation de la combustion dans les moteurs à combustion interne.

Pour caractériser l'état du mélange dans le cylindre, la pression P, la température T et la richesse ϕ pour un volume donné, sont pris en considération. Tout au long du processus de combustion, du carburant est injecté dans le cylindre pour augmenter l'énergie et la richesse de la charge. Il est important de noter que la modélisation de l'ajout de carburant ne correspond pas exactement au processus réel d'injection, mais simplement à une masse totale équivalente. Le carburant ajouté sera brûlé instantanément une fois il est dans le cylindre. Ceci signifie que l'effet des vapeurs de carburant non brûlé sur le délai d'auto-inflammation et la combustion en générale est négligé.
En considérant le cylindre comme étant le système étudié et en ignorant les fuites, la conservation de la masse appliquée au cylindre se traduit par l'équation 1.1.

$$\begin{cases} \frac{dm}{dt} = \dot{m}_{adm} + \dot{m}_F - \dot{m}_{ech} \\ m = \rho V \\ m = \frac{\rho r T}{P} \end{cases} \tag{1.1}$$

Où m est la masse contenue dans le cylindre, $\dot{m}_{adm}$ et $\dot{m}_{ech}$ les débits massiques instantanés à travers les soupapes d'admission et d'échappement, respectivement, $\dot{m}_F$ le taux d'injection de carburant, t le temps, V le volume du cylindre, P, ρ et T la pression, la masse volumique et la température du mélange, respectivement, et r est la constante du mélange considéré comme gaz parfait.
La première loi de la thermodynamique appliquée au mélange contenu dans le cylindre est décrite par l'expression suivante (équation 1.2) :

$$\frac{d}{dt}(mu) = -p\frac{dV}{dt} + \dot{q}_w + \sum h_j \dot{m}_j \tag{1.2}$$

Où u est l'énergie interne spécifique du mélange, $\dot{q}_w$ le taux de transfert de chaleur instantané dans le cylindre à travers les parois, et $\sum h_j \dot{m}_j$ représentent les flux d'enthalpie à travers les

soupapes d'admission et d'échappement ainsi que le flux d'enthalpie associé à l'injection de carburant.

Cette thèse s'intéresse principalement au dégagement de chaleur instantané dans le cylindre ($\dot{q}_w$). Pour cette raison, il sera focalisé principalement dans la suite de cette section sur les différents modèles existants pour la modélisation du dégagement de chaleur.

2.1 Modèles à une zone

Un modèle thermodynamique 0D à une zone est un modèle simplifié qui décrit les principales caractéristiques de l'écoulement interne durant un cycle moteur. Ce type de modèle ne prend pas en compte la géométrie complexe de la chambre de combustion ou la dynamique des fluides, mais se concentre plutôt sur les processus fondamentaux qui se produisent lors de la combustion. Un modèle 0D à une zone considère que la combustion se produit dans une seule zone homogène à l'intérieur du cylindre du moteur. Cette zone est souvent appelée la "zone de combustion" et elle est supposée avoir une composition homogène avec une température et une pression uniforme. Ce type de modélisation est relativement simple mais il peut être utilisé pour fournir des estimations rapides des performances du moteur.

2.1.1 Modèle de Wiebe

Le modèle de Wiebe repose sur une description purement mathématique pour simuler l'évolution de la fraction de carburant brûlé, ce qui peut également être assuré par différents types de lois à savoir ; la loi polynomiale, cosinus ou exponentiel. Ce type de modèle, défini par l'équation 1.3, est le plus couramment utilisé pour simuler la combustion dans les moteurs à allumage par compression [45]. Ce modèle décrit la combustion en utilisant une fonction de taux de combustion qui dépend de la pression et de la température dans la chambre de combustion. La fonction du taux de combustion est basée sur l'hypothèse que la combustion commence dans une petite zone de la chambre de combustion et se propage ensuite en formant une flamme.

$$\frac{dQ}{d\theta} = 6{,}9\frac{Q_p}{\theta_p}\left(M_p+1\right)\left(\frac{\theta}{\theta_p}\right)^{M_p}\exp\left[-6{,}9(\frac{\theta}{\theta_p})^{M_p+1}\right]+6{,}9\frac{Q_d}{\theta_d}\left(M_d+1\right)\left(\frac{\theta}{\theta_d}\right)^{M_d}\exp\left[-6{,}9(\frac{\theta}{\theta_d})^{M_d+1}\right] \tag{1.3}$$

Avec θ l'angle vilebrequin, p et d indices pour la combustion de prémélange et diffusive, respectivement, M_p et M_d facteurs de forme pour la phase de prémélange et diffusive, respectivement, θ_p et θ_d durées de la phase de prémélange et diffusive, respectivement, Q_p et Q_d caractérisent le taux de dégagement de chaleur dans la phase de prémélange et diffusive, respectivement.
Les valeurs typiques des paramètres de combustion de prémélange et diffusive sont illustrées dans la Figure 1.8.

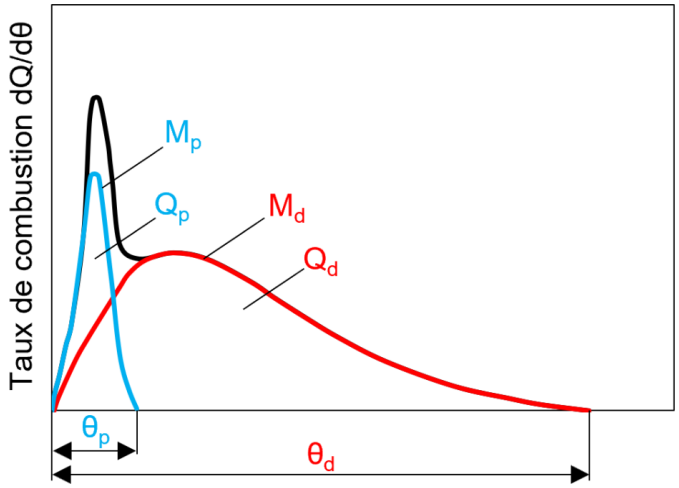


FIGURE 1.8 – Paramètres de Wiebe pour la combustion de prémélange et diffusive. (La figure est reproduite de [46] avec la permission de SAE International).

Miyamoto et al. [46] ont réalisé une étude sur deux moteurs de laboratoire (moteur à injection directe (ID) et moteur à injection indirecte (IDI)), pour une gamme donnée de vitesses, de charges, de délais d'injection, et de carburants (Figure 1.9). Les données sur le taux de combustion ont été dérivées et analysées à l'aide d'une approximation de la loi de Wiebe à deux fonctions.

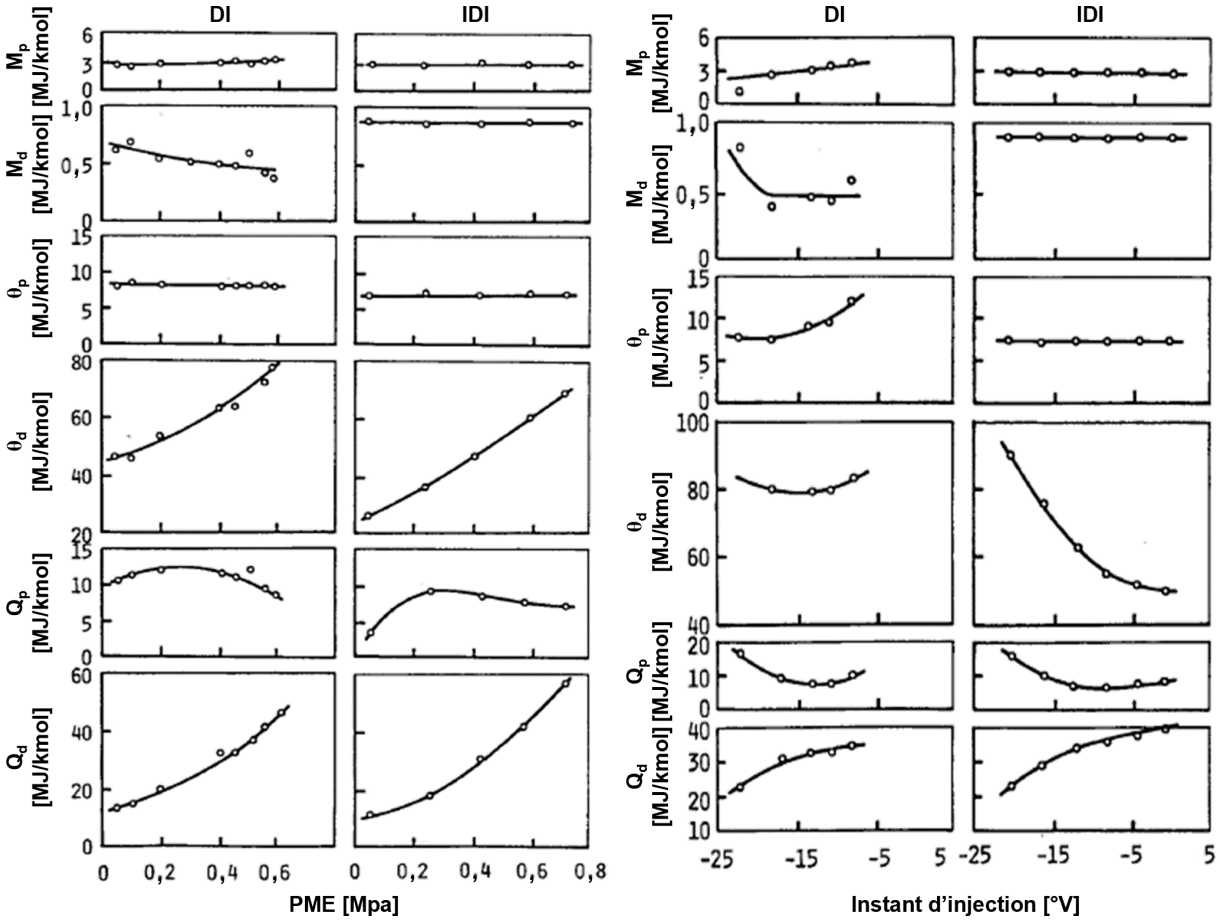


FIGURE 1.9 – Comparaison des six paramètres de la fonction de Wiebe pour les moteurs ID et IDI sous charge variable à gauche et différents calages d'injection à droite. Régime moteur, ID 2500 tr/min, IDI 1400 tr/min. (La figure est reproduite de [46] avec la permission de SAE International).

Selon la Figure 1.9, trois paramètres parmi les six de cette fonction de Wiebe sont constants pour une large gamme de conditions et que les trois autres peuvent être corrélés avec la quantité de carburant injecté pendant le délai d'allumage. D'après la même étude, le bruit du moteur, la fumée et le rendement thermique sont en corrélation avec les paramètres décrivant la quantité de combustion prémélangée et la durée de combustion par diffusion. Ces caractéristiques peuvent être optimisées en réduisant le taux de combustion dans la phase de prémélange tout en maintenant la durée de combustion par diffusion à moins de 60 °V.

Watson [47] a fait le couplage d'une modélisation empirique de Watson et al. [48] en tenant compte de la suralimentation du moteur, les frottements et l'injection, dans le but d'analyser un moteur diesel à injection directe pour essayer de trouver une corrélation pour les paramètres de la fonction de Wiebe selon les conditions de fonctionnement du moteur. Ceci a permis de construire des surfaces de réponse gouvernants le taux de dégagement de chaleur en fonction de conditions de fonctionnement (charge et vitesse de rotation), des caractéristiques géométriques et de la stratégies d'injection de carburant.

Tarabet et al. [49] ont utilisé une double fonction de Wiebe pour approximer le taux de dégagement de chaleur (TDC) dans un moteur diesel à aspiration naturelle alimenté avec des mélanges de gazole/biodiesel d'eucalyptus et fonctionnant à diverses charges de moteur. Cette corrélation est ajustée au taux de dégagement de chaleur expérimental dans diverses conditions de fonctionnement (nature du carburant et charge du moteur) en utilisant une régression des moindres carrés pour trouver les paramètres inconnus comme l'indique la Figure 1.10. L'objectif principal de cette étude est de proposer un modèle de prédiction des paramètres de la fonction de Wiebe pour des conditions de fonctionnement plus générales, et pas seulement celles testées expérimentalement.

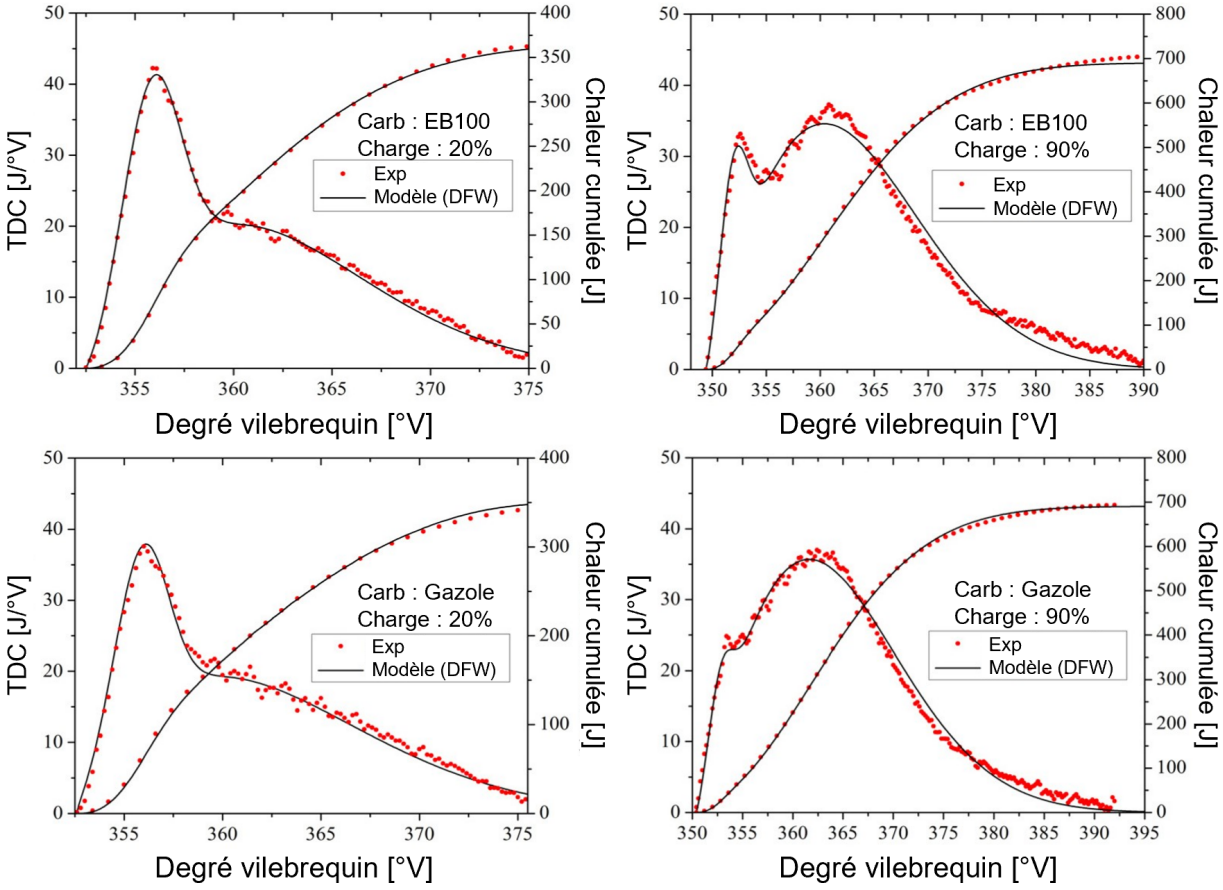


FIGURE 1.10 – Comparaison des résultats de la double fonction de Wiebe (DFW) avec des résultats expérimentaux. (La figure est reproduite de [49] avec la permission de SAE International).

Généralement les modèles basés sur la loi de Wiebe sont caractérisés par un faible niveau de prédictivité causé par la calibration systématique des paramètres de modèle selon le point de fonctionnement du moteur ce qui crée une forte dépendance entre le modèle et les résultats expérimentaux lors de la phase d'apprentissage. Mais il reste un type de modélisation intéressant avec un temps de calcul très réduit ce qu'il le classe comme un outil efficace pour la construction des cartographies embarquées sur les véhicules.

2.1.2 Modèles de diffusion prémélangée

Barba et al. [50] ont développé un modèle de combustion phénoménologique à une zone pour prédire le taux de dégagement de chaleur. Les principales parties du modèle sont le modèle de combustion prémélangée, le modèle de combustion diffusive et le modèle du délai d'auto-inflammation. La combustion prémélangée est décrite avec un modèle de propagation de flamme qui dépend de la richesse dans la zone prémélangée, dérivé d'un modèle de mélange. La combustion par diffusion est décrite comme étant contrôlée par un mélange combustible/air. Le modèle du délai d'auto-inflammation est basé sur la température moyenne de la masse. Le modèle peut prendre en considération le cas d'existence d'une injection précoce. Pour la modélisation de la combustion de prémélange, une schématisation de l'entraînement des gaz environnants dans le jet (Figure 1.11) est mise en œuvre. Selon cette dernière, il est possible de prendre en compte la compétition entre deux modes de combustion contrôlés, d'un côté, par la propagation d'un front de flamme (Figure 1.11-4) et de l'autre côté, par la diminution du carburant disponible dû à la multiplication des sites d'auto-inflammation dans la zone de prémélange, comme mentionné dans la Figure 1.11-5. Tandis que la phase de diffusion est définie par un type de modélisation phénoménologique qui repose sur deux paramètres caractéristiques à savoir la longueur et la vitesse du mélange comme le montre l'équation 1.4.

$$\frac{dm_F}{dt} = \frac{\sqrt{C_G C_m^2 + C_k k}}{\sqrt[3]{\frac{\phi V_{Cyl}}{n_N}}} m_F \tag{1.4}$$

Avec m_F masse de carburant, C_m la vitesse moyenne de piston, k la densité de l'énergie cinétique turbulente, ϕ la richesse, V_{Cyl} la cylindrée du moteur, n_N le nombre d'orifices de l'injecteur. Les deux paramètres C_G et C_k sont deux paramètres à calibrer.

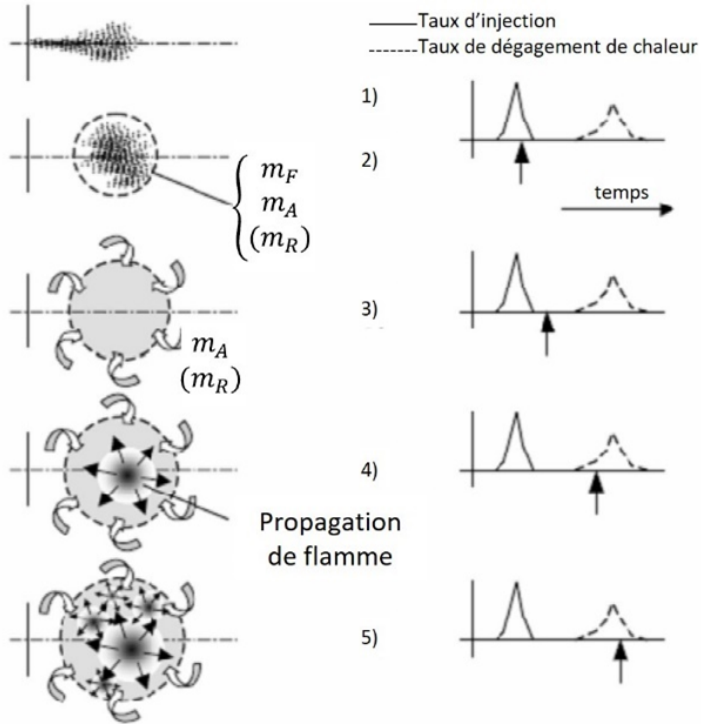


FIGURE 1.11 – Processus de combustion. (La figure est reproduite de [50] avec la permission de SAE International).

Chmela et Orthaber [51] ont développé un modèle 0D à une zone basé sur le concept de combustion contrôlée par mélange en évitant la description détaillée des processus de formation du mélange et d'oxydation du carburant. Dans ce modèle, le taux de dégagement de chaleur est contrôlé principalement par deux éléments, à savoir la masse de carburant instantanée présente dans la charge du cylindre et la densité locale d'énergie cinétique turbulente, selon l'équation 1.5. Les deux éléments sont dérivés du processus d'injection, la masse de carburant instantanée définie comme la différence entre le carburant injecté et celui brûlé, et l'énergie cinétique turbulente étant principalement produite par la quantité de mouvement des pulvérisations de carburant.

$$\begin{aligned} \frac{dQ}{d\theta} &= C_{Mod} f_1 f_2 \\ f_1 &= M_F - \frac{Q}{PCI} \\ f_2 &= \exp\left(C_R \frac{\sqrt{K}}{\sqrt[3]{V}}\right) \end{aligned} \tag{1.5}$$

Avec C_{Mod} est une constante du modèle, M_F la masse de carburant injectée, Q le taux de dégagement de chaleur cumulé, PCI le pouvoir calorifique inférieur du carburant, C_R la constante de mélange, K la densité de l'énergie cinétique turbulente, V le volume instantané du cylindre. Dans cette modélisation, ni la géométrie de la chambre de combustion ni les processus de développement de pulvérisation, d'évaporation et de formation de mélange ne sont pris en compte ou représentés par le nouveau modèle de dégagement de chaleur, ce qui le rend fortement dépendant qu'à la loi d'injection.

Pirker et al. [52] ont développé une méthodologie de simulation 0D pour une pré-optimisation efficace du processus de combustion dans les moteurs à allumage par compression dans le but de décrire les effets des nouveaux systèmes d'injection de carburant à haute pression sur le processus de combustion. Un nouveau modèle pour le calcul du taux de dégagement de chaleur est ainsi présenté. Il est basé sur la description séparée à la fois des processus primaires étroitement liés au jet de carburant ainsi que de la combustion de la masse de carburant restant après la fin de l'injection.
La modélisation de la répartition de la masse du combustible entre la combustion prémélangée et par diffusion ainsi qu'un modèle pour le temps de préparation du combustible sont décrits. En outre, des modèles ont été implémentés pour le délai d'auto-inflammation et de la combustion prémélangée, en se basant respectivement sur la formulation d'Arrhenius et le modèle de Magnussen.

$$\begin{aligned} \frac{dQ_{pre}}{dt} &= k_1 \lambda a_{stoich} e^{-\frac{k_2 T_i}{T}} \frac{m_F^2}{V_{mix}} LCV\,(t - t_{soc})^2 \\ \frac{dQ_{diff}}{dt} &= C_{Mod} PCI m_{diff,avail} \frac{\sqrt{k}}{\sqrt[3]{V_{Cyl}}} \end{aligned} \tag{1.6}$$

Avec k_1, k_2, C_{Mod} sont les constantes du modèle, l le rapport air/fuel, a_{stoich} le rapport stoechiométrique air/fuel, T la température dans la chambre de combustion, T_i la température d'activation, m_F la masse de carburant injectée, V_{mix} le volume du mélange, V_{Cyl} la cylindrée, PCI le pouvoir calorifique inférieur, t_{soc} le temps correspondant au début de combustion, $m_{diff,avail}$ la différence entre la quantité de carburant injectée et celle consommée par la combustion de prémélange et k la densité de l'énergie cinétique turbulente.
L'équation 1.6 décrit l'approche séquentielle pour la description de la combustion en mettant l'accent sur les caractéristiques de l'injection, en tenant en compte de l'interaction avec les parois illustrée par un traitement particulier pour le paramètre λ (Figure 1.12).

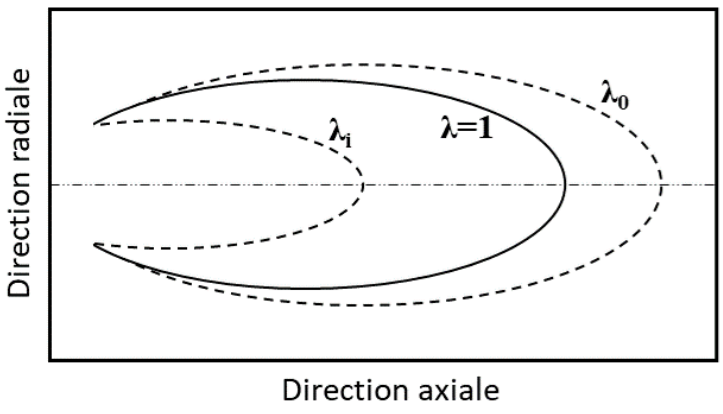


FIGURE 1.12 – Développement du jet après l'injection. (La figure est reproduite de [52] avec la permission de SAE International).

En se basant sur la physique, des formulations pour modéliser le délai d'auto-inflammation et la combustion prémélangée ont été développées. Les deux ont été principalement basées sur

une équation type d'Arrhenius, où seules les constantes du modèle étant adaptées aux deux régimes.

Les modèles de diffusion prémélangée, appartenant à la catégorie des modélisations à une zone, présentent des améliorations par rapport à la modélisation de Wiebe en termes d'aspects physiques. Cependant, ils restent incapables de reproduire les résultats de manière précise et fiable, en raison de leur grande dépendance à plusieurs corrélations mathématiques. De plus, ces modèles sont contrôlés par des constantes qui nécessitent une calibration basée sur les résultats expérimentaux spécifiques à chaque étude, ce qui remet en question la robustesse de ce type de modélisation.

2.2 Modèles à deux zones

Un modèle thermodynamique 0D à deux zones est une méthode de modélisation plus avancée que celui à une zone. Dans ce modèle, il est supposé que la chambre de combustion est subdivisée en deux zones distinctes à l'intérieur du cylindre : la zone de combustion principale et la zone de prémélange. Cette dernière est supposée être une zone homogène où le carburant et l'air sont mélangés avant l'injection. La zone de combustion principale, quant à elle, est supposée être la zone où la réaction de combustion se produit.
Les équations qui régissent la cinétique de la combustion, la formation et la propagation de la flamme, et l'évolution de la température et de la pression sont résolues simultanément pour prédire les propriétés thermodynamiques et les émissions polluantes. Le modèle 0D à deux zones prend en compte les effets de la turbulence, et de la formation de zones riches et pauvres en combustible et en oxygène.

Nagayihi abbe et al. [53] ont présenté une étude comparative pour la simulation d'un moteur diesel alimenté avec du gazole et du biodiesel. Deux modèles, basés sur la chimie tabulée, ont été mis en œuvre. À la fin de la simulation, les résultats ont été comparés aux données expérimentales obtenues à partir d'un moteur diesel monocylindre. Le premier modèle est un modèle à une zone basé sur le modèle de combustion de Krieger et Bormann tandis que le second est basé sur un modèle thermodynamique à deux zones ; une zone de gaz brûlés et une zone de gaz non brûlé. Les propriétés thermodynamiques des gaz de combustion sont calculées suivant les hypothèses d'équilibre chimique lors des réactions chimiques ayant lieu lors de la combustion. Le calcul des propriétés thermodynamiques est basé sur le lissage en fonction de la température des valeurs expérimentales contenues dans les tables thermodynamiques telles que Chemkin [54]. La Figure 1.13 représente un schéma illustrant le principe du modèle de combustion à deux zones contrôlé par la température des gaz brûlés (T_b) et la température des gaz frais (T_u) (gaz non brûlé).

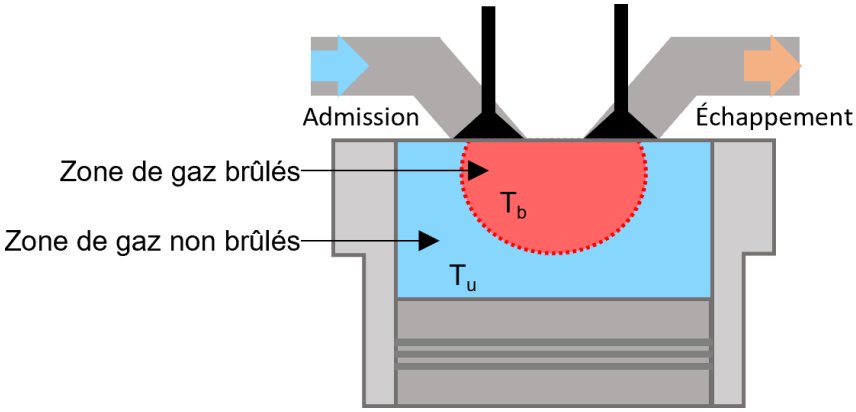


FIGURE 1.13 – Chambre de combustion discrétisée en deux zones.

Dans le travail susmentionné, il a été noté que les deux modèles peuvent bien prédire la pression dans le cylindre du moteur ainsi que ses performances globales. Le modèle à deux zones a montré une meilleure précision que celui à une zone, tandis que ce dernier était plus facile à mettre en œuvre et plus rapide à calculer. Il a été constaté que la première méthode était mieux adaptée au contrôle et à la surveillance en temps réel du moteur, tandis que la seconde était mieux adaptée à la conception du moteur et à la prédiction des émissions polluantes à cause de son aspect physique.

Rakopoulos [55] a développé un modèle à deux zones d'un moteur diesel, en subdivisant le contenu du cylindre en une zone d'air frais et une autre zone homogène dans laquelle le carburant injecté en continu est brûlé avec l'air entraîné. La croissance de la zone de pulvérisation de carburant, qui comprend un nombre de jets coniques carburant-air égal au nombre de trous de buse d'injecteur, est soigneusement modélisée dans ce travail en incorporant le mélange des jets, déterminant ainsi la quantité d'oxygène disponible pour la combustion. Les équations de conservation de la masse, d'énergie et d'état sont appliquées dans chacune des deux zones pour prédire la température et la pression à l'intérieur du cylindre. La concentration des différents constituants dans les gaz d'échappement est calculée en adoptant un schéma d'équilibre chimique pour le système C–H–O des 11 espèces considérées, ainsi que des équations chimiques pour le calcul du taux de formation des oxydes d'azote (NO_x). Cette analyse a ouvert la voie à la construction des modèles multizones, fiable et relativement simple, qui intègre dans chaque zone (paquet) la philosophie du modèle actuel à deux zones.

2.3 Modèles multizones

La modélisation 0D multizones (encore appelée modèlisation quasi-D multizones) est une méthode de modélisation encore plus avancée que le modèle à deux zones. Cette méthode suppose que la combustion se produit dans plusieurs zones distinctes à l'intérieur du cylindre, chacune étant caractérisée par une combustion et une température différente. Ce modèle subdivise le volume de la chambre de combustion en plusieurs zones. Ces zones sont souvent définies en fonction de la position radiale et axiale à l'intérieur du cylindre. Le modèle 0D multizones prend

en compte les effets de la turbulence, de la formation de zones riches et pauvres en combustible et en oxygènes, et de la distribution des températures à l'intérieur du cylindre. Ce modèle est plus précis que le modèle à deux zones car il peut capturer des phénomènes plus complexes tels que la formation de tourbillons, la propagation de la flamme et les effets de la turbulence. Il existe plusieurs types de modèles quasi-D, dont les modèles multizones avec découpage qualitatif, les modèles avec découpage systématique Lagrangien et les modèles avec découpage systématique Eulérien.

2.3.1 Modèles avec découpage qualitatif

Les modèles quasi-D à multizones avec découpage qualitatif sont basés sur la subdivision de la chambre de combustion en un petit nombre de zones homogènes, où la combustion est supposée se produire de manière homogène dans chaque zone. Les zones sont définies de manière qualitative en fonction des propriétés locales de la chambre de combustion, telles que la température, la pression, la composition chimique, etc. Ces modèles sont relativement simples à mettre en œuvre et fournissent des résultats de simulation suffisamment précis pour de nombreuses applications.

Maiboom et al. [56] ont développé un nouveau modèle phénoménologique de combustion multizones destiné aux moteurs diesel, en se basant sur le modèle conceptuel de Dec [57] et Flynn [58] pour la combustion du gazole ainsi que sur les modèles de pulvérisation de Siebers et al. [59, 60]. Le modèle fournit des informations locales, telles que la richesse moyenne et la température dans les différentes zones. Une validation du modèle est effectuée en variant les principaux paramètres du moteur, tels que le régime et la charge du moteur, la température de l'air d'admission, le taux de recirculation des gaz d'échappement (EGR), la pression de suralimentation et la pression d'injection. Le modèle est capable de calculer le taux de dégagement de chaleur avec une bonne précision, tandis que la variation des paramètres locaux calculés (température du cœur et de la flamme, longueur de décollage et richesse correspondante) peut être utilisée pour expliquer les principales tendances.
Ce modèle s'approche au maximum de la description physique conventionnelle caractérisée par une discrétisation multizones précise et surtout avec un suivi soigneux pour toutes les caractéristiques et les propriétés de chaque zone en fonction du degré vilebrequin comme l'indique la Figure 1.14.
Le modèle actuel est capable de trouver des tendances principales lors de la variation de la charge et de la vitesse du moteur, de la pression de suralimentation ou du taux d'EGR et peut être utilisé pour interpréter les tendances expérimentales des émissions (NO_x et particules).

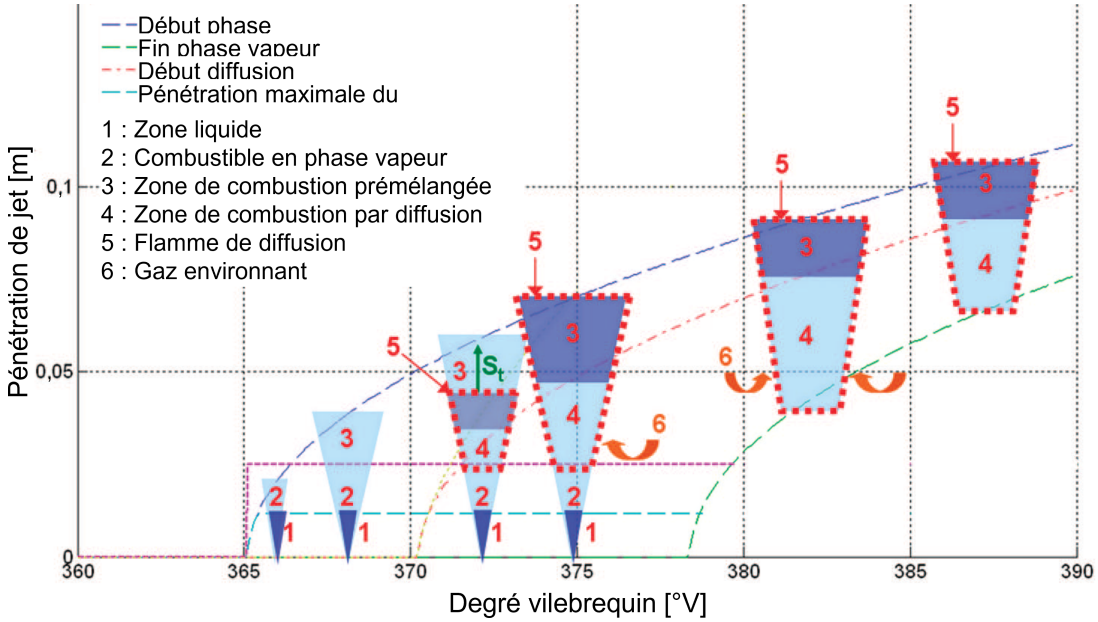


FIGURE 1.14 – Développement de jet dans la chambre de combustion et processus de combustion. (La figure est reproduite de [56] avec la permission de American Chemical Society).

Kuleshov [61] a développé une approche (appelé modèle RK) de modélisation avec la même logique de discrétisation multi zonales pour le traitement de la combustion. Le modèle principal du taux de dégagement de chaleur avec des sous-modèles de formation de NO_x et de suies a été implémenté dans le logiciel d'analyse thermodynamique ICE (DIESEL-RK). Le modèle RK prend en compte la forme du profile d'injection, y compris l'injection fractionnée, la taille des gouttes, la direction de chaque pulvérisation dans la chambre de combustion, le taux de Swirl et la forme du bol du piston. L'évolution des écoulements de surface de paroi générés par chaque pulvérisation dépend de l'angle d'impact, de la pulvérisation, de la paroi et du taux de Swirl. L'interaction entre les écoulements proches de la paroi (appelés écoulements de surface de paroi) générés par les pulvérisations adjacentes est prise en compte. La méthode considère que le carburant atteint les parois de la culasse et de la chemise, pour cette raison ce modèle est basé sur une discrétisation multi zonales différente avant et après impact où le nombre de zone change et le traitement aussi, comme l'indique la Figure 1.15.

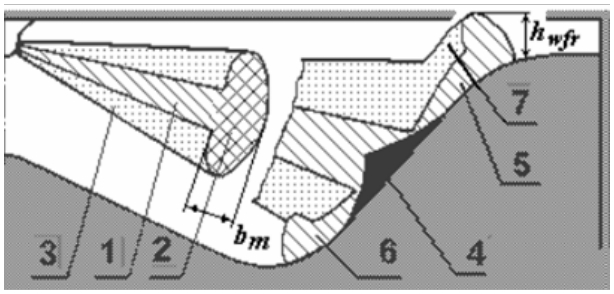


FIGURE 1.15 – Discrétisation et développement de jet avant et après interaction avec la paroi. (La figure est reproduite de [61] avec la permission de SAE International).

2.3.2 Modèles avec découpage systématique Lagrangien

Les modèles quasi-D avec découpage systématique Lagrangien sont basés sur la représentation de chaque jet de carburant comme une entité individuelle, ou "sac de carburant", qui est suivie dans l'espace et dans le temps. Ces modèles permettent de prendre en compte les interactions entre les jets de carburant, la turbulence et la combustion, mais ils peuvent être coûteux en termes de temps de calcul. Le découpage systématique Lagrangien signifie que les sacs de carburant sont suivis dans leur mouvement individuel dans l'espace-temps.

Hiroyasu et al. [62] ont développé un modèle mathématique d'une combustion par pulvérisation dans les moteurs diesel à injection directe pour prédire les performances du moteur et les émissions polluantes. Le jet de carburant injecté est subdivisé en plusieurs petits "paquets", comme illustré sur la Figure 1.16 (i et j représentent les cordonnées de chaque paquet selon les deux axes x et y, respectivement). Les paramètres thermodynamiques (la distribution de carburant, la concentration en oxygène, l'évaporation, le délai d'auto-inflammation, la température de la flamme, etc.) sont calculés pour chaque paquet.

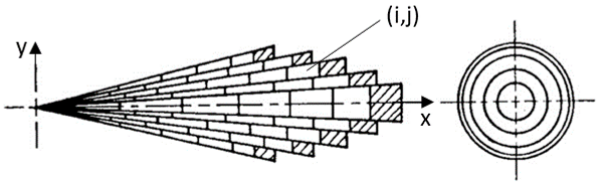


FIGURE 1.16 – Discrétisation Lagrangienne du jet. (La figure est reproduite de [62] avec la permission de Japan Society of Mechanical Engineers).

Ce modèle est basé principalement sur la théorie de "*Breakup*" de Levich [63], en se basant sur certaines hypothèses simplificatrices :

• La masse volumique du carburant est largement supérieure à celle de l'air dans la chambre de combustion ($\rho_l \gg \rho_a$. Avec ; ρ_l et ρ_a sont les masse volumique du carburant et de l'air dans la chambre de combustion, respectivement)
• La vitesse relative entre le jet de carburant et les gaz à l'intérieure est importante.
• À mesure que l'amplitude des perturbations de surface augmente, le jet de carburant devient instable et se brise en gouttelettes.
• La longueur de "*Breakup*" est un paramètre capital de la théorie, il est défini par l'équation 1.7.

$$\begin{aligned} L = v_{inj}.t_{break} &= c_1 \left(\frac{\rho_l}{\rho_a}\right)^{1/2} d_{inj} \\ v_{inj} &= c_2 \left(\frac{2\Delta p}{\rho_l}\right)^{1/2} \\ t_{break} &= c_1 \rho_l \frac{d_{inj}}{(2c_2^2 \Delta p)^{1/2}} \end{aligned} \tag{1.7}$$

Avec c_1, c_2 sont des paramètres du modèle.

Par la suite, chaque paquet suit un scénario bien déterminé. La Figure 1.17 montre le processus de combustion de chaque paquet. Lorsque l'allumage se produit, le mélange combustible préparé en amont, brûle en un laps de temps. Le taux de combustion et la quantité de combustible brûlé de chaque paquet sont calculés en supposant la condition stœchiométrique. Lorsque l'air dans le paquet est suffisant pour brûler le combustible vaporisé, il reste de l'air dans le paquet après l'allumage. Dans le petit instant de temps suivant, les gouttelettes de carburant s'évaporent et de l'air frais s'entraîne dans le paquet. La combustion de l'étape suivante s'accomplit (cas A de la Figure 1.17). Après cette étape, puisque la combustion est supposée stœchiométrique, il reste soit le carburant vaporisé, soit l'air. Lorsqu'il reste de l'air, le même processus de combustion se répète. Mais lorsqu'il reste du combustible vaporisé, la quantité de combustible en combustion est contrôlée par l'air entraîné à l'étape suivante (cas B de la Figure 1.17). Si l'inflammation se produit, mais l'air dans le paquet n'est pas suffisant pour brûler le combustible vaporisé, le processus de combustion se poursuit dans la condition indiquée dans le cas B. Par conséquent, tous les processus de combustion dans chaque paquet se déroulent dans l'une des conditions indiquées à la Figure 1.17.

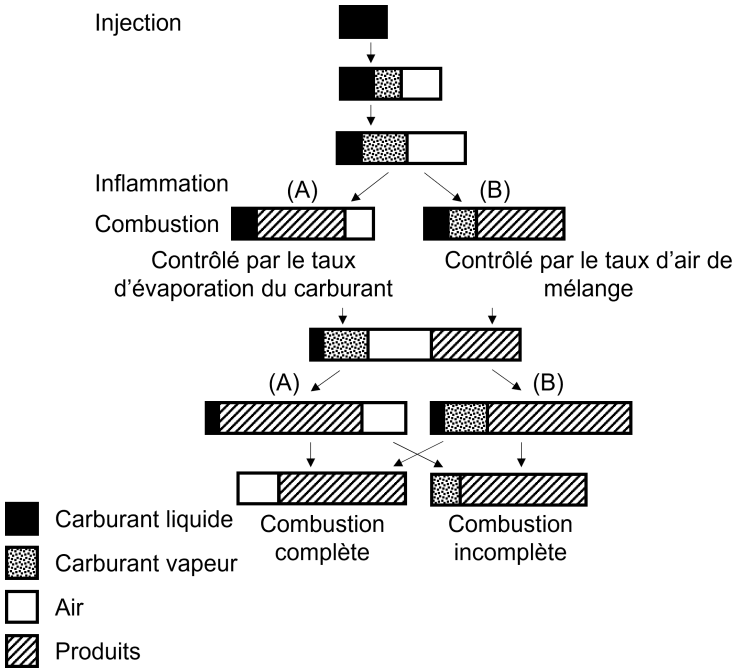


FIGURE 1.17 – Processus de combustion dans un paquet de fuel. (La figure est reproduite de [62] avec la permission de Japan Society of Mechanical Engineers).

Dans un travail basé principalement sur la l'approche développée par Hiroyasu et al. [62], Rajkumar et al. [64] présentent un modèle phénoménologique multizones utilisé pour prédire les caractéristiques de combustion et des émissions polluantes d'un moteur diesel à injection multiples. Suite à une validation par rapport aux résultats expérimentaux sur une large gamme de conditions de régime et de charge, il a été noté que la configuration de pulvérisation à multizones adoptée en se basant sur la modélisation phénoménologique de l'évolution du jet et de la formation du mélange permettent une prédiction précise des caractéristiques de combustion et

des émissions polluantes de NO_x et de suies.
Par ailleurs, le travail de Cerri et al. [65] consiste à un développement d'un modèle quasi-dimensionnel multizone destiné aux moteurs diesel fonctionnant avec une simple injection ou injection fractionnée. Ce modèle est caractérisé par sa prédictivité des phénomènes les plus pertinents pendant le processus de combustion à savoir : l'injection de carburant et son développement, l'entraînement d'air, l'inflammation de carburant et la formation des différentes espèces polluantes.
Ce travail repose principalement sur la même approche proposée par Hiroyasu [62] pour le traitement du jet mais il distingue deux phases capitales pour le développement de ce dernier : une phase du jet libre, entre le début d'injection et l'instant pour lequel le bout du jet atteint les parois (t_{hit}) et une phase du jet modifié, commence juste après l'interaction jusqu'à la consommation de toute la quantité de carburant. Le principe du modèle est lié directement à la vitesse des paquets qui construisent le jet, et qui est définie selon l'équation 1.8 en fonction de la phase avant et après interactions avec les parois.

$$\begin{cases} v = \frac{2{,}95}{2} \left(\frac{\Delta p}{\rho_a}\right)^{0{,}25} \left(\frac{d_n}{t}\right)^{0{,}5} & t < t_{hit} \\ v = \frac{2{,}95}{2} \left(\frac{\Delta p}{\rho_a}\right)^{0{,}25} d_n \frac{t_{hit}^{0{,}25}}{t^{0{,}75}} & t \geq t_{hit} \end{cases} \tag{1.8}$$

L'instant pour lequel le jet atteint les parois (t_{hit}) est un paramètre important du modèle, ce qui nécessite un traitement particulier. Il est calculé selon le cas en fonction des paramètres géométriques de la chambre de combustion, la vitesse instantanée du piston, les propriétés d'injection (vitesse d'injection, angle d'injection) et le développement du jet.

2.3.3 Modèles avec un découpage systématique Eulérien

Les modèles quasi-D avec découpage systématique Eulérien sont basés sur une approche où le domaine de la chambre de combustion est subdivisé en une grille régulière de cellules fixes, ce qui permet de résoudre les équations de conservation de manière plus simple et plus efficace que les modèles avec découpage systématique Lagrangien. Ces modèles prennent en compte les interactions entre les jets de carburant, la turbulence et la combustion, avec un temps de calcul relativement réduit. Le découpage systématique Eulérien signifie que les cellules fixes de la grille régulière sont suivies dans leur évolution dans l'espace-temps.

Pastor et al. [66] ont réalisé une étude numérique pour comprendre la relation entre le processus local de mélange carburant-air, l'évolution dynamique de la pulvérisation et la pénétration du jet. Dans ce travail, un modèle de pulvérisation Eulérien unidimensionnel a été présenté, en se basant sur l'hypothèse que la pulvérisation peut être décrite du point de vue d'un processus contrôlé par mélange. C'est-à-dire que les processus de diffusion des gouttelettes sont beaucoup plus rapides que le développement de l'écoulement turbulent. Une hypothèse d'écoulement localement homogène a été réalisée, ce qui signifie que le modèle peut être appliqué à la fois aux jets de gaz et aux pulvérisations de gazole.
Les équations de conservation pour la quantité de mouvement dans la direction axiale et la masse

de carburant sont résolues en termes de variables sur l'axe en supposant des profils radiaux auto-similaires pour la vitesse axiale et la fraction de masse de carburant comme le présente la Figure 1.18. Le nombre de Lewis turbulent a été supposé égal à l'unité, et donc les paramètres d'état sont calculés séparément des équations d'écoulement, afin de déterminer les propriétés thermodynamiques locales à partir des propriétés du carburant pur et de l'air, qui sont des entrées du modèle. Il est ainsi possible de considérer les valeurs de masse volumique locale, en comparaison à d'autres types d'approches unidimensionnelles dans lesquelles une masse volumique constante est considérée.

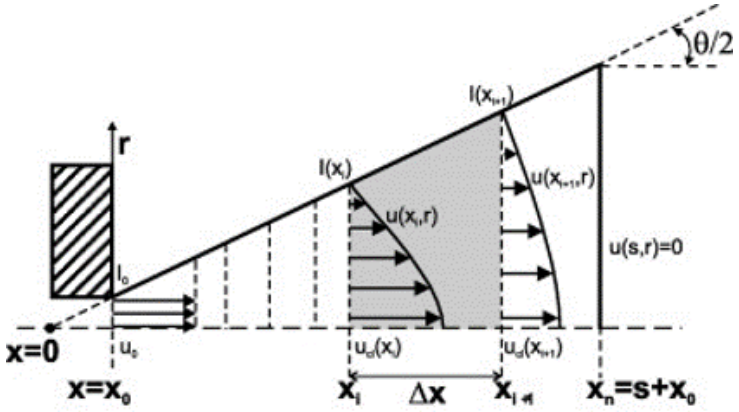


FIGURE 1.18 – Discrétisation Eulérienne du spray. (La figure est reproduite de [66] avec la permission de Elsevier).

Selon le même aspect, et dans le but d'améliorer davantage ce type de modélisation, notamment la version simplifiée de Masculus [67], Bordet et al. [68] ont proposé une description détaillée pour les phénomènes transitoires présents dans le cas de la stratégie d'injection multiples, en se basant sur une discrétisation Eulérienne, pour laquelle la variation de la masse volumique dans les différentes sections de volumes de contrôle est prise en considération.
La Figure 1.18 illustre l'approche développée dans ce modèle, où le volume de la chambre de combustion est subdivisé en certain nombre de régions en fonction du nombre des orifices de l'injecteur. Le modèle traite par la suite toutes les grandeurs extensives dans chaque région pour remonter à la fin à la totalité de la chambre de combustion.

Cette approche utilise le modèle DITurbBC (*Donwstream Inflow Turbulent Bondary Condition*) [69] pour le traitement de la zone proche du nez de l'injecteur. L'un des phénomènes décrits porte sur la phase liquide qui atteint une certaine longueur, dite de *Breakup*, à laquelle l'atomisation va avoir lieu. La Figure 1.19 illustre l'approche développée avec les différents angles et longueurs caractéristiques, à contrôler. Ce modèle utilise les caractéristiques de l'injecteur pour construire une description algébrique de toutes les caractéristiques et profils de pulvérisation près de la sortie de la buse. Ces profils peuvent être utilisés comme conditions aux limites pour la simulation Eulérienne des pulvérisations de carburant, en particulier dans la simulation aux grandes échelles.

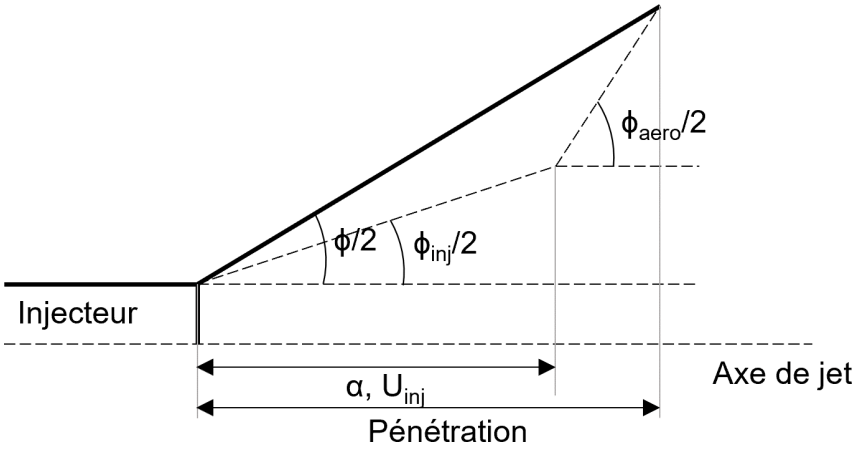


FIGURE 1.19 – Développement de jet au nez de l'injecteur. (La figure est reproduite de [69] avec la permission de Elsevier).

3 Sous modèles de combustion dans les moteurs à combustion interne

La combustion dans les moteurs est gouvernée par plusieurs phénomènes physiques qui peuvent être modélisés par des sous modèles afin de les reproduire dans le cadre de la modélisation globale de la combustion. Cette section présente les principaux sous modèles utilisés dans la littérature.

3.1 Modèles d'évaporation

Les modélisation 0D-multizones ou quasi-D nécessite le suivi de chaque sous zones en termes de propriétés et de composition, ce qui rend le suivi de l'état du carburant (liquide, vapeur) dans la chambre de combustion primordial. Les modèles d'évaporation prennent en compte des facteurs tels que la taille des gouttelettes de carburant, la vitesse d'injection, la température et la pression dans la chambre de combustion, ainsi que les propriétés physiques et chimiques du carburant. Ils peuvent être utilisés pour prédire la distribution spatiale et temporelle des gouttelettes de carburant dans la chambre de combustion, ainsi que leur taux d'évaporation.
Il existe différents types de modèles d'évaporation utilisés dans la modélisation de la combustion dans les moteurs, tels que les modèles de gouttelettes discrètes, les modèles de trajectoire de particules, les modèles de diffusion, et les modèles de balance d'énergie. Certains des modèles les plus couramment utilisés sont le modèle de Droplet Size Distribution (DSD) [70], le modèle de Taylor Analogy *Breakup* (TAB) [71], et le modèle de jet [72].

• **Modèle de Droplet Size Distribution (DSD) :** C'est un modèle 0/1D qui est souvent utilisé pour prédire la distribution de taille des gouttelettes dans les jets d'injection de carburant. Le modèle prend en compte les caractéristiques du système d'injection, telles que la pression et la géométrie du jet, ainsi que les propriétés du carburant, telles que la viscosité et la tension de surface. Le modèle est basé sur les équations de conservation de la masse et de l'énergie pour les gouttelettes de carburant, qui sont résolues numériquement pour prédire la distribution de

taille des gouttelettes dans le jet.
Le modèle DSD utilise généralement des lois empiriques pour modéliser la fragmentation des gouttelettes dans le jet. Ces lois empiriques sont basées sur des observations expérimentales de la fragmentation des gouttelettes, et elles sont ajustées aux données expérimentales pour améliorer la précision des prévisions du modèle.

• **Modèle de Taylor Analogy *Breakup* (TAB) :** C'est un modèle qui est souvent utilisé pour prédire la fragmentation des gouttelettes de carburant dans les jets d'injection. Le modèle est basé sur l'hypothèse stipulant que la fragmentation des gouttelettes est similaire à la fragmentation des fluides visqueux en écoulement, telle que décrite par la théorie de l'analogie de Taylor [73]. Ce modèle est souvent utilisé pour prédire la fragmentation des gouttelettes dans les jets d'injection de carburant à haute pression, où les gouttelettes sont sujettes à une fragmentation importante.

• **Modèle de jet :** C'est un modèle 3D qui est souvent utilisé pour prédire la formation des jets d'injection de carburant dans les moteurs à combustion interne. Il est basé sur les équations de conservation de la masse et de l'énergie pour les gouttelettes de carburant, qui sont résolues numériquement à chaque instant de temps pour prédire la formation et la propagation du jet dans la chambre de combustion. Le modèle de jet utilise une approche de maillage pour représenter l'espace dans lequel le jet se propage, et utilise des schémas de discrétisation pour résoudre les équations de conservation dans chaque maille.

Ces trois modèles sont tous utilisés pour la modélisation des jets d'injection de carburant dans les moteurs à combustion interne, mais ils diffèrent dans leur approche et leur niveau de complexité. Le modèle DSD est plus simple et peut être utilisé lorsque les données d'entrée sont limitées, mais il est moins précis pour prédire la fragmentation des gouttelettes dans le jet. Le modèle TAB est plus précis pour prédire la fragmentation des gouttelettes, mais il nécessite plus de données d'entrée. Le modèle de jet est le plus complexe et le plus précis, mais il nécessite également plus de données d'entrée et de ressources informatiques pour exécuter les simulations.

3.2 Modèles de délai d'auto-inflammation

Le délai d'auto-inflammation pour les moteurs à allumage par compression est un processus physique impliquant à la fois la mécanique des fluides et la combustion. Au cours de ce processus, le carburant injecté est atomisé en gouttelettes, vaporisé, mélangé avec l'air entraîné et initie des réactions de combustion. En conséquence, le délai d'auto-inflammation est défini comme le temps (ou l'angle vilebrequin) entre le début de l'injection et le début de la combustion. Le début de l'injection commence lorsque l'aiguille de l'injecteur se soulève de son siège et que le carburant commence à s'écouler dans la chambre de combustion. Le début de la combustion est déterminé indirectement à l'aide d'une analyse de combustion.
Des processus physiques et chimiques doivent se produire avant qu'une fraction significative de l'énergie chimique du carburant liquide injecté ne soit libérée. Les processus physiques sont : l'atomisation du jet de carburant liquide, la vaporisation des gouttelettes de carburant et le

mélange de la vapeur de carburant avec l'air. Les processus chimiques sont les réactions de combustion du mélange de carburant, d'air et de gaz résiduel qui conduisent à l'auto-inflammation. Ces processus sont affectés par la conception et les paramètres de fonctionnement du moteur, ainsi que les caractéristiques du carburant.

L'aptitude à l'auto-infalammation d'un carburant est définie par son indice de cétane (CI). La méthode utilisée pour déterminer la qualité d'allumage en termes d'indice de cétane est analogue à celle utilisée pour déterminer la résistance à l'auto-inflammation de l'essence en termes d'indice d'octane. L'échelle d'indice de cétane est définie par des mélanges de deux carburants de référence hydrocarbonés purs. La cétohexadécane (n-cétane), un hydrocarbure avec une qualité d'allumage élevée, représente le sommet de l'échelle avec un indice de cétane de 100. L'isocétane, l'heptaméthyl-nonane (HMN), qui a une qualité d'allumage très faible, représente le bas de l'échelle avec un indice de cétane de 15. Ainsi, l'indice de cétane est donné par l'équation 1.9 :

$$CI = \%n\text{-}cetane + 0{,}15 \times \%HMN \tag{1.9}$$

Certaines études fondamentales ont été menées pour examiner les caractéristiques d'auto inflammation des mélanges de carburant et d'air dans des conditions contrôlées. Des études ont été réalisées en injectant le carburant dans des environnements maintenus à une température et une pression constante, et ont montré que la température et la pression de l'air sont les variables les plus importantes pour une composition de carburant donnée. Les données de délai d'auto-inflammation obtenues dans ces expériences ont été généralement corrélées en utilisant une équation de forme spécifique comme l'indique l'équation 1.10.

$$\tau_{id} = Ap^{-n} \exp\left(\frac{E_A}{RT}\right) \tag{1.10}$$

Où τ_{id} est le délai d'auto-inflammation, E_A est l'énergie d'activation apparente pour le processus d'auto-inflammation du carburant, R est la constante universelle des gaz parfaits, A et n sont des constantes qui dépendent du carburant et des caractéristiques d'injection et d'écoulement de l'air. Dans un moteur, la pression et la température changent pendant le délai d'auto-inflammation en raison de la compression résultant du mouvement du piston. Pour tenir compte de l'effet des conditions changeantes sur le délai d'auto-inflammation, la relation intégrale empirique illustrée par l'équation 1.11 est généralement utilisée [74] :

$$\int_{t_{si}}^{t_{si}+\tau_{id}} \left(\frac{1}{\tau}\right) dt = 1 \tag{1.11}$$

Où t_{si} est le moment du début de l'injection, τ_{id} est le délai d'auto-inflammation, et τ est le temps après l'injection aux conditions existantes au moment t.

3.3 Modèles des émissions polluantes

Les modèles des émissions polluantes sont des sous-modèles qui permettent de prédire avec précision les quantités des polluants résultant de la combustion des gaz brûlés. Les émissions

d'oxydes d'azote (NO_x), les particules de suies, les hydrocarbures imbrulés (HC) et les monoxydes de carbone (CO) sont les principaux éléments polluants soumis à des normes anti-pollution restrictives. Dans ce contexte, cette partie est focalisée sur ce type d'émission. Afin de répondre à ces normes, il était nécessaire de développer des modèles prédictifs précis qui quantifient ces polluants en fonction du cycle moteur.

Ces modèles d'émission peuvent être appliqués à différents types de moteurs, qu'ils soient à allumage commandé ou à allumage par compression. Les principales données d'entrée pour ces modèles sont la température et la pression dans le cylindre à chaque instant donné. Cependant, résoudre ces modèles d'émission est un défi car ils donnent souvent lieu à des équations différentielles non linéaires qui peuvent être difficilement résolues.

3.3.1 Formation des oxydes d'azote (NO_x)

Le composant principal des émissions de NO_x dans les moteurs à combustion interne est l'oxyde nitrique (NO). Trois sources potentielles de formation de ces oxydes nitriques ont été identifiées pendant la combustion :

• **Le NO thermique :** Il est produit lorsque la température de combustion est élevée et que l'azote (N_2) et l'oxygène (O_2) présents dans l'air réagissent pour former du NO. La formation de NO thermique est influencée par plusieurs facteurs, notamment la température de combustion, la pression et le temps de séjour dans la chambre de combustion. Plus la température est élevée, plus la quantité de NO thermique produite est importante. C'est pourquoi les moteurs à combustion interne qui fonctionnent à des températures élevées, comme les moteurs diesel, sont plus susceptibles de produire du NO thermique [75]. Les réactions présentées dans le Tableau 1.1, connues sous le nom de "mécanisme étendu de Zeldovich", régissent la formation de NO thermique [76]. Initialement, le mécanisme de Zeldovich ne comportait que les deux premières réactions, mais la troisième a été introduite par Lavoie [77]. Les termes du côté droit de la première équation ainsi que ceux du côté gauche des deux dernières pour les réactions inverses sont hautement endothermiques, nécessitant une énergie d'activation élevée. Par conséquent, la formation de NO est fortement influencée par la température. Le Tableau 1.1 résume les valeurs recommandées pour les constantes de vitesse des réactions réversibles auront lieu selon ce mécanisme.

TABLE 1.1 – Constante de vitesse pour le mécanisme de formation de NO [76].

Réaction	Constante de vitesse, $cm^3/mol.s$	Plage de température, K
(1) $O+N_2 \rightarrow NO+N$	$7{,}6 \times 10^{13} \exp[-38000/T]$	2000-5000
(-1) $N+NO \rightarrow N_2+O$	$1{,}6 \times 10^{13}$	300-5000
(2) $N+O_2 \rightarrow NO+O$	$6{,}4 \times 10^{9} T \exp[-3150/T]$	300-3000
(-2) $O+NO \rightarrow O_2+N$	$1{,}5 \times 10^{9} T \exp[-19500/T]$	1000-3000
(3) $N+OH \rightarrow NO+H$	$4{,}1 \times 10^{13}$	300-2500
(-3) $H+NO \rightarrow OH+N$	$2{,}0 \times 10^{14} \exp[-23650/T]$	2200-4500

Le taux de formation des oxydes d'azote est calculé sous la forme différentielle non linéaire utilisant l'équation 1.12.

$$\frac{d\,[\mathrm{NO}]}{dt} = k_1^+\,[\mathrm{O}]\,[\mathrm{N_2}] + k_2^+\,[\mathrm{N}]\,[\mathrm{O_2}] + k_3^+\,[\mathrm{N}]\,[\mathrm{OH}] - k_1^-\,[\mathrm{NO}]\,[\mathrm{N}] - k_2^-\,[\mathrm{NO}]\,[\mathrm{O}] - k_3^-\,[\mathrm{NO}]\,[\mathrm{H}] \quad (1.12)$$

Où [-] indiquent les concentrations des espèces en moles par centimètre cube et k_i sont les valeurs données dans le Tableau 1.1.
Une relation similaire (équation 1.13) peut être écrite pour $d\,[\mathrm{N}]\,/dt$:

$$\frac{d\,[\mathrm{N}]}{dt} = k_1^+\,[\mathrm{O}]\,[\mathrm{N_2}] - k_2^+\,[\mathrm{N}]\,[\mathrm{O_2}] - k_3^+\,[\mathrm{N}]\,[\mathrm{OH}] - k_1^-\,[\mathrm{NO}]\,[\mathrm{N}] + k_2^-\,[\mathrm{NO}]\,[\mathrm{O}] + k_3^-\,[\mathrm{NO}]\,[\mathrm{H}] \quad (1.13)$$

Comme [N] est bien inférieur aux concentrations des autres espèces d'intérêt, l'approximation de l'état d'équilibre est appropriée : $d\,[\mathrm{N}]\,/dt$ est fixé à zéro et l'équation 1.14 est utilisée pour éliminer [N]. Le taux de formation de NO devient alors :

$$\begin{aligned} \frac{d\,[\mathrm{NO}]}{dt} &= 2k_1^+\,[\mathrm{O}]\,[\mathrm{N_2}]\,\frac{1 - [\mathrm{NO}]^2\,/\,(K\,[\mathrm{O_2}]\,[\mathrm{N_2}])}{1 + k_1^-\,[\mathrm{NO}]\,/\left(k_2^+\,[\mathrm{O_2}] + k_3^+\,[\mathrm{O_2}]\right)} \\ K &= \left(k_1^+/k_1^-\right)\left(k_2^+/k_2^-\right) \end{aligned} \quad (1.14)$$

• **Le NO précoce (ou prompt) :** Il est produit lorsque l'oxygène et l'azote présents dans l'air réagissent directement pendant la combustion pour former du NO. Cette réaction est très rapide, ou "*prompte*", et se produit principalement dans les moteurs à allumage commandé. Les conditions de combustion favorisant la formation de NO précoce sont la richesse en air élevée et la température de combustion relativement basse. Les moteurs à essence modernes sont équipés de systèmes de contrôle de pollution qui permettent de réduire la formation de NO précoce en ajustant la richesse et la température de combustion.
Les NO précoce contribuent en faible proportion à la formation des NO issue de la combustion dans les moteurs à allumage par compression, sous le mécanisme réactionnel suivant l'équation 1.15 :

$$\begin{aligned} \mathrm{OH} + \mathrm{N_2} &\rightarrow \mathrm{H} + 2\mathrm{N} \\ \mathrm{N} + \mathrm{O_2} &\rightarrow \mathrm{NO} + \mathrm{O} \\ \mathrm{H} + \mathrm{O_2} &\rightarrow \mathrm{OH} + \mathrm{O} \\ \mathrm{NO} + \mathrm{O} &\rightarrow \mathrm{NO_2} \\ 2\mathrm{NO_2} &\rightarrow 2\mathrm{NO} + \mathrm{O_2} \end{aligned} \quad (1.15)$$

Le mécanisme réactionnel du NO précoce est plus complexe que celui du NO thermique. Il commence par la réaction de l'hydroxyle (OH) avec l'azote moléculaire (N_2) pour former des atomes d'azote (N). Les atomes d'azote réagissent ensuite avec l'oxygène pour former du NO, qui est ensuite converti en NO_2 comme dans le cas du NO thermique.

• **Le NO de carburant :** Il est produit lorsque les produits de combustion du carburant réagissent avec l'azote atmosphérique pour former du NO. Ce mécanisme est plus fréquent

dans les moteurs à combustion interne utilisant des carburants riches en azote, tels que les combustibles fossiles contenant des impuretés azotées. La formation de NO de carburant dépend de la composition du carburant, de la pression et de la température de combustion, ainsi que du temps de rétention dans la chambre de combustion. Le mécanisme caractérisant le processus de formation de NO de carburant n'est pas entièrement compris, mais il peut être simplifié comme le montre l'équation 1.16.

$$\mathrm{C}_n\mathrm{H}_m\mathrm{N} + (n + n/4)\,\mathrm{O}_2 \rightarrow n\mathrm{CO}_2 + (m/4)\,\mathrm{H}_2\mathrm{O} + (m/4)\,\mathrm{NO} \tag{1.16}$$

Cette formation de NO est contrôlée par une réaction complexe et dépendante du type de carburant. La réaction ci-dessus représente une réaction générale pour la combustion de carburants contenant de l'azote. Elle montre comment l'azote organique dans le carburant est oxydé en NO pendant la combustion.

3.3.2 Formation des particules, des hydrocarbures non brûlés (HC), et des monoxydes de carbone (CO)

Lors du processus de combustion dans les moteurs à combustion interne, les particules se forment à travers plusieurs mécanismes. Tout d'abord, la pyrolyse des gouttelettes de carburant, résultant de conditions de combustion non optimales, contribue à la création de particules. Ce processus implique la décomposition thermique des gouttelettes de carburant en composants plus petits, qui peuvent ensuite se condenser pour former des particules solides ou liquides. De plus, la condensation des hydrocarbures (HC) non brûlés provenant de la combustion incomplète peut également jouer un rôle significatif dans la formation des particules, ajoutant à la complexité du processus, comme l'indique l'équation 1.17.

$$\text{Radicaux HC} \rightarrow \text{Particules} \tag{1.17}$$

Les hydrocarbures non brûlés se forment lorsque le carburant ne brûle pas complètement, selon l'équation 1.18.

$$\text{Radicaux HC} \rightarrow \text{Composés plus lourds} \tag{1.18}$$

La corrélation 1.19 proposée par Lavoie et al. [78] est parmi les corrélations de base qui visent la modélisation des hydrocarbures non brûlés dans les moteurs à combustion interne.

$$\frac{d\,[\mathrm{HC}]}{dt} = -6{,}7 \times 10^{15} \exp\left(\frac{-18735}{T}\right) \widetilde{x}_{\mathrm{HC}} \widetilde{x}_{\mathrm{O_2}} \left(\frac{p}{RT}\right)^2 \tag{1.19}$$

Dans cette formule, les concentrations en moles par centimètre cube sont représentées par les crochets ([ ]). Les fractions molaires des hydrocarbures ($\widetilde{x}_{HC}$) et de l'oxygène ($\widetilde{x}_{O_2}$) sont également utilisées. Les unités de temps (t) et de température (T) sont respectivement les secondes et les kelvins.

La source des monoxydes de carbone est similaire à celle des hydrocarbures non brûlés,

comme montré par l'équation 1.20.

$$RH \rightarrow R \rightarrow RO_2 \rightarrow RCHO \rightarrow RCO \rightarrow CO \tag{1.20}$$

Où R représente le radical hydrocarboné. Par la suite le CO formé dans le processus de combustion est oxydé en CO_2 à une vitesse plus lente selon la réaction 1.21 :

$$CO + OH = CO_2 + H \tag{1.21}$$

Sur la base des modèles cités au-dessus, plusieurs travaux ont été élaborés et développés pour la prédiction des émissions polluantes dans les moteurs à combustion interne. Ils ont utilisé ces modèles pour le traitement des différents cas de fonctionnement, comme les moteurs diesel [64] et les moteurs dual fuel [79].

4 Modélisation thermodynamique 0D de la combustion dual fuel

Les restrictions concernant les émissions polluantes des moteurs à combustion interne constituent un enjeu majeur pour l'industrie automobile. De nouvelles stratégies de combustion telles que LTC (*Low Temperature Combustion*), PCCI (*Premixed Controled Compression Ignition*), HCCI (*Homogeneous Charge Compression Ignition*) ou dual fuel sont des solutions prometteuses pour atteindre les normes d'émission imposées. Ils permettent de faibles émissions de NO_x et de suies via un régime de combustion pauvre et fortement dilué, assurant ainsi des températures de combustion basses. Le moteur dual fuel représente actuellement une très bonne alternative pour le moteur diesel, offrant de bonnes performances et des taux d'émission réduits [7].

Comme déjà mentionné, le moteur dual fuel est un type de moteur à combustion interne qui utilise deux types de carburant pour fonctionner. Il utilise principalement le gaz comme carburant principal (carburant primaire), tandis que le gazole est utilisé comme carburant pilote pour maintenir la stabilité de la combustion. Le moteur dual fuel fonctionne en utilisant un système d'injection de gaz pour créer un mélange air-carburant combustible dans le cylindre moteur. Le gazole est ensuite injecté dans le cylindre pour fournir une source d'allumage pour le mélange gaz-air.

Frerichs et Eilts [80] ont développé un modèle de combustion prédictif pour le traitement du mode de la combustion dual fuel. Il consiste en un modèle du délai d'auto-inflammation physique/chimique détaillé, y compris un modèle de pulvérisation 1D. La zone de pulvérisation et le mélange gaz naturel/air homogène sont brûlés avec différents modèles de combustion, pour tenir compte de l'effet de la distribution non homogène du combustible. Les émissions de NO_x ont été modélisées à l'aide d'un mécanisme de Zeldovich étendu standard, et pour les émissions de HC, deux modèles d'extinction de flamme sont inclus et étendus avec une corrélation empirique. Les modèles sont calibrés avec les données de mesure d'un moteur monocylindre. Le début de la

combustion et les paramètres de combustion sont bien prédits pour une large gamme de calages d'injection et de conditions de fonctionnement.
L'injection pilote est modélisée avec le modèle de pulvérisation 1D de Musculus et Kattke [67] pour le traitement du jet qui repose sur la détermination précise de la quantité de carburant existante dans chaque point à l'intérieur de l'enveloppe du jet. Dans cette étude une "onde d'entraînement" est prédite pour simuler la région d'entraînement intense générée après la fin d'injection et qui contrôle plusieurs paramètres de combustion à savoir ; la stagnation rapide de mélange à proximité de l'injecteur, déplacements spatiaux des sites de la formation de suies et l'oxydation intense des suies après la fin d'injection.

Le modèle est étendu avec un modèle de mélange à évaporation limitée et un nouveau modèle pour calculer la distribution de température à l'intérieur du jet. Le processus d'allumage est simulé avec un modèle détaillé du délai d'auto-inflammation en 2 étapes, qui a été construit sur la base de calculs approfondis de cinétique de réaction. La progression de la réaction à l'intérieur du jet est suivie via une nouvelle équation de transport.
Après l'allumage, la modélisation de pulvérisation est terminée et le mélange à l'intérieur du jet est utilisé pour initialiser le modèle de combustion. Pour tenir compte des différents combustibles dans la chambre de combustion, la zone non brûlée est divisée en différentes sous-zones, qui sont traitées avec différents modèles de combustion. Pour la propagation de la flamme, un nouveau modèle de front de flamme a été développé calculant le front de flamme dans la première partie de la combustion sous forme de flammes simples en forme de cône qui fusionnent ensuite en un seul front de flamme. Le modèle de combustion montre une bonne prédiction des paramètres de combustion pertinents sur la cartographie du moteur. Pour améliorer les résultats, un paramètre du modèle d'entraînement a été étendu avec une corrélation empirique.

Xu et Filipi [81] ont présenté un travail qui porte sur le développement d'un modèle de combustion multizone quasi dimensionnel destiné aux moteurs de type dual fuel. L'approche utilise les meilleures caractéristiques du modèle de pulvérisation gazole multizone avec le modèle d'entraînement de flamme turbulent pour la charge prémélangée de gaz naturel (GN) et d'air/EGR. Le modèle de combustion du gazole développé dans cette étude est basé sur l'approche de Hiroyasu [62], avec plusieurs améliorations dans ses sous-modèles. Concernant la combustion de la charge prémélangée, une nouvelle façon de modéliser la zone du front de flamme lors de la propagation de la flamme GN est proposée. La flamme GN est supposée s'amorcer à partir de la limite extérieure de la pulvérisation du gazole et se propager dans l'espace dans la direction perpendiculaire à l'enveloppe de pulvérisation du gazole comme il est montré dans la Figure 1.20.

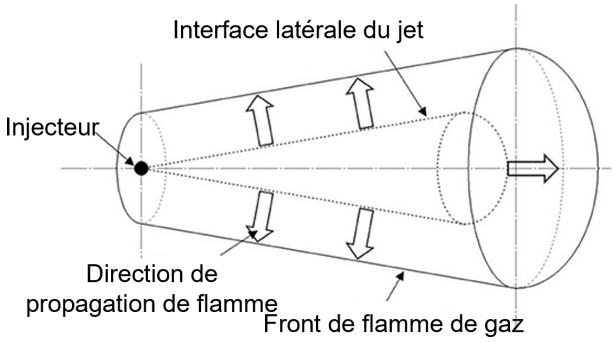


FIGURE 1.20 – Développement de jet dans la combustion dual fuel [81] (CC BY 4.0).

Les modèles de combustion du gazole et du GN s'exécutent simultanément pour arriver à une prédiction complète de l'historique de dégagement de chaleur des deux carburants, sur la base d'informations détaillées sur l'évolution de la pulvérisation du gazole, de l'allumage et de la propagation de la flamme du mélange GN-air, comme l'indique le diagramme sur la Figure 1.21.

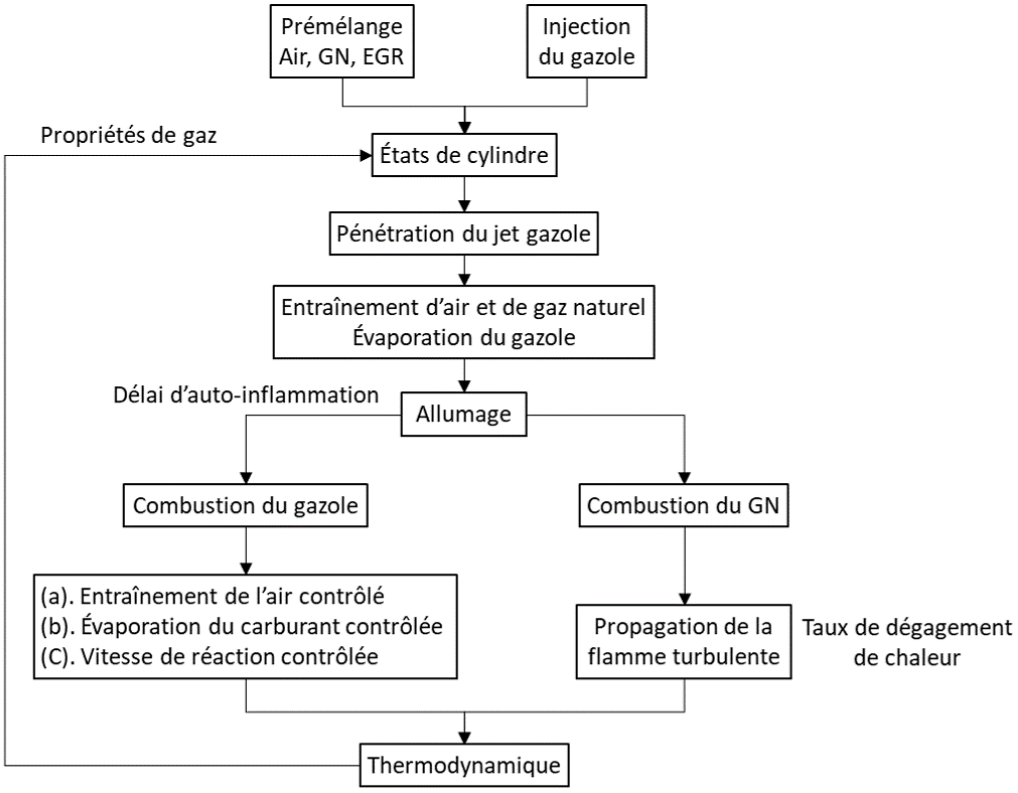


FIGURE 1.21 – Processus de combustion dual fuel [81] (CC BY 4.0).

Pendant la phase de compression, le modèle thermodynamique met à jour la pression et la température du cylindre en résolvant les équations de la première loi et en tenant compte du transfert de chaleur en fonction du degré vilebrequin. Les informations de température sont ensuite utilisées pour la prédiction du délai d'auto-inflammation. À partir de l'instant du premier allumage, le sous modèle de pénétration et de pulvérisation du gazole, le sous-modèle d'entraî-

nement air-GN et les sous-modèles d'évaporation des gouttelettes gazole sont déclenchés pour mettre à jour les variables de pulvérisation. Dans cette approche, l'entraînement du GN dans les paquets avec l'air avant le début de la combustion est permis. L'entraînement du GN est terminé après le début de combustion puisque le mode de combustion du GN est transformé en propagation de flamme turbulente. Une fois l'allumage détecté, il déclenche les sous-modèles pour calculer le dégagement de chaleur du gazole et du GN dans chaque paquet. Le GN entraîné dans les paquets pendant le délai d'auto-inflammation est consommé rapidement après le début de combustion tandis que le gazole continue à brûler grâce à l'oxygène restant dans la charge pauvre.

Johnson et al. [82] ont développé un modèle phénoménologique destiné pour les prévisions de performances et d'émissions dans un moteur dual fuel. Ce modèle est basé sur la modélisation du jet de carburant injecté dans un mélange air-gaz à l'aide d'une approche quasi-dimensionnelle multi zones. Par la suite, un modèle de propagation de flamme est introduit dans le but de modéliser la propagation de flamme.
Le jet développé par la quantité du carburant pilote injectée est subdivisé dans la direction axiale et radiale. Chaque paquet obéi à des phénomènes contrôlant l'évaporation de carburant, l'entraînement d'air, la préparation de mélange, l'auto-inflammation, la combustion et la formation des polluants, comme il est illustré dans la Figure 1.22.

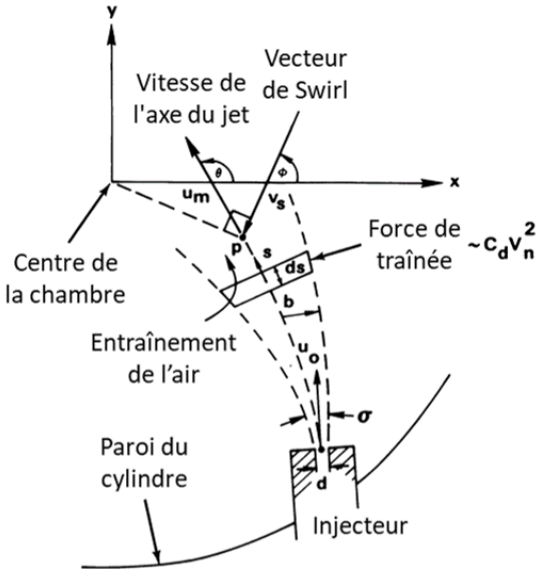


FIGURE 1.22 – Intégration du jet avec l'air ambiant dans la chambre de combustion et la turbulence. (La figure est reproduite de [83] avec la permission de SAE International).

Les zones de combustion initiées par l'auto-inflammation du carburant pilote comportent par la suite comme des sites de combustion à partir desquels se développent des fronts de flamme. Vu que le modèle ne prend pas en considération l'interaction entre les différents sites de combustion, il est supposé que les zones de combustion soient mélangées de manière adiabatique et un seul front de flamme sphérique est supposé se propager à la vitesse de combustion turbulente. De plus, comme l'indique la Figure 1.22-b, l'effet de Swirl est pris en considération en imposant une

vitesse de rotation sur le contenu de la chambre de combustion, ce qui donne une composante de vitesse (axiale et radiale) pour le jet de carburant.
La pulvérisation de carburant pilote est décrite à l'aide d'une approche basée sur le modèle de paquet, qui comprend des sous-modèles pour l'évaporation, le développement et le mélange de carburant, l'allumage et la combustion. Le sous modèle d'évaporation est basé sur le modèle de Borman at Johnson [84] pour le traitement d'une gouttelette séparée prenant en considération l'effet de diffusion de carburant dans un mélange homogène air-gaz. La quantité de carburant consommée à chaque pas de temps est calculée par l'équation 1.22 pour dégager une quantité de chaleur comme indiqué dans l'équation 1.23.

$$\frac{dm_l}{dt} = -\left(\frac{\pi SMD.D_{AB}p_{cyl}}{R_v T_m}\right)\ln\left(\frac{p_{cyl}-p_{v,g}}{p_{cyl}-p_{v,s}}\right)Sh \tag{1.22}$$

$$\frac{dQ_l}{dt} = \pi SMD.\widetilde{k}_m\left(T_g - T_l\right)\frac{Z}{e^Z-1}Nu \tag{1.23}$$

Avec $\widetilde{k}$ la conductivité thermique, T température, D_{AB} coefficient de diffusion, R_v constante de gaz, P_{cyl} pression cylindre, p_v pression partielle de vapeur. Les indices g, m et s désignent le gaz, la couche limite moyenne et la surface des gouttelettes, respectivement. Le facteur $\frac{Z}{e^Z-1}$ dans l'équation 1.23 est un paramètre adimensionnel qui prend en compte la réduction du transfert de chaleur vers la gouttelette en raison de la taille croissante de la couche limite. Le diamètre initial des gouttelettes dans chaque paquet est défini par l'équation 1.24.

$$\begin{aligned}
SMD &= \mathrm{Max}\left(SMD_1, SMD_2\right)\\
\frac{SMD_1}{D} &= 4{,}12\left(Re_l\right)^{0,12}\left(We_l\right)^{-0,75}\left(\frac{\mu_l}{\mu_g}\right)^{0,54}\left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{0,18}\\
\frac{SMD_2}{D} &= 0{,}38\left(Re_l\right)^{0,25}\left(We_l\right)^{-0,32}\left(\frac{\mu_l}{\mu_g}\right)^{0,37}\left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{-0,47}
\end{aligned} \tag{1.24}$$

Avec Re_l et We_l le nombre de Reynolds et Weber du liquide, respectivement. μ_l/μ_g et ρ_l/ρ_g rapport des viscosités dynamiques et des masses volumiques, respectivement (liquide sur mélange gazeux).
Le taux de dégagement de chaleur total et la formation de polluants sont calculés en faisant l'intégrale de leurs valeurs respectivement sur tous les paquets.
Malgré que le moteur dual fuel est considéré comme une meilleure alternative pour le moteur diesel conventionnel [35], son principe de fonctionnement peut induire un problème majeur connu par le cliquetis [85] qui se manifeste lorsque le mélange air-carburant s'auto enflamme spontanément engendrant une onde de pression locale élevée causant des endommagements du moteur.

Le phénomène de cliquetis limite le fonctionnement de certains types de moteur spécialement de type dual fuel, surtout dans le cas où le gaz primaire est caractérisé par un faible indice d'octane ce qui favorise l'auto-inflammation du mélange à forte charge [86]. Pour cette raison plusieurs travaux sont élaborés dans le but de trouver des moyens pour supprimer le cliquetis.

Shao et al. [87] ont exploré plusieurs méthodes pour remédier au problème de cliquetis dans les moteurs à allumage commandé en essayant de le supprimer. Leurs approches convergent à l'augmentation de la vitesse de flamme en intervenant à différents niveaux du processus de combustion soit par l'utilisation de la stratégie d'injection directe, similairement à Wang et al. [88], qui influe énormément la turbulence interne de la chambre de combustion ce qui empêche le cliquetis, ou par la régénération des gaz d'échappement (EGR) qui influe directement sur la richesse dans le cylindre. D'autre chercheurs ont adopté la stratégie d'injection d'eau dans la chambre de combustion [89] afin d'absorber la chaleur et baisser la température dans le cylindre. Ils affirment selon leurs résultats que cette stratégie est une technologie prometteuse contre le problème du cliquetis.

Devant ces stratégies adoptées et dans le but de supprimer le cliquetis dans un fonctionnement dual fuel, la modélisation et la prédiction de cette auto-inflammation indésirable devient primordiale, dans le but de contrôler le fonctionnement et d'appliquer l'une des solutions pour éviter cette auto-inflammation indésirable.

AL-Sened et al. [90] ont mis au point un mécanisme comprenant 9 étapes et 11 espèces chimiques pour développer un modèle de combustion à deux zones, destiné à prédire le phénomène de cliquetis dans les moteurs dual fuel. Ce travail est similaire à celui de Li et al. [91], qui ont étudié l'influence de la température des gaz d'admission sur l'apparition du cliquetis. Leur recherche visait à explorer l'utilisation potentielle de la recirculation des gaz d'échappement (EGR) comme stratégie pour réduire le cliquetis dans ces moteur.
AL-Sened et al. [90] ont montré que leur modèle à deux zones pouvait prédire avec précision le cliquetis sous divers conditions de fonctionnement, offrant ainsi un outil précieux pour l'optimisation des moteurs dual fuel. De manière complémentaire, l'étude de Li et al. [91] a mis en évidence que l'augmentation de la température des gaz d'admission pouvait avancer le moment d'apparition du cliquetis. Ils ont également démontré que la technique d'EGR peut être efficacement utilisée pour atténuer ce phénomène indésirable, en diminuant la température des gaz à l'admission et en améliorant la stabilité de la combustion.

Jelto et al. [92] ont présenté un modèle basé sur le délai d'auto-inflammation pour un moteur dual fuel, ils combinent un modèle 1D de jet avec un modèle d'évaporation pour suivre l'évolution des gouttelettes de carburant dans chaque cellule du jet avant le déclenchement de la combustion qui contrôle le front de flamme et sa vitesse de propagation, dont le but final est la prédiction de l'instant d'auto-inflammation.
Une amélioration a été faite sur le même travail en se servant d'un modèle de combustion prédictif afin de rendre le modèle le plus général possible [80].

En faisant l'analogie avec le moteur à allumage commandé, La et al. [93] ont développé une approche zéro dimensionnelle à deux zones pour la modélisation de la combustion en utilisant une fonction de Wiebe [94] pour la détermination du taux de combustion qui sera utile afin de

déterminer la température des gaz dans la zone imbrûlée qui est primordiale pour la prédiction du cliquetis. L'approche basée sur l'expression d'Arrhenius [74] est largement utilisée à cause de sa simplicité pour laquelle l'instant du cliquetis est défini par le degré vilebrequin pour lequel l'intégral de l'expression d'Arrhenius est égale à l'unité comme indiqué par l'équation 1.25.

$$\frac{1}{C_1 w}\int_{\theta_0}^{\theta_k}\frac{1}{p\left(\theta\right)^{-C_2}\exp\left(\frac{C_3}{T(\theta)}\right)}d\theta = 1 \tag{1.25}$$

Différentes formes des facteurs de cette expression intégrée sont étudiées [95] dans le but d'analyser et de contrôler le début de combustion et les positions pour les pics de pression qui seront utile pour la prédiction du cliquetis. Hann [96] a mis à jour l'expression d'Arrhenius dans le but de prendre en considération des différentes conditions de fonctionnements avec plusieurs compositions de gaz possibles.

5 Modélisation CFD

Dans cette section les modèles multidimensionnels traitant la combustion dans les moteurs à combustion interne (Figure 1.7) seront discutés. La simulations multidimensionnelles a été développée en parallèle avec la simulation thermodynamique afin de pallier au manque de précision de cette dernière causé par les lourdes hypothèses simplificatrices imposées pour diminuer le temps de calcul. La simulation multidimensionnelle est gouvernée généralement par l'ensemble complet des équations de conservation. Afin de se rapprocher au maximum aux phénomènes physiques et chimiques se produisant dans un moteur, certains sous modèles sont introduits spécifiquement pour traiter les phénomènes ayant lieux dans la chambre de combustion de la façon la plus correcte à savoir ; la turbulence, les réactions chimiques, le transfert de chaleur, le développement du jet de carburant, l'allumage, et les interactions avec les parois. Cette intégration de modèles délivre une description spatiale et temporelle assez fine pour le processus de combustion [97].

La révolution et le progrès du traitement informatique d'un côté et la nécessité d'avoir une description fine pour la combustion invitent les chercheurs qui visent l'optimisation et le développement des moteurs à s'aiguiller aux simulations multidimensionnelles (3D), dans le but de prédire l'influence de la géométrie du moteur et des stratégies de contrôle sur les performances du moteur traitant une large gamme de points de fonctionnement.
La simulation CFD est considérée comme l'outil le plus précis et le plus complet pour faire l'étude numérique d'un problème de dynamique de fluide et spécialement pour le traitement de la combustion dans les moteurs. A cet effet, le volume de contrôle concernant le traitement est discrétisé en une grille de calcul, pour qu'il soit constitué d'une multitude de volumes finis, dans lesquels le champ d'écoulement réactif est calculé. Cette étape est contrôlée par des équations aux dérivées partielles en fonction du temps et de trois coordonnées spatiales [98].
Plusieurs travaux ont porté sur l'utilisation de l'outil CFD pour l'analyse des phénomènes dans les moteurs à combustion interne.

Le travail de Payri et al. [99] repose sur l'exploration de différentes chambres de combustion (Figure 1.23) par l'outil CFD. Ce dernier est utilisé pour le calcul de débit dans la phase d'admission et de compression pour un moteur à allumage par compression et à injection directe. Le modèle est validé par une comparaison entre le champ d'écoulement calculé et celui mesuré à partir de la vélocimétrie laser Doppler. Ce qui a permis aux auteurs d'affirmer la précision du modèle pour des angles de vilebrequin autour du point mort haut (PMH), surtout dans les cas des chambres de combustion à faible turbulence contrairement aux cas où les vitesses de turbulence sont intenses à cause de l'effet de Squich.

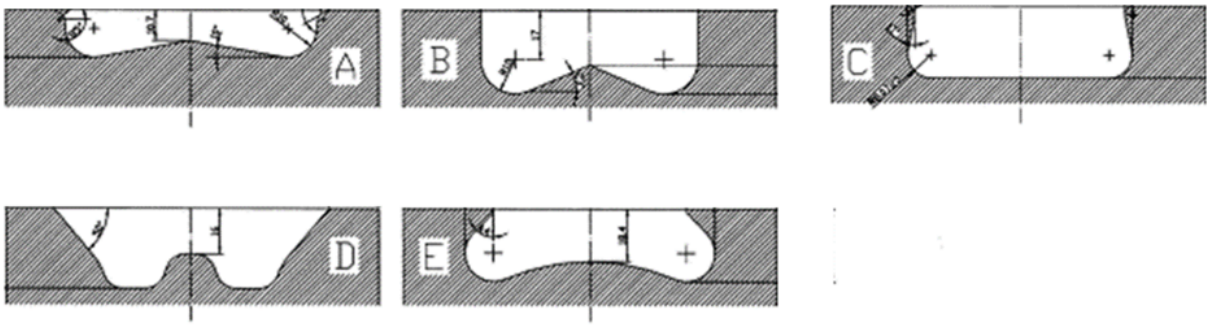


FIGURE 1.23 – Formes de bol de la chambre de combustion. (La figure est reproduite de [99] avec la permission de Elsevier).

Après validation, les caractéristiques d'écoulement à l'intérieur du cylindre équipé de différentes configurations de piston ont été comparées. Pour cela, des calculs complets des courses d'admission et de compression ont été effectués dans des conditions de fonctionnement réalistes et les champs de vitesse et de turbulence moyens obtenus dans chaque chambre de combustion ont été analysés en détail. La Figure 1.24 présente le champ de la vitesse turbulente au PMH.

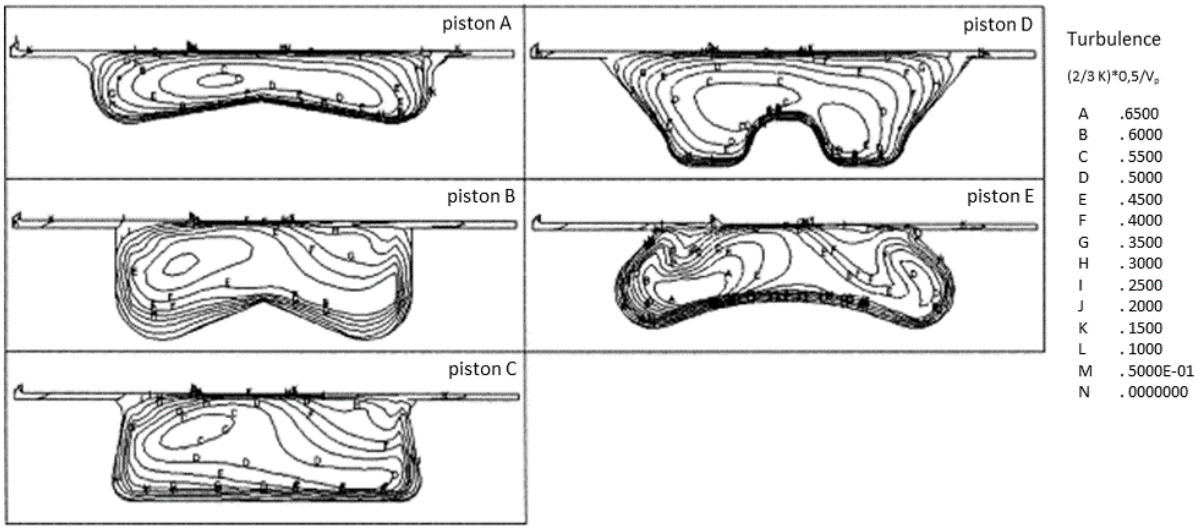


FIGURE 1.24 – Influence de la forme du bol sur la combustion. (La figure est reproduite de [99] avec la permission de Elsevier).

Les résultats ont confirmé que la géométrie du piston avait peu d'influence sur le débit dans le cylindre pendant la course d'admission et la première partie de la course de combustion. Cependant, la forme du bol joue un rôle important près du PMH et au début de la course de détente en contrôlant à la fois la moyenne de l'ensemble et les champs de vitesse de turbulence.

Le compromis entre l'amélioration des performances des moteurs et la diminution des suies et de NO_x devient plus compliqué avec la nouvelle tendance d'utilisation des carburants alternatifs causée par l'épuisement des combustibles fossiles. Pour cette raison l'optimisation des moteurs a fait depuis toujours une actualité chez les chercheurs et les développeurs qui visent l'optimisation des cas de fonctionnement en contrôlant la géométrie de la chambre de combustion, la stratégie d'injection, le type de carburant, le mode de combustion, l'utilisation de l'EGR, etc.
Le travail de Yousefi et al. [100] propose l'amélioration de la combustion dans les moteurs dual fuel. Il se concentre sur l'impact de la stratégie d'injection du gazole fractionnée sur le rendement thermique et les émissions d'un moteur dual fuel ammoniac/gazole (DFAG) sous des conditions de charge moyenne. La méthodologie adoptée implique l'utilisation de simulations numériques CFD pour évaluer les performances du moteur. Ces simulations intègrent des modèles de combustion détaillés, prenant en compte la cinétique chimique et la turbulence pour capturer les interactions complexes entre l'ammoniac et le gazole. Les résultats de l'étude révèlent que l'utilisation de la stratégie d'injection du gazole fractionnée améliore significativement le rendement thermique du mode de combustion DFAG par rapport à une seule injection du gazole. De plus, cette stratégie réduit considérablement les émissions d'ammoniac non brûlé, contribuant ainsi à une réduction potentielle des impacts environnementaux.

6 Méta-modélisation des performances et émissions

Les méta-modèles sont des modèles mathématiques simplifiés construits à partir de données générées par des modèles plus complexes, tels que les simulations numériques. Les méta-modèles peuvent être utilisés pour réduire le temps de calcul nécessaire à l'analyse de systèmes complexes, tels que les moteurs à combustion interne.
Dans le cadre de la modélisation de la combustion dans les moteurs à combustion interne, les méta-modèles peuvent être utilisés pour prédire les performances du moteur en fonction de divers paramètres de conception, tels que la forme et la taille de la chambre de combustion, les caractéristiques de l'injection de carburant et les paramètres d'allumage.
La construction d'un méta-modèle pour la combustion dans les moteurs peut se faire en plusieurs étapes. Tout d'abord, une série de simulations doit être effectuée en utilisant un modèle de combustion détaillé. Ensuite, les résultats de ces simulations seront utilisés pour entraîner le méta-modèle à l'aide de techniques d'apprentissage automatique.
Une fois que le méta-modèle est construit, il peut être utilisé pour prédire les performances du moteur en fonction de différents paramètres de conception. Cela peut être particulièrement utile lors de la phase de conception du moteur, car cela permet de réaliser rapidement des simulations de conception pour évaluer les performances du moteur à un coût moindre que les simulations

détaillées.

Les méta-modèles ont joué un rôle important dans le cadre de la modélisation, le contrôle et l'optimisation pour les moteurs à combustion interne en générale. Ils sont considérés comme des modèles approximatifs construits à la base des résultats expérimentaux ou à partir de simulations numériques, en utilisant des techniques d'interpolation ou d'extrapolation. Parmi les techniques d'interpolation les plus couramment utilisées, on peut trouver la RBF (*Radial Basis Function*), le Krigeage et les réseaux de neurones artificiels (RNA). Ces techniques permettent de construire des modèles de combustion précis et rapides, permettant ainsi de réaliser des analyses paramétriques, d'optimiser la conception des moteurs et d'accélérer le processus de développement des produits. Ce volet s'intéresse à la modélisation de la combustion dans les moteurs à combustion interne à l'aide des méta-modèles, en se concentrant plus particulièrement sur les techniques d'interpolation RBF, Krigeage et RNA.

Bahri et al. [101] ont développé une méthode de modélisation en temps réel du cliquetis dans les moteurs à combustion interne utilisant une combustion homogène à charge stratifiée (HCCI). Les auteurs utilisent des réseaux de neurones artificiels pour prédire la probabilité de cliquetis en temps réel à partir de données de capteurs moteur, ce qui permet de réguler la combustion pour éviter les dommages au moteur. Les résultats de l'étude montrent que la méthode proposée permet de détecter avec précision le cliquetis et de réguler efficacement la combustion. La méthode peut être utilisée pour améliorer l'efficacité et la durabilité des moteurs à combustion interne dans les applications automobiles et industrielles.

Aliramezani et al. [102] ont présenté une méthode de modélisation pour prédire les performances et les émissions de NO_x, en utilisant une machine à vecteurs de support (SVM). Les SVM sont une technique d'apprentissage automatique qui peut être utilisée pour prédire les résultats en fonction des entrées comme l'indique la Figure 1.25. Les auteurs ont utilisé les données d'essais moteur pour entraîner et valider le modèle SVM. Les données comprenaient les variables d'entrée telles que la vitesse de rotation, la charge du moteur, la quantité de carburant injecté et la température de l'air d'admission, ainsi que les variables de sortie telles que la puissance du moteur et les émissions de NO_x. Les résultats ont montré que le modèle SVM est capable de prédire avec précision la puissance du moteur et les émissions de NO_x, en utilisant les variables d'entrée sélectionnées. Les auteurs ont également utilisé le modèle SVM pour concevoir un système de contrôle de la combustion, qui peut être utilisé pour optimiser les performances du moteur et minimiser les émissions de NO_x.

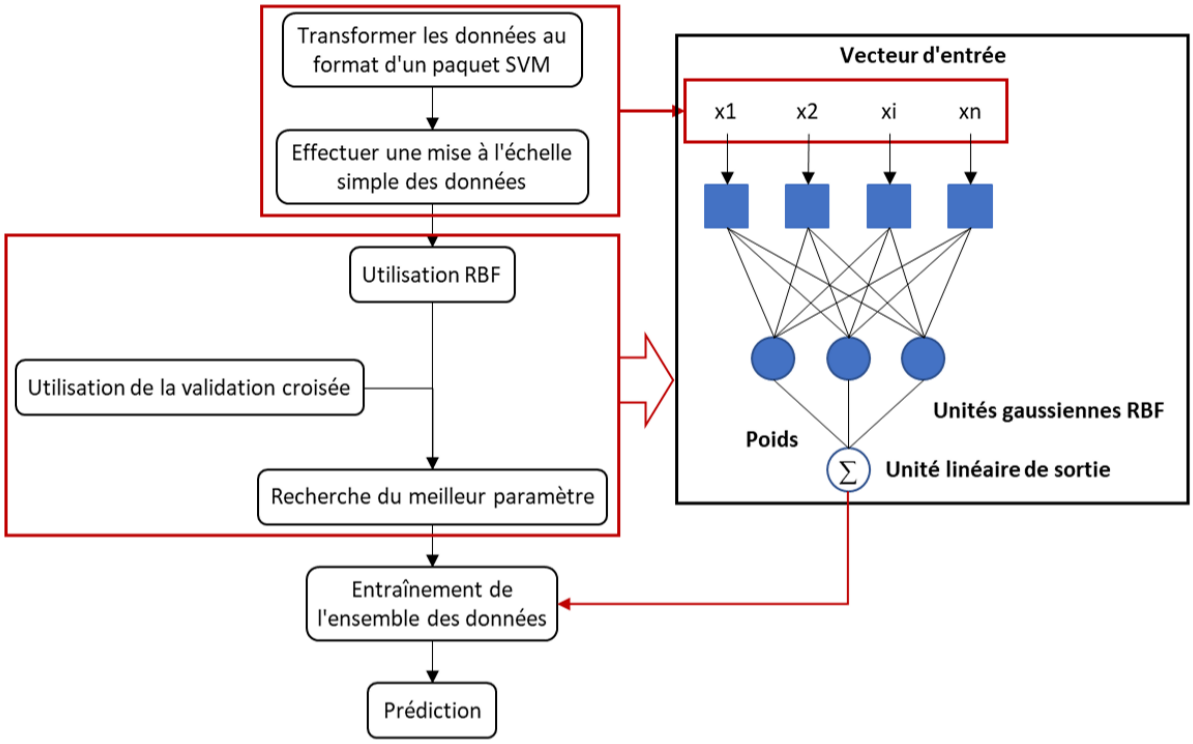


FIGURE 1.25 – Schéma d'apprentissage du modèle SVM.

Une méthode de modélisation et de contrôle prédictif basée sur des données d'entrée-sortie a été présentée par Irdmousa et al. [103] pour le contrôle de la combustion dans un moteur dual fuel. Les auteurs ont collecté des données d'entrée-sortie à partir d'un moteur dual fuel en fonctionnement, en utilisant différentes configurations. Ils ont utilisé ces données pour développer un modèle de prédiction de la combustion dual fuel basé sur les réseaux de neurones. Ce modèle a ensuite été utilisé pour prédire la combustion en temps réel et pour ajuster les paramètres de contrôle du moteur afin de maintenir une combustion efficace et stable. Les résultats ont montré que la méthode proposée permettait de prédire la combustion en temps réel avec une précision suffisante pour le contrôle prédictif. Les auteurs ont également montré que le contrôle prédictif basé sur les données d'entrée-sortie était plus efficace que les méthodes de contrôle classique pour maintenir une combustion dual fuel stable et efficace.

Norouzi et al. [104] ont présenté une méthode de prédiction des performances et des émissions de NO_x des moteurs à allumage par compression basée sur l'apprentissage automatique et le contrôle itératif. La méthode utilise un contrôle itératif de type PD (Proportionnel-Dérivé) pour ajuster les paramètres de contrôle en temps réel, combiné avec un modèle de prédiction des émissions de NO_x basé sur les réseaux de neurones. Les auteurs ont collecté des données de fonctionnement d'un moteur et ont entraîné un modèle de prédiction des performances et des émissions de NO_x à l'aide de réseaux de neurones, comme il est défini par l'équation 1.26.

$$X_{ss} = W^T \overline{u} + b \tag{1.26}$$

Avec $X_{ss} = [NO_x, BMEP_{ss}]^T$, les matrices W et b sont obtenues en résolvant l'algorithme RNA. le vecteur $\overline{u}$ est l'espace de caractéristiques polynomiales basé sur une stratégie de réduction de l'ordre du modèle basée sur la corrélation.

Wu et al. [105] ont développé une méthode d'utilisation de réseaux de neurones artificiels pour modéliser la qualité d'air qui passe à travers un moteur VVT (*Variable Valve Timing*) de 2,4 litres. Les auteurs ont collecté des données expérimentales en utilisant un banc d'essai pour mesurer la quantité d'air qui passe à travers le moteur VVT pour différentes conditions de fonctionnement. Les données ont ensuite été utilisées pour entraîner un réseau de neurones artificiels en utilisant un algorithme d'apprentissage supervisé comme l'indique la Figure 1.26. Les auteurs ont sélectionné un réseau de neurones multicouche pour leur modèle, qui utilise la méthode de rétropropagation pour ajuster les poids et les biais du réseau en fonction des données d'entrée. Ils ont également utilisé une fonction d'activation sigmoïde pour modéliser la non-linéarité de la relation entre la quantité d'air et les variables d'entrée telles que la vitesse du moteur, la charge et la température.

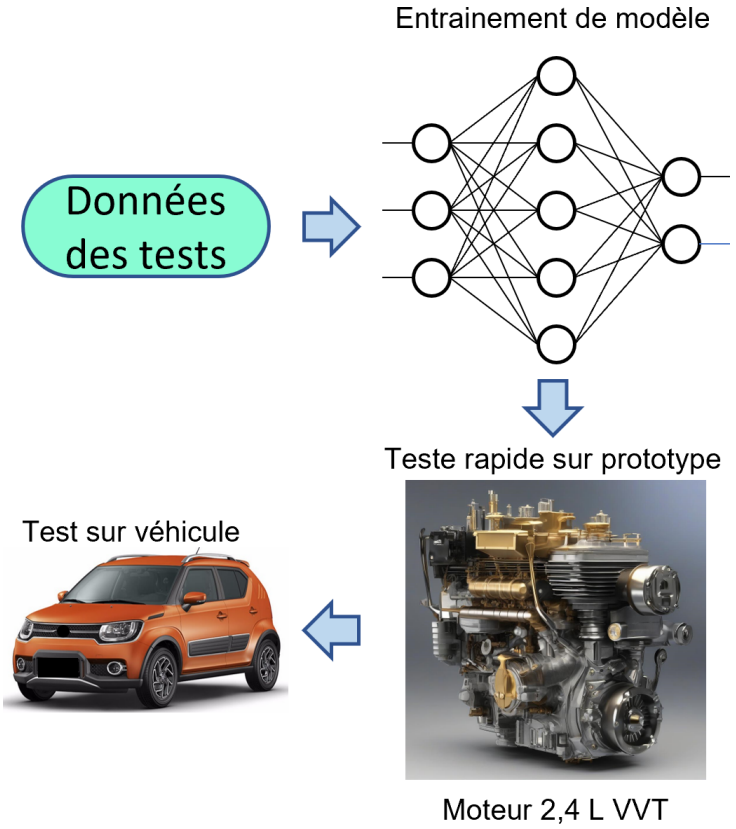


FIGURE 1.26 – Construction et validation du modèle de réseau neuronal représentant le débit d'air dans un moteur 2,4 litres VVT. (La figure est reproduite de [105] avec la permission de SAE International).

Les méta-modèles peuvent fournir des prévisions précises pour les performances et les émissions polluantes des moteurs à combustion interne. Cependant, ils nécessitent une quantité importante de données d'apprentissage pour fournir des prévisions précises, ce qui nécessite un

traitement particulier et une optimisation de la phase d'apprentissage.

7 Conclusion

La modélisation de la combustion dans les moteurs est un domaine de recherche en constante évolution, qui a connu des avancées significatives grâce aux modèles thermodynamiques et aux modèles CFD. Les modèles thermodynamique 0D permettent de prédire les performances globales du moteur, telles que la consommation de carburant, la puissance et le couple, en utilisant des paramètres de contrôle du système tels que le taux de compression, le débit de carburant et l'instant d'injection. Ces modèles, qui intègrent les effets de la dynamique des fluides, sont capables de prédire les champs de pression et de température dans les différents composants du moteur, tels que la chambre de combustion. Les modèles CFD, basés sur des simulations numériques du comportement fluide-dynamique, permettent une représentation détaillée des écoulements turbulents, des phénomènes de combustion et des transferts de chaleur dans des géométries complexes du moteur.

Malgré les progrès accomplis dans le domaine de la modélisation de la combustion dans les moteurs à combustion interne, il reste des défis importants à relever pour améliorer la précision et la validité des modèles, notamment en prenant en compte les interactions complexes entre les différents phénomènes physiques impliqués dans la combustion, tels que les échanges thermiques, les transferts de masse et les phénomènes de turbulence. De plus, la modélisation doit être capable de tenir compte de l'influence des paramètres de contrôle du système, tels que la stratégie d'injection, le débit de carburant et le taux de compression, sur les performances et les émissions du moteur. Enfin, il est essentiel de considérer l'impact de la variabilité des carburants, tels que la qualité, le mélange et la composition, sur les performances et les émissions du moteur, ainsi que le mode de combustion qui impact directement la nature de la combustion dans le cylindre. Dans ce contexte, une parcimonie des études traitant le mode de combustion dual fuel, en termes de modélisation et d'optimisation, est remarquable. Ce fait indéniable justifie l'objet de cette thèse, qui se concentre principalement sur le mode de combustion dual fuel.

Le Tableau 1.2 résume les avantages, les limitations et les applications pour chaque type de modélisation expliqué précédemment.

TABLE 1.2 – Récapitulatif des avantages, des limitations et des applications des différents types de modélisation.

Modèle	**Points forts**	**Points faibles**	**Utilisations**
Modèles mathématique	• Temps de Calcul : modèle temps réel • Facilité d'utilisation et de mise en œuvre	• Représentativité physique inexistante • Identification pour chaque point de fonctionnement moteur	Outil pour le contrôle moteur
Modèles 0D à une zone	• Temps de Calcul • Description de certains phénomènes physiques • Capacité d'interpolation entre points de fonctionnement moteur • Prise en compte d'une zone de mélange	• Non prise en compte des nouvelles technologies : Multi-injection / EGR / Mode de combustion HCCI, PCCI • Extrapolation peut fiable • Modèle de combustion prémélangée difficile à mettre en œuvre • Lacune dans la représentation de certains phénomènes	Outil pour la conception
Modèle 0D à deux zones	• Description de nombreux phénomènes physiques • Capacité d'interpolation entre points de fonctionnement moteur • Prise en compte d'une zone de mélange	• Non prise en compte des nouvelles technologies : Multi-injection / EGR / Mode de combustion HCCI, PCCI. • Modèle de combustion prémélangée difficile à mettre en œuvre • Limitations pour les combustions dans la zone faible charge • Paramétrage du modèle difficile	Outil pour la conception
Modèles 0D multizones	• Description de nombreux phénomènes physiques • Description détaillée du jet de carburant • Prise en compte des interactions jet-parois et jet-aéro interne • Prise en compte des stratégies multi-injection • Capacité à modéliser les combustions non conventionnelles de type HCCI et PCCI • Prise en compte des taux de dilution (EGR)	• Temps de calcul relativement conséquent • Modèle de combustion très difficile à mettre en œuvre • Paramétrage du modèle très difficile	Outil de recherche
Modèles CFD	• Une grande partie de la physique et de la chimie de haut niveau est prise en considération • Le suivi de la chimie, la turbulence, la température, et la pression locale dans la chambre de combustion • La prise en considération des propriétés géométriques	• Coût de calcul élevé • La détermination des états thermodynamiques globaux pendant le cycle du moteur pour une variété de conceptions de moteurs et de conditions de fonctionnement est facilement obtenue à partir des simulations thermodynamiques et serait peu pratique à partir des simulations multidimensionnelles	Outil de recherche et d'optimisation

Chapitre 2

Modélisation 0D des moteurs à combustion interne

Objectifs

Le présent chapitre se concentre sur le développement d'un modèle prédictif 0D pour un moteur dual fuel. Il est subdivisé en trois sections principales. La première section offre une vue d'ensemble sur les différents modèles existants traitant principalement des aspects phénoménologiques présents dans la chambre de combustion. La deuxième section se concentre sur le développement d'un nouveau modèle prédictif 0D dédié à la combustion dans les moteurs à combustion interne fonctionnant en mode dual fuel utilisant un gaz primaire composé d'un mélange de gaz naturel (GN) et d'hydrogène (H_2) avec différents pourcentages. Enfin, la dernière section présente les principaux résultats obtenus ainsi que leurs discussions.

Introduction

L'amélioration et l'optimisation des moteurs à combustion interne dépendent directement de la compréhension précise des phénomènes se produisant, en particulier, dans le cylindre du moteur, ainsi que du temps et du coût nécessaires pour évaluer une nouvelle configuration lors de l'exploration. Dans ce contexte, différentes approches et méthodes de modélisation ont été développées, chacune se caractérisant par un coût d'évaluation et un niveau de précision spécifiques.

1 Généralités sur les modèles de combustion

Les modèles de combustion 0D thermodynamiques se fondent sur les principes de la thermodynamique ainsi que des relations semi-empiriques. Ces modèles sont également désignés sous le terme de "modèle système" [68]. Leur attrait réside dans la simplicité relative de leur mise en œuvre et dans la rapidité qu'ils offrent en matière de vitesse de calcul et de précision. Grâce aux outils de calcul performants disponibles, ces modèles peuvent être exploités pour simuler en temps réel la combustion dans un moteur, ce qui constitue un avantage significatif pour leur utilisation dans le domaine du contrôle moteur. Dans ce cadre, la composition des gaz présents dans le cylindre est considérée comme homogène en termes de temps et d'espace tout au long du cycle.

1.1 Les modèles de dégagement de chaleur

Le dégagement de chaleur, un paramètre crucial dans le fonctionnement d'un moteur, représente la quantité de chaleur générée lors de la combustion du carburant. Cette mesure est étroitement liée à la variation de la fraction massique x du carburant brûlée par rapport à la rotation vilebrequin. La formulation du dégagement de chaleur sans pertes (Q_{in}) s'exprime conformément à la corrélation 2.1 :

$$Q_{in} = xM_lPCI_l \tag{2.1}$$

Où M_l la masse de carburant et PCI_l le pouvoir calorifique inférieur du carburant brûlé.

En théorie, la fraction massique du carburant brûlé est modélisée entre de 0 à 100%, en supposant l'absence de pertes, bien que cette hypothèse soit clairement éloignée de la réalité. Ainsi, il a été impératif de développer une formulation mathématique permettant de décrire de manière précise l'évolution de la fraction massique du carburant à l'intérieur du cylindre.
L'approche de Wiebe implique la représentation de l'évolution de la fraction de carburant brûlé et de sa dérivée en fonction de l'angle du vilebrequin en utilisant une fonction de type exponentielle, qui est ensuite appliquée au calcul des performances du moteur [45]. La fonction originelle de Wiebe peut être formulée de la manière suivante selon les équations 2.2 et 2.3.

$$x = 1 - \exp\left(-6{,}908\left(\frac{\phi}{\phi_d}\right)^{m+1}\right) \tag{2.2}$$

Et sa dérivée :

$$x = \frac{dx}{d\phi} = \frac{6{,}908\,(m+1)}{\phi_d}\left(\frac{\phi}{\phi_d}\right)^m \exp\left(-6{,}908\left(\frac{\phi}{\phi_d}\right)^{m+1}\right) \tag{2.3}$$

Le facteur 6,908 exprime l'hypothèse d'une fraction de carburant brûlé de 99% au cours d'un cycle. ϕ la mesure de l'angle de rotation du vilebrequin pris à partir du début de la combustion. ϕ_d la durée totale du processus de combustion. Le paramètre m est un paramètre d'ajustement du modèle par rapport aux données expérimentales.

Pendant une période considérable, le modèle 0D de Wiebe a été largement employé pour simuler les moteurs à allumage par compression. Cependant, ses limites ont été mises en évidence du fait qu'il ne prend pas en compte la période de prémélange dans le cycle de combustion. De plus, certains paramètres tels que m et le coefficient pré-exponentiel nécessitent un lissage afin de correspondre aux données expérimentales. Récemment, l'utilisation de la fonction de Wiebe s'est restreinte, se concentrant principalement sur la modélisation des moteurs conventionnels à allumage commandé.

Des chercheurs [106], visant l'élimination de la nécessité de multiples coefficients de lissage associés aux modèles de Wiebe, ont introduit un modèle novateur basé sur l'hypothèse que le mélange fuel/air, et par conséquent la combustion, est proportionnel à l'énergie cinétique turbulente moyenne associée au taux d'injection du carburant. De plus, la décroissance de l'énergie turbulente dans le temps est proportionnelle à l'énergie cinétique totale du carburant injecté. Il est à noter que ce modèle prédit de manière très précise la tendance du dégagement de chaleur, à condition qu'il n'y ait pas d'impact du jet sur la tête du piston, ce qui constitue une limitation potentielle.
Plusieurs approches se dérivent de celle de Wiebe en se basant sur les mêmes principes :

A- Approche de POUGATCHEV :

Parmi les approches les plus notoires des doubles fonctions de Wiebe, citons notamment l'approche de Pougatchev, qui utilise une fonction de distribution de loi gamma pour caractériser le dégagement de chaleur dans un moteur à allumage par compression. Cette méthode repose sur une expression analytique comprenant deux fonctions de distribution de loi gamma modifiée [107]. L'approche de Pougatchev se résume aux expressions suivantes, respectivement pour le taux du carburant brûlé (équation 2.4) et sa vitesse de combustion (équation 2.5).

$$x = x_{1max}\left[1 - \exp\left(-0{,}5\left(\frac{\phi}{\phi_1}\right)^2\right)\right] + x_{2max}\left[1 - \exp\left(-0{,}5\left(\frac{\phi}{\phi_2}\right)^2\right)\right] \tag{2.4}$$

$$\frac{dx}{d\phi} = \frac{x_{1max}}{\phi_1}\left(\frac{\phi}{\phi_1}\right)\exp\left(-0{,}5\left(\frac{\phi}{\phi_1}\right)^2\right) + \frac{x_{2max}}{\phi_2}\left(\frac{\phi}{\phi_2}\right)\exp\left(-0{,}5\left(\frac{\phi}{\phi_2}\right)^2\right) \tag{2.5}$$

Dans ces équations, x_{1max} et x_{2max} représentent les fractions maximales de chaleur dégagée

respectivement au cours des phases de prémélange et de diffusion. ϕ_1 et ϕ_2 les angles au cours desquels ces maxima apparaissent, respectivement. Ce modèle présente des limites en termes de prédictibilité, car il ne met pas en évidence des corrélations entre les paramètres moteurs et les coefficients mentionnés précédemment. De plus, il convient de noter que ce modèle ne peut être appliqué que pour des moteurs dont le diagramme indicatif a été préalablement établi.

B- Approche de GHOJEL :

Les limites de prédicibilité du modèle de Pougatchev ont été contournées par l'approche de Ghojel dans le but de développer un modèle prédictif [108]. Selon ce modèle, le taux de carburant brûlé en fonction de l'angle vilebrequin est donné par l'équation 2.6.

$$x = A_1 \left[1 - \exp\left(\frac{m_1}{(m_1+1)}\right)\left(\frac{\phi}{\triangle\phi_1}\right)^{m_1+1}\right] + A_2 \left[1 - \exp\left(\frac{m_2}{(m_2+1)}\right)\left(\frac{\phi}{\triangle\phi_2}\right)^{m_2+1}\right] \tag{2.6}$$

Et la vitesse de combustion par l'équation 2.7.

$$\frac{dx}{d\phi} = \frac{m_1 A_1}{\triangle\phi_1}\left(\frac{\phi}{\triangle\phi_1}\right)^{m_1}\left[\exp\left(\frac{m_1}{(m_1+1)}\right)\left(\frac{\phi}{\triangle\phi_1}\right)^{m_1+1}\right] + \frac{m_2 A_2}{\triangle\phi_2}\left(\frac{\phi}{\triangle\phi_2}\right)^{m_2}\left[\exp\left(\frac{m_2}{(m_2+1)}\right)\left(\frac{\phi}{\triangle\phi_2}\right)^{m_2+1}\right] \tag{2.7}$$

Avec A_1, A_2, m_1, m_2, $\triangle\phi_1$, et $\triangle\phi_2$ des constantes du modèle. Le modèle a démontré une bonne prédictibilité, mais les coefficients qui y sont inclus requièrent un lissage par rapport aux données expérimentales, Ghojel a néanmoins fixé la valeur de $\triangle\phi_1$ ($\triangle\phi_1 = 3°$), les autres coefficients devant être déterminés expérimentalement.

C- Approche de MIYAMOTO :

L'approche de Miyamoto [46] implique la combinaison de deux fonctions de Wiebe originelles, résolues en termes d'énergie dégagée plutôt que du taux de carburant brûlé en fonction de l'angle de vilebrequin balayé. Ainsi, Miyamoto exprime le taux d'énergie dégagée par l'équation 2.8.

$$\frac{dq}{d\phi} = \frac{6{,}9\ Q_p\,(m_p+1)}{Q_p}\left(\frac{Q}{Q_p}\right)^{m_p}\exp\left(-6{,}9\left(\frac{Q}{Q_p}\right)^{m_p+1}\right) + \frac{6{,}9\ Q_d\,(m_d+1)}{Q_d}\left(\frac{Q}{Q_d}\right)^{m_d}\exp\left(-6{,}9\left(\frac{Q}{Q_d}\right)^{m_d+1}\right) \tag{2.8}$$

Avec Q_p et Q_d la quantité d'énergie dégagée au cours des phases de prémélange et de diffusion, respectivement. Les autres paramètres sont ceux trouvés dans la fonction originelle de Wiebe avec les indices p et d indiquant les phases de la combustion correspondante.

D- Approche de WATSON :

Le modèle de Watson [48] est une relation empirique qui vise à décrire le dégagement de chaleur utilisant deux fonctions de Wiebe. La relation est décrite par l'équation 2.9.

$$x_1 = \beta\left(1 - \exp\left[-a_p\left(\frac{\phi - \phi_{comb}}{\triangle\phi}\right)^{m_p+1}\right]\right) + (1-\beta)\left(1 - \exp\left[-a_d\left(\frac{\phi - \phi_{comb}}{\triangle\phi}\right)^{m_d+1}\right]\right) \tag{2.9}$$

Où a_p, m_p, a_d et m_d sont les coefficients de pondération du modèle. β le rapport de quantité de carburant brûlé (proportionelle à la masse injectée de carburant) au cours de la phase de prémélange par rapport à la quantité de carburant brûlé au cours du cycle complet.
Le modèle de Watson présente l'avantage notable de pouvoir intégrer les conditions ambiantes, les paramètres de suralimentation, et d'autres paramètres moteurs dans sa description du dégagement de chaleur. De plus, l'utilisation de coefficients de pondération préétablis facilite le processus de lissage du modèle par rapport aux données expérimentales.

1.2 Les modèles 0D de transfert thermique

La chaleur dégagée par le carburant injecté subit des pertes au cours du processus de combustion dans le moteur. Ces pertes peuvent être attribuées à plusieurs facteurs, notamment les transferts convectifs forcés et la conduction de chaleur vers les parois du cylindre. Ces mécanismes de perte jouent un rôle crucial dans la modélisation précise du dégagement de chaleur et nécessitent une prise en compte appropriée pour améliorer la représentation réaliste du processus de combustion dans les simulations. La quantité de chaleur totale Q_{tot} réellement dégagée dans le cylindre du moteur est donc, avec prise en compte de ces chaleurs, égale à (équation 2.10) :

$$Q_{tot} = Q_{in} - Q_{loss} \tag{2.10}$$

Avec Q_{in} la quantité de chaleur équivalente à la quantité du carburant introduite dans le cylindre. Q_{loss} exprime les pertes. Ces pertes ont été le sujet de nombreuses recherches, et différentes expressions les définissant ont été élaborées, allant de coefficients constants à des formulations plus complexes. En général, ces pertes sont exprimées au moyen d'une expression de type (équation 2.11) :

$$Q_{loss} = Ah_c \left(T_{cyl} - T_{parois}\right) \tag{2.11}$$

Avec A la surface instantanée d'échange. h_c le coefficient de transfert de chaleur. T_{cyl} et T_{parois} les températures dans le cylindre et la température des parois, respectivement. La surface instantanée d'échange est fonction de la cinématique du groupe bielle-manivelle.
Parmi les expressions les plus utilisées pour la détermination du coefficient de transfert thermique se trouve celle de Woschni [109] décrite par l'équation 2.12.

$$h_c = 3{,}26 D^{-0,2} P_{cyl}^{0,8} T_{cyl}^{-0,55} w^{0,8} \tag{2.12}$$

Pour laquelle, D le diamètre du cylindre. P_{cyl} et T_{cyl} la pression et la température dans le cylindre, respectivement. w la vitesse des gaz dans le cylindre. Elle dépend du temps du cycle et s'exprime par l'équation 2.13.

$$w = C_1 U_p + C_2 \frac{V_d T_r}{P_r V_r} \left(P_{cyl} - P_{ent}\right) \tag{2.13}$$

Avec P_r, T_r et V_r la pression, la température et le volume dans le cylindre au début de la combustion, respectivement. U_p la vitesse moyenne du piston. V_d le volume déplacé. C_1 et C_2

des coefficients pris dépendamment du temps du cycle.
Divers auteurs ont contribué avec des modèles de transfert thermique. Le modèle de Hohenberg [110], décrit par l'équation 2.14, propose une amélioration du modèle de Woschni en simplifiant celui-ci. Il est cependant important de noter que cette amélioration ne prend pas en compte les différents temps du cycle, ce qui peut être une limitation selon les exigences spécifiques de la modélisation thermique.

$$h_c = 130 P_{cyl}^{-0,8} V_d^{-0,06} T_{cyl}^{-0,4} \left(U_p + 1,4\right)^{0,8} \tag{2.14}$$

1.3 Les sous modèles phénoménologiques

Dans ces types de modèles, des détails relatifs à différents phénomènes se produisant pendant la combustion sont intégrés à l'équation de base de la conservation de l'énergie. Les modèles phénoménologiques de combustion sont pratiques pour décrire la combustion dans les moteurs et permettent également de réaliser des études paramétriques. Ceci s'explique par le fait que le processus d'injection, qui peut être relativement bien simulé par une approche phénoménologique, exerce un effet prédominant sur la formation du mélange réactif et le processus subséquent de combustion.
Ces modèles sont généralement subdivisés en sous-modèles 0D couplés entre eux, chacun modélise un des phénomènes se produisant à chaque cycle. Les principaux sous-modèles comprennent généralement les aspects suivants : l'injection et la pulvérisation, l'évaporation, le délai d'auto-inflammation, et les sous-modèles d'émissions. Cette approche modulaire permet une représentation plus détaillée et précise des différentes étapes du processus de combustion dans les moteurs.

1.3.1 Injection et pulvérisation

L'injection et la pulvérisation ont fait l'objet de nombreuses études dans la recherche sur les moteurs à combustion par compression. En effet, il a été démontré que la finesse de la pulvérisation influence la qualité de la combustion dans le cylindre. Ainsi, plus les gouttelettes du carburant pulvérisé sont fines, plus la distribution des gouttelettes sera homogène dans le cylindre, favorisant ainsi la probabilité d'une combustion complète du mélange air/carburant.
En général, comme illustré dans la Figure 2.1, l'injection du carburant dans le cylindre peut être caractérisée par :

- La pénétration du jet liquide ou la longueur de transition (L_b) dans la chambre.
- La pénétration du mélange vapeur-liquide (S).
- L'angle ou demi-angle du jet (2θ ou θ).
- La finesse d_{32} (SMD - diamètre moyen des gouttelettes pulvérisées ou diamètre moyen de Sauter).

La longueur de transition (*Breakup length*) caractérise la phase initiale du jet, pendant laquelle le liquide injecté forme une masse uniforme se déplaçant le long de l'axe d'injection. Au-delà d'un certain temps appelé temps de *Breakup* (t_b), la phase liquide se décompose en fines gouttelettes caractérisées par le diamètre moyen de Sauter. Ces gouttelettes s'évaporeront

ensuite en raison de la température élevée à l'intérieur du cylindre. La pénétration du mélange vapeur-liquide (S) représente la distance parcourue après le *Breakup* du carburant injecté. La détermination de l'angle du jet revêt également une importance cruciale, car il est essentiel de savoir si le jet atteindra ou non les parois du cylindre afin d'évaluer d'éventuelles interactions. La finesse de pulvérisation est également d'une importance avérée, car elle dépend de la cinétique de combustion du carburant liquide dans la chambre de combustion. Les travaux de Dos Santos et Le Moyne [111] fournissent une revue des différentes corrélations caractérisant les paramètres énoncés ci-dessus.

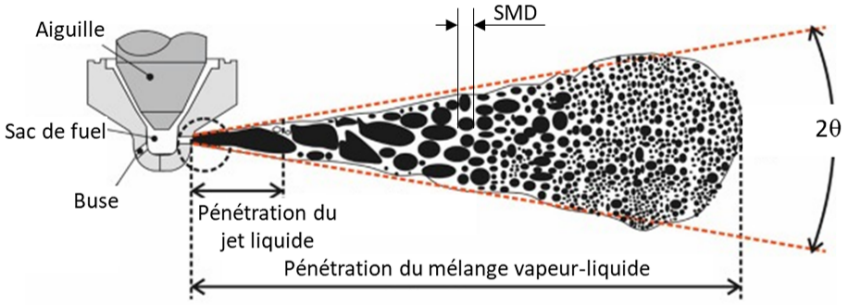


FIGURE 2.1 – Paramètres du jet liquide injecté. (La figure est reproduite de [112] avec la permission de Elsevier).

A) Pénétration du jet liquide (L_b) et pénétration du mélange vapeur-liquide (S) :

La plupart des relations empiriques qui décrivent la pénétration du jet, telles qu'elles sont présentées dans la littérature, partagent des similitudes principalement en ce qui concerne les facteurs qui influent sur cette dernière. Ces paramètres incluent notamment la masse volumique du carburant, la pression d'injection, le diamètre des buses d'injecteurs et la pression de l'air à l'intérieur du cylindre. Le Tableau 2.1 récapitule les différentes corrélations existantes dans la littérature concernant la pénétration du jet.

TABLE 2.1 – Longueur de pénétration du jet selon différentes corrélations.

Dénomination du modèle	**Corrélation pour la pénétration du jet liquide (L_b) / Pénétration du mélange vapeur-liquide (S)**	**Référence**
Dent	$S = 3{,}07\left(\frac{\triangle P}{\rho_g}\right)^{0,25}(d_0 t)^{0,5}\left(\frac{294}{T_g}\right)^{0,25}$	[113]
Hiroyasu	$L_b = 7d_0\left(1+0{,}4\frac{r_0}{d_0}\right)\left(\frac{P_g}{\rho_l V_{inj}^2}\right)^{0,05}\left(\frac{l_0}{d_0}\right)^{0,13}\left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{0,5}$ $S = 0{,}39\left(\frac{2\triangle P}{\rho_l}\right)^{0,5} t$; pour $0 < t < t_b$ $S = 2{,}95\left(\frac{\triangle P}{\rho_g}\right)^{0,25}(d_0 t)^{0,25}$; pour $t > t_b$ $t_b = 28{,}6\left(\frac{\rho_l d_0}{\sqrt{\rho_g \triangle P}}\right)$	[113, 114]
Naber et Sieber	$L_b = \frac{b}{a}\left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{0,5}\frac{d_0 C_a^{0,5}}{\tan\theta}\sqrt{\left(\frac{2}{B}+1\right)^{0,5}-1}$ $\widetilde{S} = \left[\left(\frac{1}{\widetilde{t}}\right)^n + \left(\frac{1}{\widetilde{t^{0,5}}}\right)^n\right]^{-\frac{1}{n}}$ $\widetilde{S} = \frac{S}{x^+}$; pénétration adimensionnée $\widetilde{t} = \frac{t}{t^+}$; temps adimensionné $x^+ = \frac{C_a^{0,5} d_0 \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}}}{\tan(\theta)}$; échelle de longueur du modèle $t^+ = \frac{C_a^{0,5} d_0 \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}}}{\tan(\theta) V_{inj}}$; échelle de temps du modèle	[115, 116]
Modèle RK	$L_b = C_S d_0 W_e^{0,25} M^{0,4} \rho_l^{-0,6}$ $S = A_S\, \ni^{0,35} \exp\left[-0{,}2\left(\frac{t}{t_b}\right)\right]$; pour $0 < t < t_b$ $S = B_s^2 t^{0,5}$; pour $t > t_b$ $t_b = \frac{l_b^2}{B_s}$ $B_s = \frac{d_0 U_{om} We^{0,21} M^{0,16}}{D_s\sqrt{2\rho}}$	[117]

B) Angle ou demi angle de jet :

L'angle de jet est soumis à l'influence de diverses propriétés du processus d'injection, notamment les paramètres du système d'injection, les conditions thermodynamiques de la chambre de combustion, ainsi que les caractéristiques du carburant injecté. Tout comme la pénétration du jet, l'angle du jet a fait l'objet de plusieurs corrélations. Le Tableau 2.2 résume les corrélations les plus utilisées dans la littérature concernant les angles de jet.

TABLE 2.2 – Corrélation des angles du jet.

Dénomination du modèle	**Corrélation pour les angles du jet**	**Référence**
Hiroyasu	$2\theta = 83{,}5 \left(\frac{l_0}{d_0}\right)^{-0{,}22} \left(\frac{d_0}{d_{sac}}\right)^{0{,}15} \left(\frac{\rho_g}{\rho_l}\right)^{0{,}26}$	[114]
Sieber	$\tan(\theta) = C_\theta \left[\left(\frac{\rho_g}{\rho_l}\right)^{0{,}19} - 0{,}0043 \left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{0{,}5}\right]$	[116]
Modèle RK	$\theta = 2\arctan\left(E_s W_e^{0{,}35} M^{-0{,}07} \ni^{-0{,}12} \rho_l^{0{,}5} e^{0{,}07\frac{t}{t_b}}\right)$; pour $0 < t < t_b$ $\theta = 2\arctan\left(F_s W_e^{0{,}32} M^{-0{,}07} \ni^{-0{,}12} \rho_l^{0{,}5}\right)$; pour $t > t_b$	[117]

C) Diamètre des gouttelettes :

L'une des fonctions cruciales du système d'injection de carburant est de pulvériser le carburant en fines gouttelettes, généralement d'environ 10 μm de diamètre. L'atomisation de cette manière augmente significativement la surface du combustible liquide en contact avec l'air et accélère le processus de vaporisation. Mesurer la taille des gouttelettes dans les jets représente un défi important, car ces derniers sont souvent denses et donc difficiles à quantifier à l'aide des techniques optiques conventionnelles.
Le Diamètre Moyen de Sauter (SMD) est une mesure représentant la taille d'une goutte qui possède, en moyenne, le même rapport volume/surface que l'ensemble des gouttes du jet. Il est utilisé pour caractériser la pénétration des gouttes dans l'air, laquelle dépend du rapport entre l'inertie des gouttes et leur résistance aérodynamique.
La valeur de SMD est une mesure caractérisant la taille moyenne des gouttelettes d'un jet de carburant pulvérisé. En modélisation, elle est utilisée pour définir la durée moyenne de combustion du mélange dans la chambre de combustion. Le Tableau 2.3 présente certaines corrélations de la littérature qui permettent de déterminer le SMD.

TABLE 2.3 – Corrélation du SMD.

Dénomination du modèle	**Corrélation du SMD**	**Référence**
Elkotb	$d_{32} = 3{,}08 \times 10^6 \nu^{0{,}385} \sigma^{0{,}737} \rho_l^{0{,}737} \rho_g^{0{,}06} \triangle P^{-0{,}54}$	[118]
Hiroyasu	$d_{32} = \max\left[d_{32LS}, d_{32HS}\right]$ $d_{32LS} = 4{,}12 d_0 Re_l^{0{,}12} We_l^{-0{,}75} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g}\right)^{0{,}54} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{0{,}18}$ $d_{32HS} = 0{,}38 d_0 Re_l^{0{,}25} We_l^{-0{,}32} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g}\right)^{0{,}37} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{-0{,}47}$	[114]
Modèle RK	$d_{32} = 1{,}7 d_0 M^{0{,}0733} (We \times \rho)^{-0{,}266}$	[117]

1.3.2 Évaporation

La concentration de la vapeur du carburant injecté et pulvérisé dans la chambre de combustion est directement proportionnelle à sa vitesse d'évaporation, un facteur crucial ayant une

influence déterminante sur les performances du moteur. Des éléments tels que la distribution du jet de carburant, son aérodynamique, la température ambiante, ainsi que la composition des gaz dans la chambre de combustion exercent une influence significative sur le processus d'évaporation du carburant. La description détaillée de l'évaporation des gouttelettes de carburant pulvérisé dans la chambre de combustion a fait l'objet de plusieurs travaux de recherche [119, 120].
En général dans les modèles d'évaporation du carburant pulvérisé dans les moteurs à allumage par compression, les hypothèses suivantes sont prises en compte :

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

L'une des premières et simples approches théoriques adoptées pour la résolution des problèmes de modélisation de l'évaporation des gouttelettes dans un moteur à allumage par compression a été proposée par Spalding [121] et Godsave [122]. Cette approche est communément connue sous le nom de "loi du d^2", car elle définit la variation du carré du diamètre de la gouttelette pulvérisée par rapport au temps comme indiqué par l'équation 2.15.

$$d_k^2 = d_0^2 - K\tau_i \tag{2.15}$$

Où d_0, d_k sont respectivement le diamètre initial et le diamètre à l'instant d'observation de la gouttelette. K est la constante d'évaporation. τ_i représente le temps écoulé à partir du début de l'évaporation d'une gouttelette donnée jusqu'au moment d'observation. En se basant sur l'hypothèse d'homogénéité de la distribution des gouttelettes dans la chambre de combustion, l'égalité suivante est permise $d_0 = d_{32}$. La constante d'évaporation est donnée par l'expression suivante (équation 2.16) [117].

$$K = \frac{4 \times 10^6 N_U D_p p_s}{\rho_l} \tag{2.16}$$

Où N_U le nombre de Nusselt pour la diffusion. D_p le coefficient de diffusion de la vapeur de carburant dans les conditions d'une chambre de combustion. p_s la pression de la vapeur saturée de carburant. ρ_l la masse volumique du combustible liquide
Dans les travaux de Spalding [121] et Godsave [122], la constante K caractérise la vitesse de diminution des dimensions de la gouttelette initialement formée après pulvérisation. L'équation 2.16 montre que cette constante est inversement proportionnelle à la masse volumique du carburant. Ainsi, cela signifie que plus la masse volumique d'un carburant est élevée, moins rapidement ses gouttelettes s'évaporeront après pulvérisation dans la chambre de combustion de moteur à allumage par compression.

1.3.3 Délai d'auto-inflammation

Le délai d'auto-inflammation est l'un des critères les plus cruciaux, exerçant une influence significative sur le processus de combustion, notamment le rendement du moteur, les émissions polluantes, ainsi que le niveau sonore généré.
Le délai d'auto-inflammation est défini comme l'intervalle de temps entre le début de l'injection et le début de la combustion. Ce délai se compose d'un délai physique, au cours duquel l'atomisation, l'évaporation et le mélange du carburant avec l'air ont lieu, et d'un délai chimique attribué aux réactions de prémélange. Généralement, on considère que ces deux délais se produisent simultanément, conduisant plusieurs chercheurs à développer des formulations empiriques pour déterminer ce délai en tant qu'entité unique.
La réduction du délai d'auto-inflammation est très importante dans le but de permettre une diminution des émissions d'oxydes d'azote [123]. Les diverses corrélations existantes ont été développées dans des conditions expérimentales variées, mais elles présentent une caractéristique commune en montrant que ce délai peut être exprimé de manière générale à l'aide d'une loi d'Arrhenius (équation 2.17).

$$\tau_{id} = A.P^{-m} \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right) \tag{2.17}$$

Où A généralement une constante caractérisant la fréquence de collision des molécules réactives. P et T la pression et la température dans la chambre de combustion, respectivement. R la constante des gaz parfaits. m une constante caractérisant la cinétique de combustion du carburant liquide. E_a l'énergie d'activation. Le Tableau 2.4 présente différentes corrélations existantes dans des recherches antérieures, modélisant le délai d'auto-inflammation.

TABLE 2.4 – Corrélation du délai d'auto-inflammation.

Dénomination du modèle	**Corrélation du délai d'auto-inflammation**	**Référence**
Ikura	$DI = AP^B\phi^C \exp\left(\frac{D}{T}\right)$; DI en ms, P en atm, T en K Pour le gazole : $A = 2{,}76 \times 10^{-2}$, $B = -1{,}23$, $C = -1{,}6$, $D = 7280$	[124]
Hardenberg	$DI = \left[0{,}36 + 0{,}22\overline{U_p}\right] \times ...$ $\exp\left[\frac{618840}{IC+25}\left(\frac{1}{RT_{im}\epsilon^{n_c-1}} - \frac{1}{17190}\right) + \left(\frac{21{,}2}{P_{im}\epsilon^{n_c}-12{,}4}\right)^{0{,}63}\right]$; $\overline{U_p}$ est la vitesse moyenne du piston m/s	[125]
Fujimoto	$DI = AP^n\phi^{-1{,}9} \exp\left(\frac{5130}{T}\right)$; $P \leq 40$ atm, $A = 1{,}37 \times 10^{-1}, n = -1{,}06$ $P \geq 40$ atm, $A = 2{,}97 \times 10^{-3}, n = 0$	[126]

2 Modèle développé

Cette section présente le nouveau modèle 0D pour la combustion dual fuel élaboré dans le cadre de se chapitre. Les outils utilisés seront présenté dans un premier temps ainsi que la

méthodologie suivie pour la mise en œuvre du modèle. les principaux résultats sont exposés à la fin pour d'assurer la valorisation du travail.

2.1 Contexte général du modèle

Plusieurs recherches [7] affirment qu'il existe un besoin crucial de traiter les questions liées à l'environnement, à l'économie ou à la conservation des ressources, et de fonctionner avec une multitude de combustibles gazeux naturels.
Le moteur dual fuel présente une solution optimale à ce problème, car il est caractérisé par un fonctionnement avec une petite quantité du gazole et une grande quantité en termes d'énergie d'un carburant hydrocarbure (gaz de pétrole liquéfié, gaz naturel, ...) ou d'autres carburants comme l'hydrogène ou l'ammoniac, ce qui réduit davantage les émissions de CO_2 et de NO_x.
Afin d'étudier le comportement des moteurs fonctionnant dans différents modes, des simulations expérimentales ou numériques doivent être réalisées. Une large gamme de précision est possible par l'outil numérique de 0D à 3D [127]. Une précision qui s'accompagne impérativement d'une augmentation du coût de calcul.

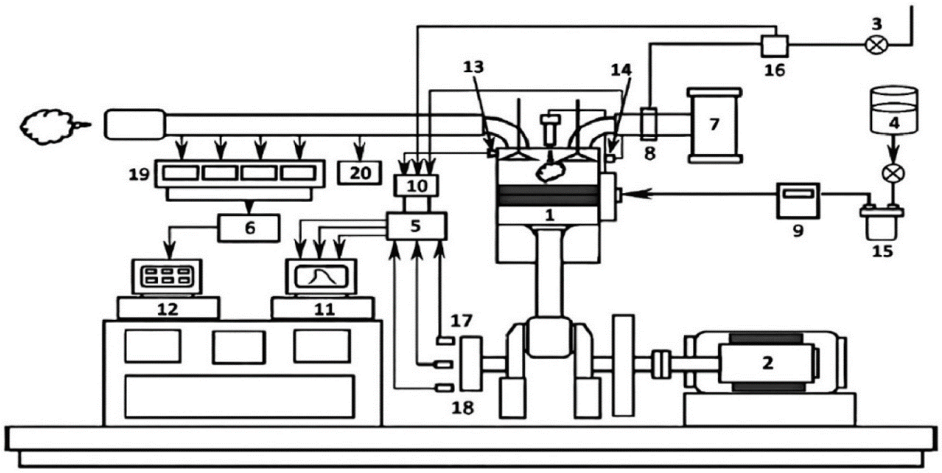
L'analyse de la littérature existante (Tableau 2.5) montre clairement que peu de modèles traitent de la combustion en mode dual fuel, alors qu'il a été démontré que ce mode offre un très bon compromis entre performances et émissions. Il s'agit donc d'un excellent remplacement au moteur diesel conventionnel, qui a été trop menacé récemment en raison de ses émissions nocives pour l'environnement.
La plupart des modèles 0D sont incapables de décrire la combustion dual fuel correctement (Tableau 2.5). De plus, ils ne peuvent pas établir d'analogie avec la phénoménologie de la combustion pour ce mode.
Le travail proposé dans ce chapitre a pour but de compenser les déficiences des modèles existants. Le modèle mise en œuvre est capable de distinguer les différentes phases de la combustion en mode dual fuel, en se basant sur le taux de dégagement de chaleur, et de modéliser chaque phase séparément.

TABLE 2.5 – Résumé de l'état de l'art en matière de modélisation de la combustion dual fuel.

Auteurs	**Type de modélisation**	**Méthodologie et Outils**
Jafari et al. [128]	3D	Modèle 3D CFD Fire pour la combustion couplé à Chemkin pour résoudre le mécanisme de cinétique chimique.
Singh et al. [129], Zhang et al. [130]		Modèle numérique basé sur le code KIVA-3D avec plusieurs sous-modèles améliorés comprenant des modèles de pulvérisation, d'atomisation, d'auto-inflammation, de combustion et d'émission.
Xu et al. [131]	0D	Simulation développée dans l'environnement GT-Power sur la base d'une triple fonction de Wiebe.
Liu et Karim [132]		Modèle thermodynamique multizone incorporant des schémas cinétiques détaillés a été développé.
Papagiannakis et al. [79], Walther et al. [133]		Modèle de jet développé pour le traitement de l'injection pilote. Modèle à deux zones pour la modélisation de la combustion dans le mélange air-gaz.
Pohekar et al. [134], Krishnan et al. [135], Millo et al. [136]		Traitement de l'auto-inflammation du combustible pilote et de la combustion après atomisation. Par la suite la combustion du gaz primaire est modélisée par la propagation turbulente de la flamme.

2.2 Cas d'étude

Les résultats expérimentaux utilisés dans ce chapitre pour la modélisation proviennent des essais moteur effectués sur le banc d'essai du moteur diesel mono-cylindre Lister-Petter (TS1) illustré par la Figure 2.2. C'est un moteur refroidi à l'air, conçu pour fonctionner à des vitesses comprises entre 0 et 2500 tr/min, où une puissance de 7,4 kW est développée. Les principales caractéristiques techniques de ce moteur sont indiquées dans le Tableau 2.6.



1.	Moteur diesel monocylindre	11.	Système d'acquisition rapide
2.	Dynamomètre (Frein)	12.	Système d'acquisition lente
3.	Combustible gazeux	13.	Capteur de pression cylindre
4.	Réservoir de gazole	14.	Capteur de la pression d'injection
5.	Carte du capteur de pression	15.	Filtre de combustible liquide
6.	Carte de l'analyseur fumée	16.	Débitmètres massiques pour gaz carburant
7.	Entrée d'air d'admission	17.	Détecteur du PMH
8.	Mélange air-gaz	18.	Capteur de vitesse de rotation
9.	Débitmètre de combustible	19.	Analyseur de fumée
10.	Amplificateurs de signal	20.	Analyseur des suies

FIGURE 2.2 – Représentation détaillée de l'installation expérimentale.

TABLE 2.6 – Caractéristiques principales du moteur.

Modèle	Lister-Petter TS1
Détails techniques	Monocylindre, 4 temps, refroidi à l'air, injection directe, allumage par compression
Alésage x Course	95,5 x 88,94 mm
Bielle	165,3 mm
Cylindrée	630 cm^3
Taux de compression	18
Injection	13 °V avant le PMH (Point Mort Haut)
Pression d'injection	250 bar
Puissance nominale	4,5 kW à 1500 tr/min
AOSA	36 °V avant le PMH
RFSA	69 °V après le PMB (Point Mort Bas)
AOSE	76 °V avant le PMB
RFSE	32 °V après le PMH

2.2.1 Procédure expérimentale

Le moteur a été modifié afin de pouvoir réaliser des essais en mode dual fuel. Pour rester dans le cadre du fonctionnement en dual fuel conventionnel (10% de la puissance nominale est fournie

par le carburant pilote), la quantité de carburant pilote injectée (gazole) à 13°V avant le PMH est fixée à 5 g/min. Ensuite, en maintenant le débit de carburant pilote constant, la puissance du moteur est ajustée en régulant la quantité de carburant gazeux, qui est un mélange de gaz naturel (GN) et d'hydrogène (H_2). Le gaz naturel est fourni à partir d'un réseau de distribution local, tandis que l'hydrogène est fourni à partir de bouteilles comprimées. La composition du gaz naturel utilisé dans les expériences est précisée dans le Tableau 2.7.
Les caractéristiques de combustion, les performances du moteur et les émissions sont obtenues pour quatre charges du moteur, à savoir 20, 40, 60 et 80% de la pleine charge correspondant à des pressions moyennes effectives de 1,15, 2,27, 3,42 et 4,57 bar, respectivement. Différentes concentrations d'hydrogène (35, 40, 45 et 50% en volume) sont étudiées.

TABLE 2.7 – Composition et pouvoir calorifique du GN.

Composant	v/v (%)	Composant	v/v (%)
Methane (CH_4)	92,9 ± 1,7	Pentane (C_5H_{12})	0,05 ± 0,03
Ethane (C_2H_6)	3,9 ± 1,6	Nitrogen (N_2)	0,95 ± 0,3
Propane (C_3H_8)	1,3 ± 0,8	Carbone dioxide (CO_2)	0,9 ± 0,3
Butane (C_4H_{10})	0,577 ± 0,5	Pouvoir calorifique inférieur (MJ/kg) : 49,7	

2.2.2 Taux de dégagement de chaleur

La modélisation dans ce chapitre repose principalement sur le taux de dégagement de chaleur, c'est pourquoi un traitement précieux est effectué pour la détermination de cette variante par l'étude expérimentale.
Pour accomplir cette tâche, un modèle d'analyse a été utilisé. Ce modèle est basé sur l'hypothèse classique selon laquelle la chambre de combustion contient un mélange homogène de gaz parfaits, qui ont atteint l'équilibre thermodynamique. L'expression finale du taux de dégagement de chaleur est obtenue en appliquant le premier principe de la thermodynamique pour calculer l'énergie de la charge du cylindre (mélange), qui est supposée être uniforme en composition, pression et température. Cette définition est présentée par l'équation 2.18.

$$\left[\frac{dQ}{d\theta}\right] = \left[\frac{dQ}{d\theta}\right]_{net} + \left[\frac{dQ}{d\theta}\right]_{w} = \left(\frac{\gamma}{\gamma-1}\right) \times P \times \frac{dV}{d\theta} + \left(\frac{1}{\gamma-1}\right) \times V \times \frac{dP}{d\theta} + \left[\frac{dQ}{d\theta}\right]_{w} \tag{2.18}$$

Où P est la pression expérimentale mesurée dans le cylindre à un angle vilebrequin θ donné. $[dQ/d\theta]_{net}$ le taux de dégagement net de chaleur et $[dQ/d\theta]_w$ le taux de transfert de chaleur à la paroi du cylindre calculé sur la base de la corrélation de Woshni [109]. γ le rapport de chaleur spécifique considéré comme indépendant de la température en raison de l'effet négligeable des changements de γ, dans une plage typique de [1,3 - 1,35], sur le phasage $[dQ/d\theta]_{net}$. Par conséquent, une valeur constante de (γ=1,35) est adopté dans ce travail. V le volume de la chambre de combustion.

2.3 Méthodologie et développement du modèle

La modélisation de la combustion dans ce chapitre s'intéresse principalement au taux de dégagement de chaleur d'un moteur dual fuel. Ce paramètre caractérise précisément la qualité de la combustion et décrit finement la manière d'utilisation du combustible dans le cylindre. Pour cela, une discrétisation de ce taux en phases distinctes a eu lieu, afin de traiter chaque phases séparément.

2.3.1 Discrétisation du taux de dégagement de chaleur

La Figure 2.3 représente un cas conventionnel de combustion dual fuel, en termes de taux de dégagement de chaleur (TDC), pour différentes richesses du mélange air-gaz. La figure 2.4 est une illustration typique du mode dual fuel pour lequel le taux de dégagement de chaleur est principalement contrôlé par deux phases. La première est contrôlée par la combustion du combustible pilote tandis que la seconde est contrôlée par la combustion du mélange air-gaz.

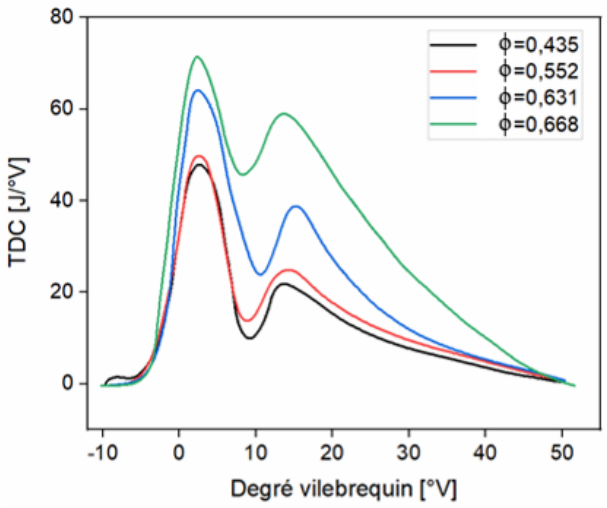


FIGURE 2.3 – Variation des taux de dégagement de chaleur pour un moteur dual fuel méthane/gazole. (La figure est reproduite de [7] avec la permission de Taylor and Francis Group LLC).

Selon l'analogie avec la phénoménologie de ce mode, un modèle hybride est proposé, basé sur la modélisation de chaque phase séparément, ce qui nécessite une séparation des phases, comme indiqué dans la Figure 2.4, c'est-à-dire la première phase de combustion du gazole et la seconde phase de combustion du mélange air-gaz.

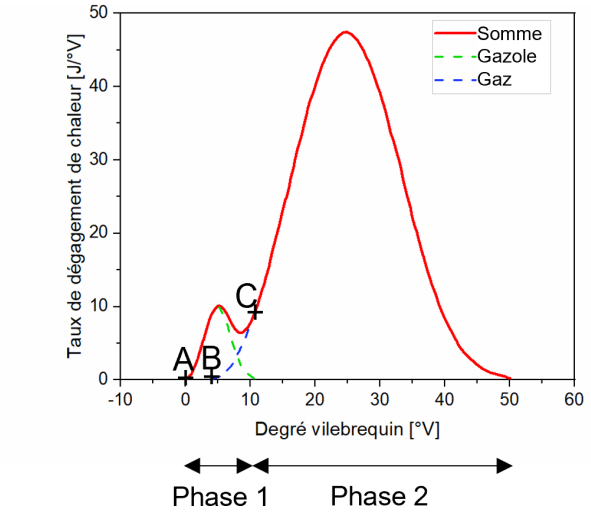


FIGURE 2.4 – Exemple de taux de dégagement de chaleur en mode dual fuel.

Le modèle proposé se compose de deux phases distinctes. Chacune est traitée par une approche de modélisation différente. Dans la première phase, un nouveau modèle de jet quasi-dimensionnel est utilisé, basé sur le développement du jet dans la chambre de combustion dans la direction de l'injection, en prenant en compte son délai d'auto-inflammation. La combustion pilote est également prise en compte dans le taux global de dégagement de chaleur au cours de cette phase, avant d'être considérée comme une étincelle pour la deuxième phase, qui est traitée par une modélisation mathématique 0D. La séparation des phases est donc une étape cruciale dans le modèle proposé, car elle permet de déterminer le délai d'auto-inflammation de la quantité du gazole injectée ainsi que le délai d'allumage du mélange air-gaz (points A et B, respectivement dans la Figure 2.4). Les lois qui contrôlent les taux de dégagement de chaleur dans chaque phase sont les objectifs d'une modélisation appropriée pour chacune d'entre elles.

Afin d'initier l'approche, pour chaque composition de gaz (pourcentage d'hydrogène), la charge la plus faible est prise. La modélisation de cette charge se fait à l'aide d'un modèle "Gaussien". Ensuite, la quantité de chaleur dégagée par le gazole injecté est déterminée ainsi que la loi de ce dégagement (allure de la courbe du taux de dégagement de chaleur pour cette quantité), en se basant sur le modèle approprié au cas du gazole.
Cette approche repose sur une hypothèse simplificatrice stipulant que la quantité du gazole brûlée est identique pour toutes les charges selon la même loi de dégagement de chaleur, pour une composition de gaz identique, avant le début de la combustion du gaz. Cette hypothèse est permise vu la courte durée de combustion de la quantité pilote injectée. Ainsi, pour une même composition de gaz dans la chambre de combustion, il est supposé que le gazole injecté brûle dans les mêmes conditions ambiantes, sans que la charge n'ait une influence significative sur cette courte phase.
La Figure 2.4 illustre de manière générale le taux de dégagement de chaleur dans le cas d'une combustion dual fuel pour une faible charge. L'objectif de cette partie est de déterminer la quantité du gazole brûlé pendant la première phase en utilisant le taux de dégagement de chaleur

correspondant à cette quantité, afin de déterminer le délai d'allumage du mélange gazeux, c'est-à-dire le temps entre les deux points A et B. À cette fin, un modèle basé sur des multi-modèles Gaussiens est mis en œuvre.
Ce modèle développé subdivise le signal global du taux de dégagement de chaleur en plusieurs signaux selon une sommation des fonctions Gaussiennes comme indiqué par l'équation 2.19, avec a_i, b_i et c_i sont les constantes des fonctions de Gauss. Chaque petit signal est caractérisé par sa propre allure contrôlée principalement par l'instant de démarrage, la phase et l'aire sous la courbe.

$$Y = \sum_{i=1}^{n} a_i . \exp\left[- \left(\frac{X - b_i}{c_i} \right)^2 \right] \tag{2.19}$$

L'idée de subdiviser les signaux en plusieurs parties découle de la phénoménologie de la combustion observée dans le cas du mode dual fuel. En effet, cette combustion est contrôlée par plusieurs sites de combustion qui s'allument et s'éteignent de manière aléatoire dans la chambre de combustion. Pour tenir compte de cette phénoménologie, l'optimiseur libère tous les paramètres qui contrôlent la discrétisation Gaussienne et le nombre de fonctions utilisées (comme illustré dans la Figure 2.5). Finalement, l'optimiseur doit trouver l'ensemble des signaux multiples formant l'allure globale du taux de dégagement de chaleur avec la moindre erreur possible entre les résultats modélisés et expérimentaux.

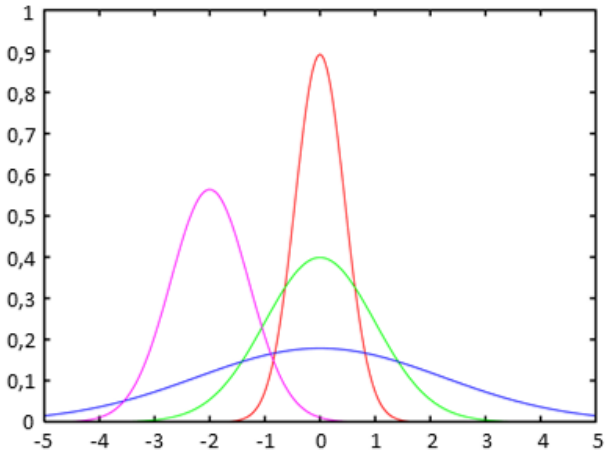


FIGURE 2.5 – Illustration de l'allure des signaux de Gauss multiples.

Cette partie vise la séparation des deux phases (phase contrôlée par la combustion du gazole et phase contrôlée par la combustion du gaz) afin de modéliser chaque phase séparément par la suite. Pour cette raison, après la détermination des signaux multiples du taux de dégagement de chaleur, le modèle effectue la séparation des signaux qui contrôlent chaque phase, en gardant une montée lisse pour le début de la deuxième phase (entre les deux points B et C indiqués dans la Figure 2.4). Les conditions de séparation sont données dans le diagramme de la Figure 2.6. Cette procédure est permise à faible charge car les deux phases sont clairement distinguées puisque l'allumage de la seconde phase (combustion des gaz) prend du temps par rapport aux cas de forte charge, ce qui donne la possibilité à la quantité du gazole injectée de brûler selon la loi ordinaire conventionnelle et donc à la première phase de se développer clairement.

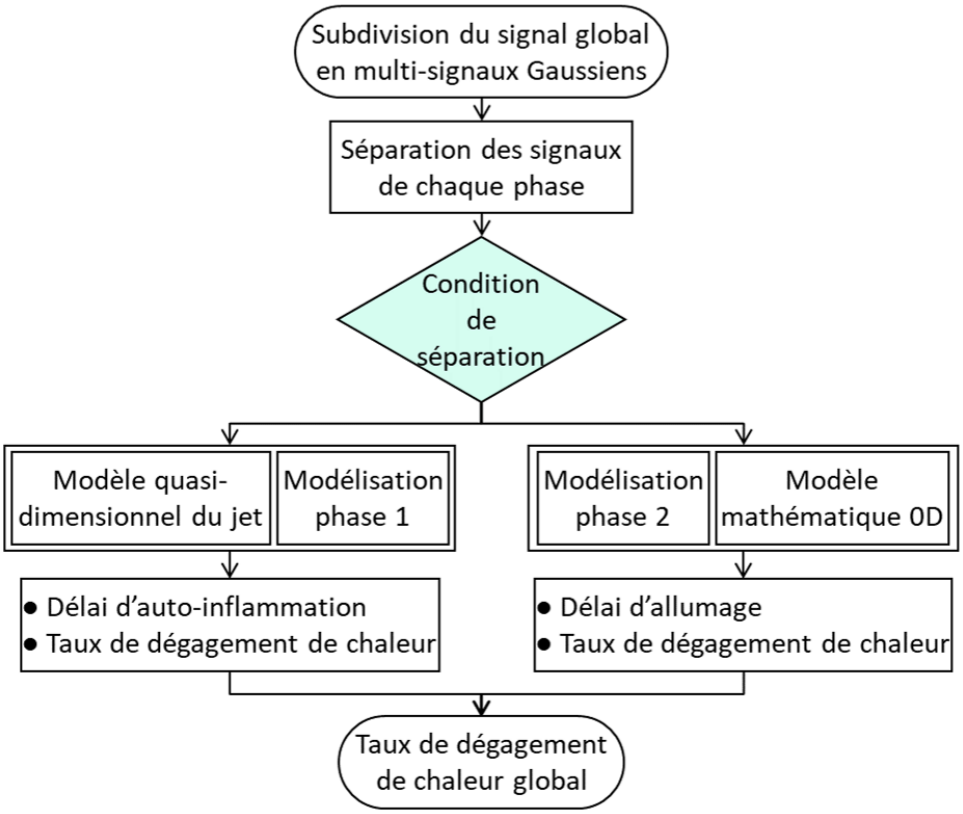


FIGURE 2.6 – Méthodologie du modèle développé.

Le diagramme présenté dans la Figure 2.6 montre que les deux phases seront traitées différemment dans la suite du chapitre. La première phase sera abordée à l'aide d'un modèle quasi-dimensionnel du jet spécifique à la combustion du gazole, tandis que la seconde phase sera abordée à l'aide d'un modèle 0D basé sur une modélisation par une discrétisation Gaussienne. Cette modélisation impliquera la prise en compte du délai d'auto-inflammation et du délai d'allumage pour la première et la seconde phase, respectivement.

2.3.2 Modélisation de la première phase

La modélisation de la première phase concerne principalement deux variantes, à savoir le délai d'auto-inflammation et le taux de dégagement de chaleur, comme détaillé dans la suite du chapitre.

A- Délai d'auto-inflammation (ID)

Afin de modéliser ce délai d'auto-inflammation en mode dual fuel en prenant en compte l'effet de la composition du gaz (pourcentage d'hydrogène et de gaz naturel) dans la chambre de combustion, une approche inspirée de celle d'Assanis et al. [137] (équation 2.20) qui est basée sur la loi d'Arrhenius [48] peut être utilisée.

$$\tau_{ID} = 2{,}4\phi^{-0{,}2} \times p^{-1{,}02}.\exp\left[\frac{E_a}{R_a T}\right] \tag{2.20}$$

Avec ϕ la richesse. p et T la pression et la température dans le cylindre, respectivement. E_a l'énergie d'activation. R_a la constante des gaz parfaits.

Étant donné que l'approche décrite par l'équation 2.20 est principalement basée sur le fonctionnement du moteur diesel conventionnel, où du carburant liquide est injecté dans une chambre de combustion ne contenant que de l'air, quelques ajustements sont nécessaires pour appliquer cette approche au cas de fonctionnement du moteur en mode dual fuel. Dans ce cas, le carburant pilote liquide est injecté dans une chambre de combustion contenant de l'air et d'autres gaz avec des compositions différentes, tels que le gaz naturel et l'hydrogène.
Pour cette raison, l'équation 2.21 est employée pour tenir compte de l'impact de la composition du gaz présent dans la chambre de combustion. En conséquence de ces ajustements, le délai d'auto-inflammation modélisé est maintenant influencé par les pourcentages d'hydrogène et de gaz naturel présents dans la chambre de combustion, en plus de la quantité du gazole injectée (carburant pilote) et des conditions prédominantes dans la chambre au moment de l'injection.

$$\tau_{ID} = \left[\phi_G^a.\phi_{H_2}^b.\phi_{GN}^c.\frac{m_G}{m_{H_2}^{d1}+m_{H_2}^{d2}}\right].p^e.\exp\left[\left(\frac{f_1}{CI+f_2}\right).\frac{1}{T}\right] \tag{2.21}$$

Avec ϕ_G, ϕ_{H_2} et ϕ_{NG} représentent respectivement la richesse du gazole, de l'hydrogène et du gaz naturel. m_G, m_{H_2} et m_{GN} représentent les masses du gazole, d'hydrogène et de gaz naturel, respectivement. CI, l'indice de cétane du gazole (carburant pilote). a, b, c, d_i, e, f_i des paramètres du modèle.
Comme la physique de la combustion pour le cas dual fuel influence l'énergie d'activation (E_a/R_a) de l'ancien modèle défini par l'équation 2.20, la fixation de ce paramètre entraîne une surcontrainte pour la modélisation du délai d'auto-inflammation. Pour cette raison, l'énergie d'activation est également incluse comme paramètre contrôlant le modèle, via l'équation 2.22 qui est injectée dans l'équation 2.21, et qui participe à la construction du modèle du délai d'auto-inflammation.

$$\frac{E_a}{R_a} = f\left(f_1, f_2, CI\right) \tag{2.22}$$

B- Taux de dégagement de chaleur

Après la détermination du délai d'auto-inflammation et la quantité de combustible brûlé dans la première phase de combustion via l'étape de séparation expliquée ci-dessus, l'approche proposée passe au calcul du taux de dégagement de chaleur. Ce calcul est assuré par un sous-modèle développé basé sur une approche quasi-dimensionnelle du jet gazole expliquée ci-dessous.

■ Modèle quasi-dimensionnel du jet gazole

Ce travail présente un modèle de combustion biphasique quasi-dimensionnel pour le jet du gazole. Le modèle divise le jet en deux phases distinctes : la phase gazeuse et la phase liquide. La phase liquide du carburant pulvérisé est divisée en i zones plus petites, en fonction d'un pas de temps ($\triangle t$) choisi en fonction de la vitesse d'injection, de manière à calculer la masse de carburant dans chacune de ces zones. Cette masse est calculée en fonction du taux d'injection de carburant et du pas de temps choisi. La zone en phase gazeuse est également divisée en j zones

plus petites, chaque zone de combustion contenant une certaine quantité de vapeur de carburant qui sera ultérieurement consommée lors de la combustion, en fonction de la distribution de concentration.

Le jet de pulvérisation présente une longueur maximale de phase liquide. L'état de mélange de cette longueur maximale de liquide correspond à l'état de vapeur saturée. Lorsque la distance de pénétration SL_i de la zone de la phase liquide est supérieure à la longueur maximale SL de la phase liquide, la phase liquide atteint l'état de vapeur saturée. À ce stade, il y a un échange de masse entre la dernière cellule de liquide et la première cellule du mélange liquide-vapeur. Une partie du combustible liquide passe alors de la phase liquide à la phase vapeur et se mélange avec l'air. Finalement, une zone de combustion est générée après un certain temps en consommant une quantité de combustible vapeur $\triangle m_c$ [138].
À ce stade, le modèle commence à calculer l'entraînement d'air, le délai d'auto-inflammation et le taux de combustion dans la zone de transition. La Figure 2.7 montre le processus de génération et d'évolution de chaque zone dans le modèle de combustion quasi-dimensionnel multizone à deux phases. Le processus principal peut être divisé en étapes comme suit.

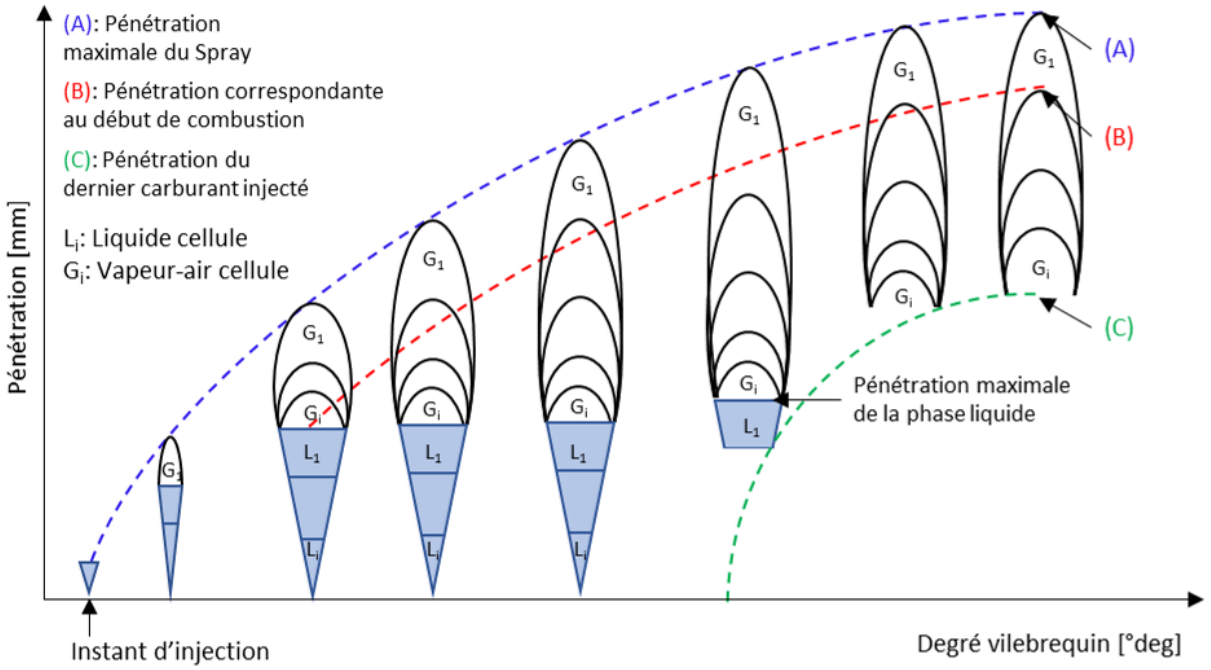


FIGURE 2.7 – Scénario illustratif pour le développement du jet carburant.

1- Génération et pénétration de la zone de la phase liquide :

Le temps unitaire (pas de temps $\triangle t$) de la masse de carburation et la vitesse initiale sont calculés sur la base des paramètres d'injection de carburant à l'entrée, un tracé de la phase liquide (L_i) est généré en unités de temps affectées à la zone du carburant liquide. En même temps, la pénétration de la pulvérisation est calculée sur la base des paramètres d'injection actuels. La distance et la vitesse de pulvérisation à chaque instant peuvent être déterminées.

La zone de phase liquide obéit à cette règle et ne tient pas compte de l'entraînement du liquide dans le processus.
Dans le modèle, la zone de la phase gazeuse de pulvérisation est la principale région pendant le processus de combustion, et l'entraînement d'air et le taux de mélange sont les principaux facteurs limitant la combustion. Par conséquent, dans le processus de pénétration de la phase liquide, en ignorant l'entraînement d'air dans la parcelle de la phase liquide, la zone de la phase liquide implique le transfert du combustible et l'évaporation vers la phase de mélange.

2- Échange de masse entre la phase liquide et la phase de mélange :

En fonction de l'état des paramètres d'injection de carburant et des paramètres environnementaux, la longueur maximale de la pulvérisation de combustible liquide est calculée, ainsi que la moyenne de la richesse du mélange air-carburant-gaz et de la température de la vapeur saturée dans la section de la longueur maximale du combustible liquide. Lorsque la zone liquide sur toute la distance SL_i est supérieure à la longueur maximale SL de la phase liquide, le traçage de la phase liquide satisfait aux conditions d'évaporation complète.

3- Génération de zones de combustion et entraînement d'air :

Avec le développement de la pénétration de la pulvérisation, une plus grande partie de la zone de phase liquide remplit les conditions d'évaporation complète, et le combustible résiduel est distribué dans les zones du mélange. L'état initial de la zone est l'état de vapeur saturée et le délai d'auto-inflammation est également calculé sur la base de l'état initial de la zone. En supposant que, dans le processus de pénétration de la pulvérisation, la masse de vapeur de combustible dans la zone de combustion reste inchangée, le changement de masse dans la zone de combustion est entièrement causé par l'entraînement de l'air. Ainsi, le calcul du taux de variation de la masse totale de la zone de combustion par unité de temps est basé sur la distribution de la concentration, c'est-à-dire le taux d'entraînement de l'air résiduel.
Ce modèle quasi-dimensionnel est basé principalement sur la limite qui contrôle la transition de l'état liquide à l'état de vapeur qui est contrôlée directement par l'évaporation du carburant pendant le développement du jet. Pour cette raison, un traitement minutieux est consacré à cette partie de l'évaporation du liquide.
Dans ce travail, l'évaporation des gouttelettes est contrôlée par le modèle connu par la loi d^2, définie par l'équation 2.15, afin de mesurer le taux d'évaporation [139].

Pour aborder cette question, un scénario hypothétique est considéré où une petite goutte de carburant pur est subitement immergée dans un gaz à haute température. D'après les recherches de Faeth [140], le processus d'évaporation qui se produit ensuite se déroule comme suit. À des températures normales d'injection du carburant, la concentration de vapeur de carburant à la surface du liquide est faible, ce qui entraîne peu de transfert de masse de la gouttelette au cours de cette étape initiale. Dans ces conditions, la goutte de carburant se réchauffe de la même manière qu'un corps froid lorsqu'il est placé dans un environnement chaud. En raison de la conductivité thermique limitée du combustible, la température à l'intérieur de la goutte n'est pas uniforme, étant plus froide au centre de la goutte qu'à sa surface.

Initialement, la quasi-totalité de la chaleur fournie à la goutte est utilisée pour augmenter sa température. À mesure que la température du liquide s'élève, la vapeur de carburant qui se forme à la surface de la goutte a deux effets : (1) une partie de la chaleur transférée à la goutte est nécessaire pour fournir la chaleur de vaporisation du liquide et (2) le flux de vapeur de carburant freine le taux de transfert de chaleur vers la goutte. Cela a pour effet de réduire le taux d'augmentation de la température de surface, ce qui rend la température à l'intérieur de la goutte plus uniforme. Finalement, on atteint un stade où toute la chaleur transférée à la goutte est utilisée comme chaleur de vaporisation, et les gouttelettes atteignent une température humide stabilisée.
Pour suivre ce processus, plusieurs étapes de calcul sont nécessaires. Les Tableaux 2.8 et 2.9 résument les principales étapes de calcul avec les équations appropriées.

TABLE 2.8 – Coefficients de transfert de masse.

Paramètres	**Définitions**
Coefficient de transfert de masse	$\frac{dY_F}{1-Y_F} = -\frac{RT}{D_c P}\dot{m}_{F_s} r_s^2 \frac{dr}{r^2}$
	$\begin{cases} \dot{m}_{F_s} = -\frac{PD_c}{RT}\frac{ln(1-Y_{F_s})}{r_s} = \frac{\rho D_c ln(1-Y_{F_s})}{r_s} \\ \dot{m}_F = 4\pi r_s^2 m_{F_s} = 4\pi r_s \rho D_c ln\left(1-Y_{F_s}\right) \end{cases}$
	$\begin{cases} B_M = \frac{Y_{F_s}}{1-Y_{F_s}} \\ \dot{m}_F = 2\pi D_s \left(\frac{k}{c_p}\right)_g ln\left(1+B_M\right) \end{cases}$
Chaleur de référence spécifique à pression constante	$\begin{cases} C_{P_s} = Y_{A_r}\left(C_{P_A} : \text{à } T_r\right) + Y_{F_r}\left(C_{P_v} : \text{à } T_r\right) \\ Y_{F_r} = \frac{2}{3}Y_{F_s}; Y_{A_r} = 1 - Y_{F_r} \end{cases}$
Valeur de référence de la conductivité thermique	$k_g = Y_{A_r}\left(k_A : \text{à } T_r\right) + Y_{F_r}\left(k_v : \text{à } T_r\right)$
Chaleur spécifique des vapeurs de carburant	$C_{p_v} = (363 + 0{,}467\ T)\left(5 - 0{,}001\rho_{F_0}\right)$
Conductivité thermique des vapeurs de carburant	$k_{v_T} = 10^{-3}\left[13{,}2 - 0.0313\left(T_{bn} - 273\right)\right]\left(\frac{T}{273}\right)^n$

TABLE 2.9 – Coefficients de transfert de chaleur.

Paramètres	**Définitions**
Nombre de transfert de chaleur	$B_T = \frac{C_{pg}(T_\infty - T_g)}{L}$
Taux d'évaporation carburant	$\dot{m}_F = 2\pi D \left(\frac{k}{c_p}\right)_g ln\left(1+B_T\right)$
	$Y_{F_s} = \frac{P_{F_s} M_F}{P_{F_s} M_F + (P - P_{F_s}) M_A} = \left[1 + \left(\frac{P}{P_{F_s}} - 1\right)\frac{M_A}{M_F}\right]^{-1}$
Constante d'évaporation	$\lambda_{st} = \frac{8 k_g ln(1+B)}{C_{pg}\rho_F}$

Le processus de calcul du taux d'évaporation repose sur le calcul du taux d'évaporation de chaque gouttelette de carburant dans la chambre de combustion en fonction du temps (angle

du vilebrequin). Cependant, la température est supposée constante pendant la phase d'évaporation, ce qui est contradictoire avec la phénoménologie de la combustion car la combustion est déclenchée avant la fin de l'évaporation, ce qui a une influence cruciale sur cette dernière. Pour tenir compte de cette interaction entre les phases, un calcul itératif est nécessaire pour mettre à jour et corriger la température à l'intérieur de la chambre de combustion en fonction du degré vilebrequin, qui affecte le taux d'évaporation de chaque gouttelette, comme illustré dans la Figure 2.8.

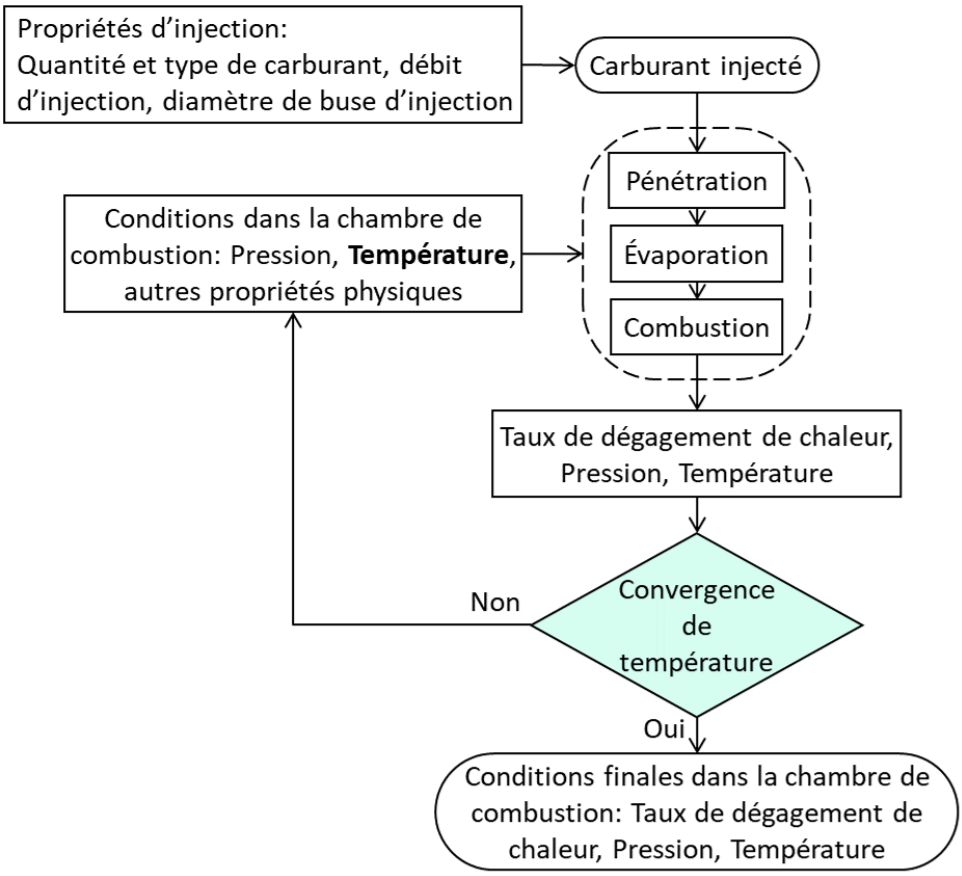


FIGURE 2.8 – Méthodologie du modèle de jet quasi-dimensionnel.

Les caractéristiques de la pénétration du carburant sont calculées selon les corrélations résumées dans le Tableau 2.10.

TABLE 2.10 – Calcul de la pénétration et de l'atomisation de la pulvérisation.

Paramètres	**Définitions**
Pénétration du jet	$\begin{cases} S_i = C_d \left(\frac{2\triangle p_i}{\rho f_l}\right)^{0,5}.t & t \leq t_{break,i} \\ S_i = 2{,}95 \left(\frac{2\triangle p_i}{\rho f_l}\right)^{0,25}.(d_n t)^{0,5} & t > t_{break,i} \end{cases}$ $t_{break,i} = 4{,}351 \frac{\rho f_l d_n}{C_d^2 (\rho_a \triangle p_i)^{0,5}}$
Atomisation	$\begin{cases} \frac{d_{32}^{LS}}{d_n} = 4{,}12 Re^{0,12} We^{-0,75} \left[\frac{\mu_{f_l}}{\mu_a}\right]^{0,54} \left[\frac{\rho_{f_l}}{\rho_a}\right]^{0,18} & t \leq t_{break,i} \\ \frac{d_{32}^{HS}}{d_n} = 0{,}38 Re^{0,25} We^{-0,32} \left[\frac{\mu_{f_l}}{\mu_a}\right]^{0,37} \left[\frac{\rho_{f_l}}{\rho_a}\right]^{-0,47} & t > t_{break,i} \end{cases}$

2.3.3 Modélisation de la deuxième phase

La modélisation de cette phase concerne principalement deux variantes, à savoir le délai d'allumage du mélange air-gaz et le taux de dégagement de chaleur, comme détaillé dans la suite du chapitre.

A- Délai d'allumage du mélange air-gaz (ID2)

Dans cette approche, le délai d'allumage, qui est défini par le moment entre l'auto-inflammation du combustible pilote et le moment de l'allumage du mélange air-gaz, est un résultat de la partie de séparation des phases. Après la discrétisation Gaussienne en multi-signaux (Figure 2.9-a), une séparation de ses signaux est effectuée pour déterminer la quantité de combustible pilote brûlée pendant la première phase et l'allure du taux de dégagement de chaleur pour cette phase (Figure 2.9-b). Ensuite, le calculateur soustrait cette quantité de chaleur dégagée de l'allure globale fournie par l'expérience afin de déterminer l'allure du taux de dégagement de chaleur pour la deuxième phase, donc au moment du début de cette courbe (point B dans la Figure 2.4), la valeur de la chaleur dégagée spécifique à la deuxième phase quitte le zéro, qui correspond à l'instant d'allumage du mélange air-gaz (initiation de la seconde phase dans la Figure 2.9-b).

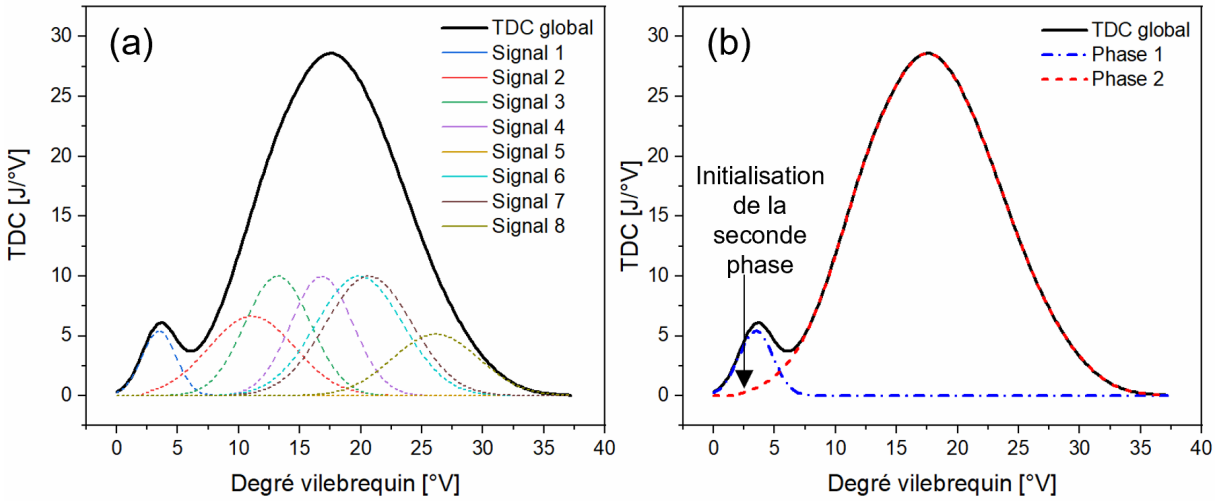


FIGURE 2.9 – Représentation des phases : (a) discrétisation du TDC en multi-signaux de Gauss, (b) discrétisation du TDC en deux phases.

B- Taux de dégagement de chaleur

Après la séparation des deux phases par la première partie de la modélisation (Figure 2.9-b), le traitement de chaque phase est nécessaire pour modéliser le taux de dégagement de chaleur dans chaque partie. La section suivante traite le taux de dégagement de chaleur dans la deuxième phase.

Pour le traitement de la deuxième phase, une méthodologie basée sur la modélisation Gaussienne est toujours utilisée, sachant que la fonction Gaussienne utilisée est contrôlée par la fonction présentée par l'équation 2.19. Pour donner un aspect plus prédictif à cette modélisation, les mini-fonctions de Gauss ont été fixées le long de la phase globale selon une fonction de probabilité comme indiqué dans l'organigramme de la Figure 2.10, où le nombre de mini-fonctions n est une fonction objective à minimisée. Pour cette raison, la distribution optimale de ces fonctions assurant une erreur minimale pour tous les cas de fonctionnement (pourcentage de H_2 × charges) est déterminée via un algorithme d'optimisation. Cette distribution optimale est ensuite imposée pour tous les cas de fonctionnement en libérant les autres paramètres de la fonction Gaussienne (a_i et c_i) pour la modélisation du taux de dégagement de chaleur spécifique à cette phase.

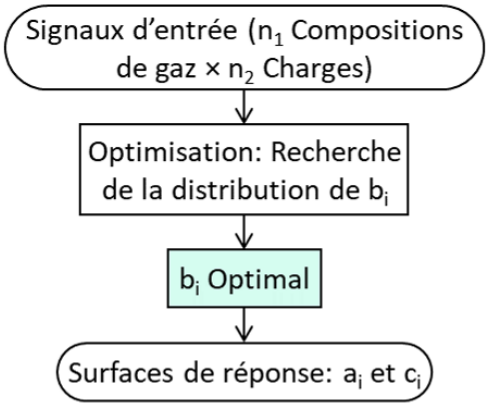


FIGURE 2.10 – Principe de modélisation de la deuxième phase.

Comme mentionné ci-dessus, dans cette approche, les paramètres b_i dans l'équation 2.19 sont imposés selon une distribution optimale comme le montre la Figure 2.10. Il s'agit d'une procédure pertinente qui vise à accroître la prédictivité du modèle d'une part et à réduire le nombre de paramètres à calibrer à l'aide des résultats expérimentaux d'autre part. Cette approche nécessite un étalonnage des paramètres a_i et c_i en fonction de la charge et de la composition du gaz (pourcentage de H_2 contenu dans le gaz) avec les résultats expérimentaux, afin d'imiter le taux de dégagement de chaleur dans la deuxième phase.

Afin d'améliorer la prédictivité du modèle, la modélisation des paramètres a_i et c_i est prise en charge. En fonction des résultats obtenus, un lissage par l'outil "Thin Plate Spline" [141] est utilisé pour construire des surfaces de réponse pour ces paramètres en fonction de la charge et de la composition du gaz. Au final, n surfaces de réponse sont livrées pour chaque paramètre contrôlant leurs variations entre 20% et 80% de charge d'une part et entre 35% H_2 et 50% H_2 d'autre part.

Après la présentation du modèle de combustion, le passage à la modélisation des émissions illustées par les NO_x est important.
Trois principaux mécanismes chimiques sont responsables de la production d'oxyde d'azote (NO). Il s'agit du mécanisme thermique de Zeldovich, du mécanisme rapide de Fenimore, et de la combustion de l'azote lié au combustible. Pour les moteurs à combustion interne, le mécanisme de Zeldovich revêt une importance particulière, car le NO se forme dans les gaz brûlés à haute température situés en aval du front de flamme. Le mécanisme rapide, quant à lui, se déroule au niveau du front de flamme, qui est relativement mince. Étant donné que le volume des gaz brûlés à haute température est considérablement plus élevé que le volume instantané du front de flamme, la quantité de NO générée par le mécanisme rapide est relativement minime par rapport à celle produite par le mécanisme thermique de Zeldovich.
Les trois équations chimiques suivantes forment le mécanisme réactionnel étendu de Zeldovich [142] :

$$O + N_2 \underset{k_{1r}}{\overset{k_1}{\leftrightarrow}} NO + N \tag{2.23}$$

$$N + O_2 \underset{k_{2r}}{\overset{k_2}{\leftrightarrow}} NO + O \tag{2.24}$$

$$N + OH \underset{k_{3r}}{\overset{k_3}{\leftrightarrow}} NO + H \tag{2.25}$$

Les constantes de vitesse pour ce mécanisme réactionnel sont exprimées dans l'équation 2.26, telles que décrites par Hanson et Salimian [143]. Les unités des constantes de vitesse sont exprimées en $cm^3/(mol.s)$, et l'indice inférieur r associé aux constantes de vitesse fait référence à la constante de vitesse de la réaction inverse. La température T est exprimée en Kelvin.

$$\begin{cases} k_1 = 1{,}8 \times 10^{14}.\exp(-38370/T) \\ k_{1r} = 3{,}8 \times 10^{13}.\exp(-425/T) \\ k_2 = 1{,}8 \times 10^{10}T.\exp(-4680/T) \\ k_{2r} = 3{,}8 \times 10^{9}T.\exp(-20820/T) \\ k_3 = 7{,}1 \times 10^{13}.\exp(-450/T) \\ k_{3r} = 1{,}7 \times 10^{14}.\exp(-24560/T) \end{cases} \tag{2.26}$$

Le taux de variation de la concentration de NO est décrit par l'équation 2.27, où les crochets indiquent les concentrations molaires en mol/cm^3.

$$\frac{d}{dt}[NO] = +k_1[O][N_2] - k_{1r}[NO][N] + k_2[N][O_2] - k_{2r}[NO][O] + k_3[N][OH] - k_{3r}[NO][H] \tag{2.27}$$

Pour appliquer l'équation 2.27, deux approximations sont nécessaires. La première approximation suppose que le système C-O-H est à l'équilibre et n'est pas perturbé par la dissociation de N_2. En d'autre termes, à une pression, une température, une richesse, et une fraction résiduelle d'un élément fluide donnée, la composition à l'équilibre peut être calculée pour la détermination des concentrations de N_2, O_2, O, OH et H sans considérer l'impact de la dissociation de N_2 sur

ces équilibres.
La deuxième approximation implique la possibilité de résoudre la concentration des atomes d'azote en supposant que leur taux de variation est négligeable, c'est-à-dire que leur concentration ne change pratiquement pas au cours du temps. Cette approximation simplifie le calcul en évitant de considérer les variations rapides des atomes d'azote dans le système présenté par l'équation 2.28 :

$$\frac{d}{dt}[\mathrm{N}] = +k_1[\mathrm{O}][\mathrm{N_2}] - k_{1r}[\mathrm{N}][\mathrm{NO}] - k_2[\mathrm{N}][\mathrm{O_2}] + k_{2r}[\mathrm{NO}][\mathrm{O}] - k_3[\mathrm{N}][\mathrm{OH}] + k_{3r}[\mathrm{NO}][\mathrm{H}] = 0 \quad (2.28)$$

Avec ces deux approximations, l'équation 2.27 peut être écrite comme suit (équation 2.29).

$$\frac{d}{dt}[\mathrm{NO}] = \frac{2R_1(1-\alpha^2)}{1+\alpha R_1/(R_2+R_3)} \quad (2.29)$$

Avec α le rapport entre la concentration d'oxyde nitrique et sa valeur d'équilibre (équation 2.30).

$$\alpha = \frac{[\mathrm{NO}]}{[\mathrm{NO}]_e} \quad (2.30)$$

Les $R_i (i = 1, 2, 3)$ sont les différentes vitesses de réaction définis par l'équation 2.31, les concentrations d'équilibre étant désignées par l'indice e.

$$\begin{aligned} R_1 &= k_1[\mathrm{O}]_e[\mathrm{N_2}]_e \\ R_2 &= k_{2r}[\mathrm{NO}]_e[\mathrm{O}]_e \\ R_3 &= k_{3r}[\mathrm{NO}]_e[\mathrm{H}]_e \end{aligned} \quad (2.31)$$

La quantité totale d'oxyde nitrique qui apparaît dans les gaz d'échappement est calculée en additionnant les fractions de masse de tous les éléments du fluide, selon l'équation 2.32 :

$$\bar{x}_{\mathrm{NO}} = \int_0^1 x_{\mathrm{NO}} dx \quad (2.32)$$

3 Résultats et discussions

Dans un premier temps, la discrétisation du taux de dégagement de chaleur en deux phases est primordiale afin de permettre la modélisation de chacune séparément.

3.1 Discrétisation du taux de dégagement de chaleur

La Figure 2.11 représente les quatre cas étudiés pour la composition des gaz à faible charge (20%), où les différents signaux constituant le taux de dégagement de chaleur (TDC) sont présentés.

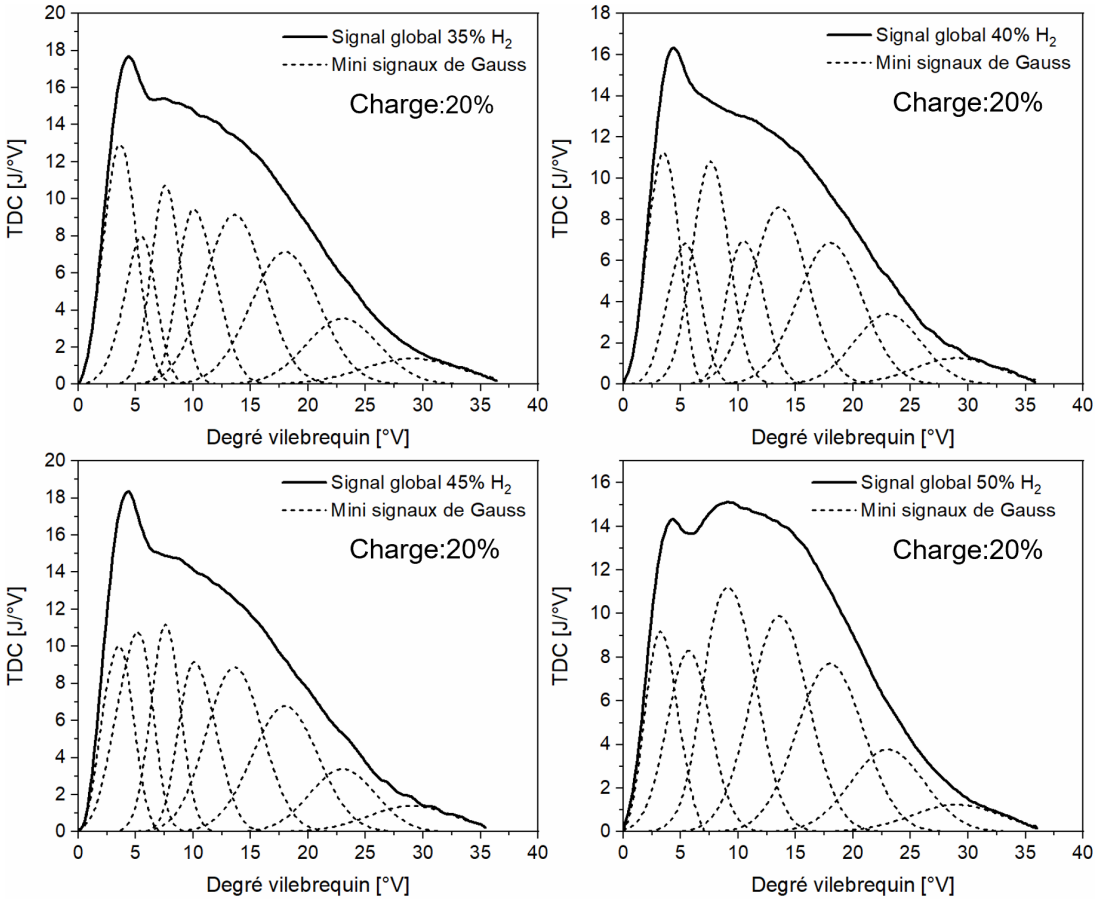


FIGURE 2.11 – Séparation des phases pour les résultats expérimentaux.

D'après les résultats du modèle présentés dans la Figure 2.11, il semble y avoir une concentration des signaux de petite amplitude au milieu de la phase de combustion globale pour correspondre aux résultats expérimentaux très variables dans cette partie de la combustion, où le dégagement de chaleur est à son maximum. Pour modéliser la combustion tardive, qui est caractérisée par un dégagement de chaleur faible et une variation lente, le modèle favorise les signaux de faible amplitude et de phase relativement large dans la dernière phase de combustion. En revanche, pour la première phase de combustion, qui est marquée par une variation rapide due au déclenchement de la combustion du gazole après l'auto-inflammation, le modèle utilise des signaux avec une grande amplitude et une petite phase.

Après cette modélisation basée sur des fonctions Gaussiennes, le modèle décortique les deux phases de combustion selon les conditions mentionnées ci-dessus. La Figure 2.12 représente les variations des taux de dégagement de chaleur qui caractérisent la combustion de la quantité du gazole en fonction du degré vilebrequin et le cumul de cette chaleur dégagée pour les différentes compositions de gaz environnant dans la chambre de combustion. La Figure 2.12-b confirme que la combustion effective du gazole dans la première phase diminue avec l'augmentation du pourcentage d'hydrogène dans le mélange air-gaz. Cela s'explique par le moment de l'allumage de la seconde phase, qui sera détaillé dans la partie suivante. Ainsi, la seconde phase se déclenche

plus tôt lorsque le mélange air-gaz est plus riche en hydrogène, ce qui diminue la contribution de la première phase au taux global de dégagement de chaleur et réduit donc la quantité effective du gazole qui contribue réellement à la première phase de la combustion. Sachant que pour tous les cas de composition du gaz, la différence entre la quantité du gazole injectée et celle brûlée selon le modèle est prise en compte dans la deuxième phase sans traitement spécifique en relation avec la composition du gaz.

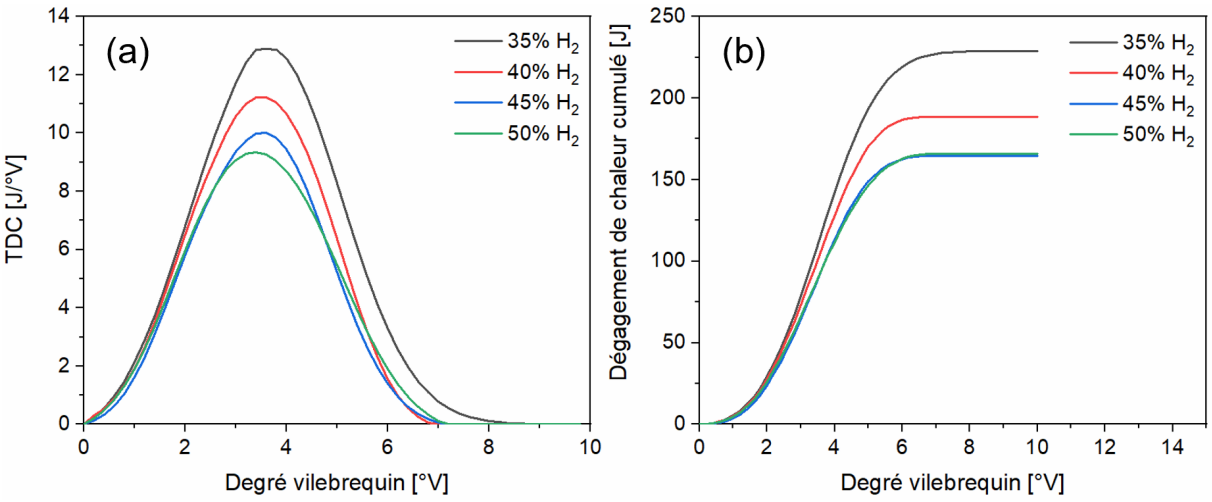


FIGURE 2.12 – (a) Taux de dégagement de chaleur et (b) cumul de dégagement de chaleur.

3.2 Modélisation des délais d'auto-inflammation

Après la séparation des phases, la modélisation du délai d'auto-inflammation du carburant pilote et le délai d'allumage du carburant gazeux est essentiel, comme présenté ci-dessous.

A • Délai d'auto-inflammation du gazole pilote (ID)

La Figure 2.13 représente la surface de réponse exprimée par l'approche de l'équation 2.21, pour laquelle le délai d'auto-inflammation du carburant pilote est représenté comme une fonction des quantités d'hydrogène et de gaz naturel existant dans l'air de la chambre de combustion. Sachant que la quantité du gazole injectée comme carburant pilote est fixe (5g/min) pour tous les cas de fonctionnement.

Cette modélisation est conforme avec les résultats expérimentaux pour lesquels le délai d'auto-inflammation augmente en fonction de l'augmentation de la charge et diminue avec l'augmentation de la quantité d'hydrogène pour une charge fixe. Le premier constat est dû au remplacement d'une quantité d'oxygène par du gaz, ce qui ralentit l'auto-inflammation du carburant pilote. Tandis que le deuxième constat est justifié par le pouvoir calorifique de l'hydrogène, qui est plus important par rapport à celui du gaz naturel. Le remplacement du gaz naturel par de l'hydrogène implique une quantité massique du gaz primaire moins importante ce qui laisse la place à l'oxygène favorisant l'auto-inflammation du carburant pilote.

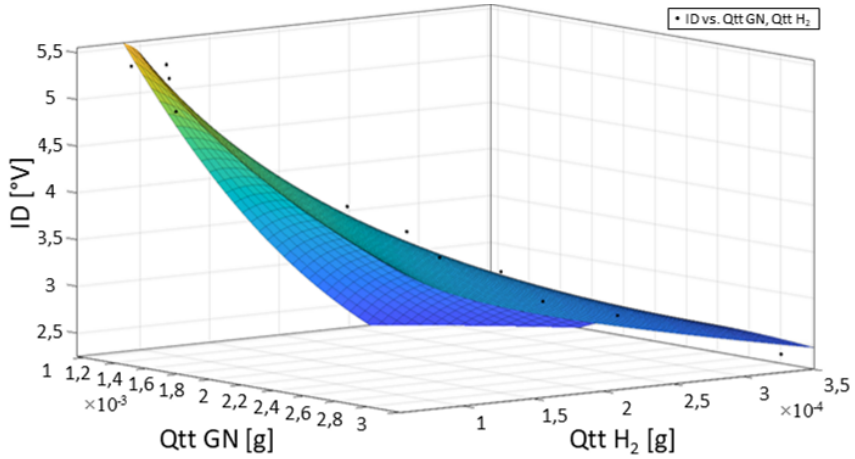


FIGURE 2.13 – Surface de réponse du délai d'auto-inflammation du gazole pilote.

Le délai d'auto-inflammation du carburant pilote est un paramètre essentiel pour garantir la précision du modèle. C'est pourquoi il peut être considéré comme un indicateur de la précision et de la fiabilité du modèle pour les différents cas de fonctionnement.

En traçant les délais d'auto-inflammation dérivés du modèle défini par l'équation 2.21 par rapport aux valeurs expérimentales, la précision du modèle peut être évaluée. Dans cette étude, les tracés des délais d'auto-inflammation sont présentés dans la Figure 2.14. Il est remarquable que tous les points sont distribués le long de la première bissectrice. Tous ces points sont regroupés entre deux limites représentant une erreur relative maximale de ±0,5 (°V), ce qui explique la précision de ce nouveau modèle spécifique au délai d'auto-allumage pour de larges plages de fonctionnement concernant la charge et la composition du mélange gazeux environnant dans la chambre de combustion pour un fonctionnement en mode dual fuel.

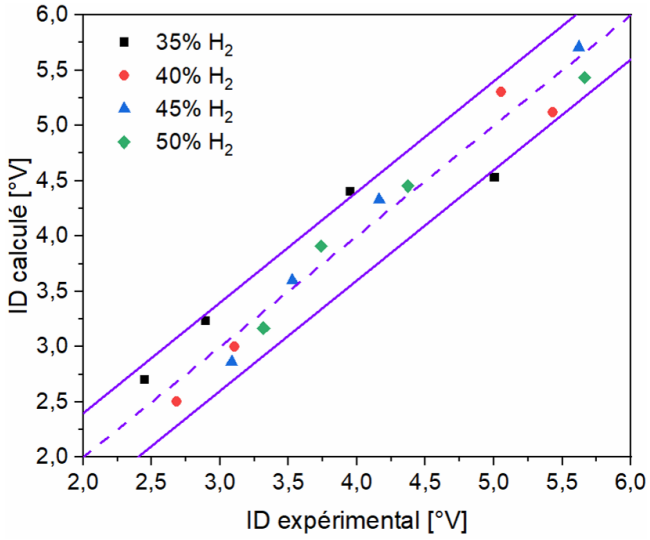


FIGURE 2.14 – Comparaison entre le ID expérimental et calculé.

B • Modèle général du délai d'auto-inflammation du gazole pilote (ID_g)

Dans le but de créer un modèle de délai d'auto-inflammation le plus général possible l'utilisation de l'outil de modélisation mathématique est important. Pour cette raison un modèle RNA (Réseaux Neuronaux Artificiels) est utilisé selon la boucle dans la Figure 2.15 pour la modélisation du délai d'auto-inflammation en fonction de :

• Pression (P_{inj}^{CC}) et température (T_{inj}^{CC}) dans la chambre de combustion à l'instant de l'injection pilote.

• Composition du gaz primaire dans le cylindre en termes de fraction massique de gaz naturel (Fm_{GN}) et d'hydrogène (Fm_{H_2}) ce qui contrôle la fraction massique de l'oxygène existant avant le début de la combustion.

• Pression d'injection (P_{inj}), qui est considérée comme paramètre important pour le délai d'auto-inflammation vu qu'elle influe directement l'atomisation et l'évaporation du carburant injecté.

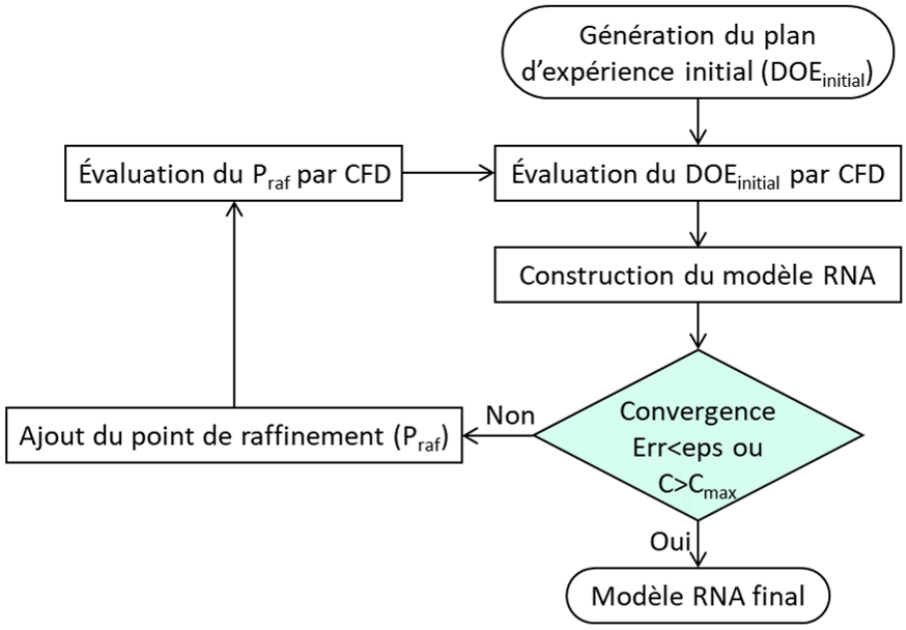


FIGURE 2.15 – Organigramme pour la construction du modèle de ID_g.

Dans un premier temps la description et la validation de l'approche numérique utilisée pour l'évaluation du délai d'auto-inflammation selon les paramètres cité précédemment est indispensable. Dans le but de minimiser le temps de calcul pour la création du modèle global, qui est contrôlé directement par le temps de calcul pour chaque cas d'étude. Comme l'indique la Figure 2.16 l'initialisation de la chambre de combustion avec les conditions d'entrées a eu lieux juste au moment de l'injection. Le développement des conditions physique (pression, température et volume) entre le point mort bas (PMB) et l'instant d'injection est assuré par un modèle d'analyse basé sur les lois de la thermodynamique.

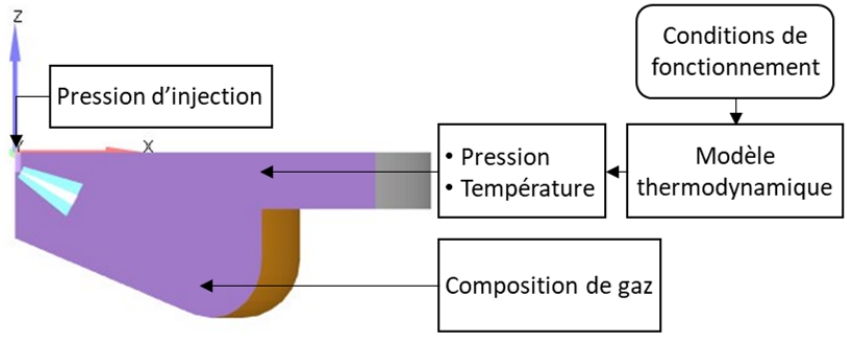


FIGURE 2.16 – Évaluation de ID_g par l'outil CFD Converge.

Cette modélisation a traité un cas général malgré que le banc d'essai utilisé dans cette étude n'est pas encore équipé ni d'un système de contrôle pour la pression d'injection ni d'un système de contrôle de la pression et la température à l'admission (suralimentation, superheater ...). Les cas de validation ont la même pression et température de la chambre de combustion au moment de l'injection et ils ont aussi la même pression d'injection. La Figure 2.17 présente une comparaison entre les délais d'auto-inflammation expérimentaux et simulés, où l'erreur relative maximale ne dépasse pas ±0,4 (°V) ce qui affirme fortement la précision de l'outil numérique utilisé.

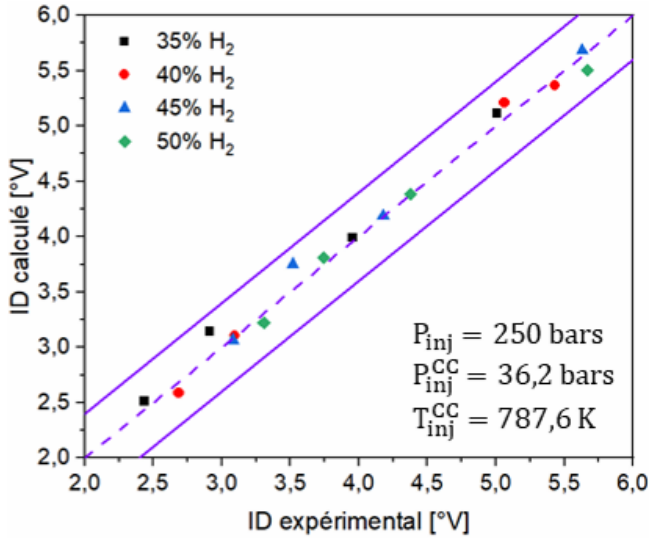


FIGURE 2.17 – Comparaison entre le délai d'auto-inflammation (ID) expérimental et simulé.

Les RNA sont constitués de noeuds interconnectés appelés neurones artificiels, qui facilitent la transmission des signaux entre eux. La force de ces connections est déterminée par des poids numériques, jouant un rôle central dans la régulation de la circulation de l'information au sein du réseau. Les RNA comprennent généralement divers composants, notamment le nombre de couches, les neurones au sein de chaque couche, l'algorithme d'apprentissage utilisé et les fonctions d'activation spécifiques appliquées à chaque couche, contribuant ensemble à la configuration de l'architecture du réseau [144].
Un exemple illustratif d'un RNA est le Perceptron Multicouche (PMC), qui s'inscrit dans la

catégorie des RNA à Propagation Avant (RNA-PA). Le terme "propagation avant" implique que les connexions au sein du réseau sont orientées de la couche d'entrée vers la couche de sortie. Un PMC se compose généralement d'une couche d'entrée, d'une couche de sortie et d'une ou deux couches cachées positionnées entre elles. Pour de nombreuses situations de résolution de problèmes, l'introduction d'une seule couche cachée dans le réseau est généralement considérée comme appropriée. Cependant, l'introduction de plusieurs couches cachées ou d'un nombre excessif de neurones au sein d'une couche cachée peut entraîner un phénomène connu sous le nom de surapprentissage, tandis qu'un nombre insuffisant de neurones dans la couche cachée peut conduire à un sous-apprentissage. Une représentation visuelle d'un modèle RNA-PA comprenant une seul couche cachée est présentée dans la Figure 2.18, offrant une illustration de la circulation de l'information.

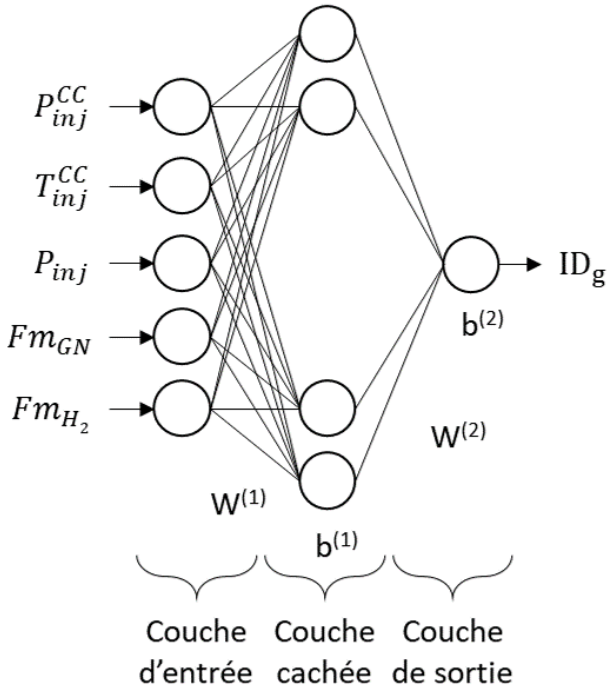


FIGURE 2.18 – Architecture du modèle RNA-PA.

Dans le contexte d'un RNA-PA, les signaux sont communiqués entre les couches par le biais de fonctions d'activation, également appelées fonctions de transfert. Ces fonctions de transfert ont la capacité de convertir les signaux d'entrée en signaux de sortie linéaires ou non linéaires. Les fonctions de transfert couramment employées incluent les fonctions linéaires pures, log-sigmoïde et tangente-sigmoïde, comme illustré par les équations 2.33 et 2.34 [145].

$$a = \frac{1}{1 + e^{-n}} \tag{2.33}$$

$$a = \frac{1}{1 + e^{-2n}} - 1 \tag{2.34}$$

Dans un premier temps, le plan d'expérience initial ($DOE_{initial}$) est généré. Cette étape a fait appel à l'outil "Latin Hypercube Sampling" (LHS) [146] pour assurer une distribution équilibrée

des points d'échantillonnage dans l'espace des paramètres. Cette méthodologies a été utilisée afin d'obtenir un ensemble de données diversifié et représentatif, tout en minimisant le nombre d'évaluations coûteuses du système.
Une fois que le $DOE_{initial}$ est généré, les points sont évalués utilisant l'outil Converge CFD validé au préalable. Les résultats précis et fiables concernant le comportement du système à ces points d'échantillonnage sont obtenus. Les données détaillées sur les variables de sortie du système sont fournies par les simulations CFD, et elles serviront comme données d'entraînement pour le méta-modèle.

Avec les données CFD a disposition, le méta-modèle initial est créé en utilisant un RNA-PA comme présenté précédemment. Après la création du méta-modèle, et si les critères de convergence ne sont pas satisfaits, une étape de raffinement est mise en place.
La méthode de "minimisation de la distance maximale" est utilisée pour identifier un point de raffinement potentiel (P_{raf}). Ce point est choisi de manière à maximiser l'information qu'il apportait au méta-modèle tout en minimisant le coût de simulation CFD. Il est important de noter que le choix de ce point de raffinement est guidé par des considérations d'incertitude et d'exploration de l'espace des paramètres.
Le point de raffinement est ensuite évalué en utilisant l'outil CFD pour obtenir des données de sortie précises. Ces données sont ensuite ajoutées aux données d'entraînement pour la mise à jour du méta-modèle.
Le point de raffinement est incorporé dans le plan d'expérience (DOE) pour enrichir les informations du méta-modèle. Cette mise à jour a permis de garantir que le méta-modèle serait en mesure de mieux approcher le système, en particulier dans les régions où il était précédemment déficient.
Cette méthodologie itérative est poursuivie jusqu'à ce que la convergence du méta-modèle soit atteinte, indiquant que le méta-modèle est capable de représenter de manière précise le comportement du système dans l'ensemble de l'espace des paramètres d'intérêt.

Dans le but d'assurer l'indépendance du modèle créé au nombre de neurones dans la couche cachée, une étude de l'effet de ce nombre sur l'erreur quadratique moyenne est mise en place. Cette étude est effectuée sur la convergence du méta-modèle initial créé selon le plan d'expérience initial ($DOE_{initial}$) où le temps de calcul est pris comme critère d'arrêt, comme indiqué dans le Tableau 2.11, où trois méthodes différentes ont été utilisé pour exécuter la rétropropagation.

TABLE 2.11 – Paramètres de calcul pour le test d'indépendance de RNA.

Paramètres	**Plages de variation**	Taille de $DOE_{initial}$	25 échantillons
P_{inj}^{CC}	[40 - 60] bar	Temps max de calcul	2 sec
T_{inj}^{CC}	[650 - 1500] K	Algorithme de rétropropagation	
Fm_{GN}	[0,0012 - 0,004]	Levenberg-Marquardt back propagation (LM) [147]	
Fm_{H_2}	[0 - 0,0005]	BFGS quasi-Newton back propagation (BFG) [148]	
P_{inj}	[250 - 1000] bar	Scaled Conjugate Gradient back propagation (SCG) [149]	

Dans un premier temps, le réseau a été entraîné en sélectionnant au hasard un certain nombre de neurones dans la couche cachée. Ensuite, le nombre de neurones a été augmenté ou diminué de manière à ce que l'Erreur Quadratique Moyenne (EQM) atteigne une valeur minimale. Le nombre de neurones pour lequel l'EQM est minimale a été sélectionné comme le nombre optimal de neurones dans la couche cachée. La variation de l'EQM en fonction du nombre de neurones dans la couche cachée pour différents algorithme de rétropropagation est illustrée dans la Figure 2.19.

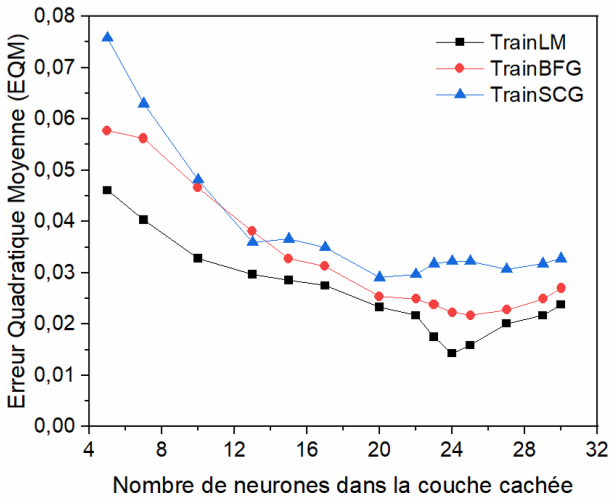


FIGURE 2.19 – Variation de l'EQM en fonction du nombre de neurones pour différents algorithme de rétropropagation.

Les résultats trouvés affirment l'efficacité de l'algorithme de Levenberg-Marquardt par rapport aux autres algorithmes testés, vu qu'il assure l'EQM la plus faible pour touts les nombres de neurones testés. Un nombre de neurones de 24 est supposé optimale dans ce cas d'étude car il assure un minimum d'EQM (0,0146) pour l'algorithme de Levenberg-Marquardt.

Après la fixation des paramètres du modèle RNA-PA en termes d'algorithme d'entraînement utilisé et de nombre de neurones dans la couche cachée, la boucle de convergence global est lancée pour la création du modèle RNA-PA complet dédié au calcul du délai d'auto-inflammation en fonction de la pression et la température dans la chambre de combustion à l'instant d'injection, les fractions massiques du gaz naturel et d'hydrogène, et la pression d'injection.
Le Tableau 2.12 représente les paramètres d'entrés du modèle en termes de nombre de population initial (POP_{init}), erreur requise ($Erreur_{requise}$), et coût maximal permis ($Coût_{max}$). Sachant que les plages de variation des paramètres d'entrés sont les mêmes représentées précédemment dans le Tableau 2.11. Le Tableau 2.12 représente aussi le coût de calcul après la création du modèle ($Coût$) et la précision du modèle ($Erreur_{finale}$), étant donné que l'erreur requise dans ce cas est achevée sans atteindre le coût de calcul maximal.

TABLE 2.12 – Paramètres d'entrée et résultats du modèle RPA-PA.

Paramètres du modèle			Résultats du modèle	
POP_{init}	$Erreur_{requise}$	$Coût_{max}$	$Erreur_{finale}$	$Coût$
25	>0,985	250	0,98565	204

La Figure 2.20 illustre les valeurs globales du coefficient de détermination (R) pour le modèle développé. Cette valeur est représentée pour la population d'entraînement, la population de validation, la population de test et la population globale. Sachant que les populations d'entraînement, de validation et de test représentent : 50%, 20% et 30% de la population globale respectivement. Les résultats, selon les valeurs de R, affirment la grande précision du modèle développé.

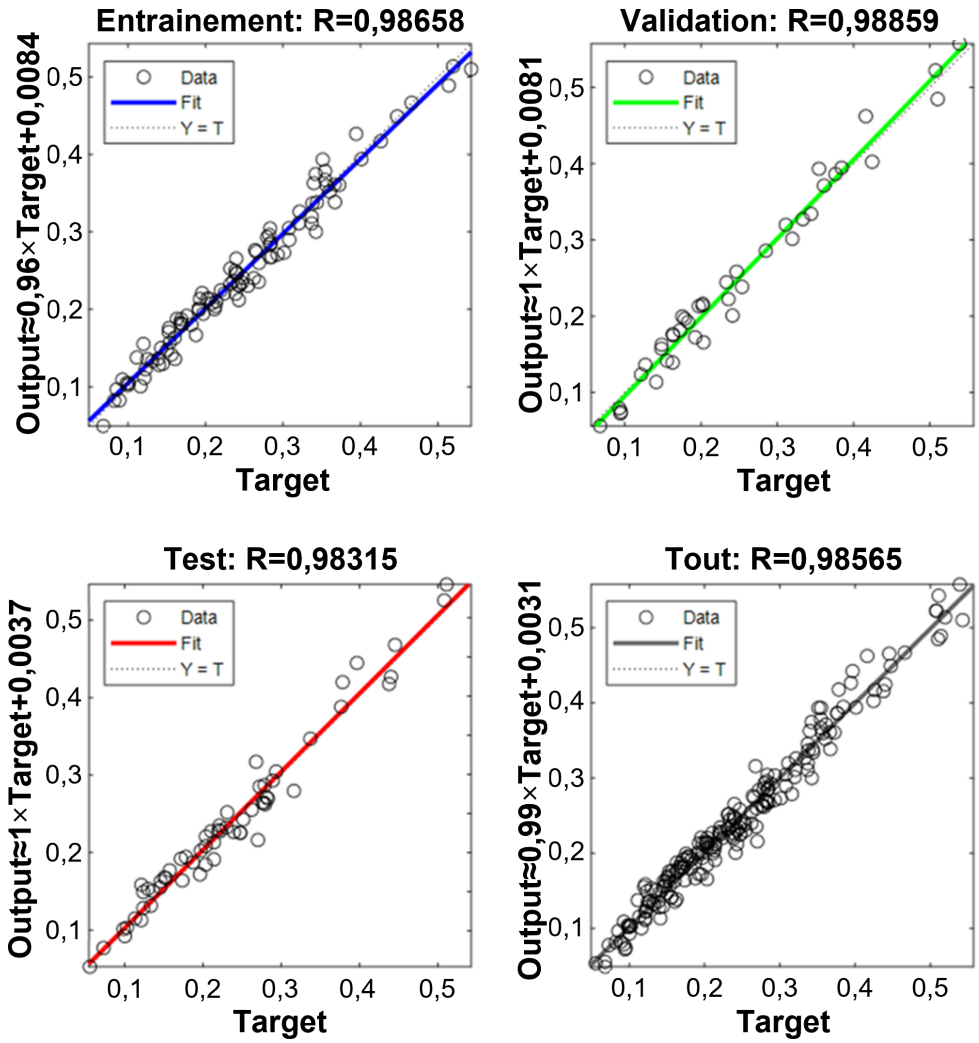


FIGURE 2.20 – Valeurs globales de R pour le modèle développé.

Avec ce méta-modèle prédictif, le délai d'auto-inflammation du carburant pilote (gazole) peut être déterminé pour un fonctionnement dual fuel. Ce modèle est valable pour une large gamme de moteur dual fuel gazole/gaz naturel-hydrogène. Il ne prend pas en considération l'influence

de la quantité du carburant pilote sur le délai d'auto-inflammation vu que cette quantité reste, dans le cas de fonctionnement dual fuel conventionnel, faible où elle assure moins de 10% de l'énergie globale délivrée par le moteur.
Le modèle numérique utilisé dans cette étude est conçu pour un volume mort relativement important. Cette démarche est adoptée dans le but d'éliminer l'influence de la forme du bol sur le délai d'auto-inflammation. Pour cela, le jet du gazole se développe librement dans la chambre de combustion, ce qui se déroule réellement dans le cas de fonctionnement dual fuel, où la faible quantité du carburant pilote ne permet pas au jet d'atteindre les parois du bol.
Les remarques relatives aux résultats trouvés, illustrés dans la Figure 2.21, peuvent être résumés comme suit :

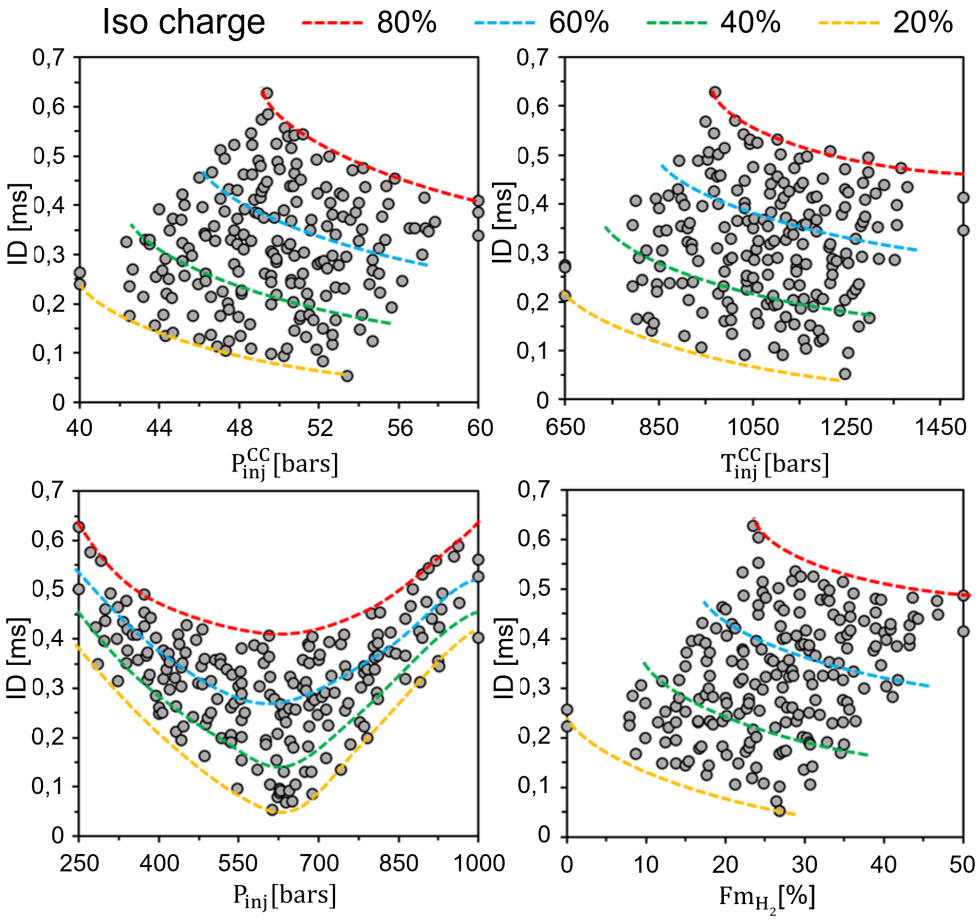


FIGURE 2.21 – Variations de ID en fonction des paramètres d'entrée du modèle RNA-PA.

• Pour une charge donnée du moteur : l'augmentation de la quantité d'hydrogène implique une diminution du délai d'auto-inflammation. Ce constat est expliqué par le pouvoir calorifique de l'hydrogène qui est largement supérieur par rapport à celui du gaz naturel, ce qui implique moins de quantité d'hydrogène pour assurer l'énergie conditionnée par la charge. Cette diminution de gaz primaire en termes de masse implique une augmentation de la fraction massique d'oxygène qui favorise l'auto-inflammation du carburant pilote et engendre des délais d'auto-inflammation plus faibles.

• L'augmentation de la quantité du gaz primaire sous l'effet de l'augmentation de la charge implique une augmentation du délai d'auto-inflammation. Cela est justifié par le remplacement d'une quantité d'oxygène par du gaz. Pour cette raison, le délai d'auto-inflammation augmente sous l'effet de la diminution de la quantité d'oxygène présente dans la chambre de combustion au moment de l'injection pilote.
• L'augmentation de la pression et de la température dans la chambre de combustion implique une diminution du délai d'auto-inflammation vu qu'elle crée des conditions favorisantes à l'auto-inflammation.
• L'impact de la pression d'injection obéi à deux phases. Dans un premier temps l'augmentation de la pression d'injection est accompagnée par une diminution du délai d'auto-inflammation jusqu'à une limite de cette pression (600 bar) après laquelle ce délai commence à augmenter. Cela est justifié principalement par la liaison entre cette pression d'injection et le délai d'auto-inflammation physique, qui est contrôlé par l'atomisation et l'évaporation du carburant. Des pressions d'injection élevés améliorent l'atomisation et l'évaporation se qui implique des délais d'auto-inflammation relativement faibles. Au-delà d'une limite critique de la pression d'injection, la vitesse des atomes augmente trop se qui crée un éloignement important entre eux et affect la richesse locale dans le jet d'injection. Tous ces phénomènes affectent le délai d'auto-inflammation qui commence à augmenter après cette valeur critique selon les résultats présentés dans la Figure 2.21.

C • Délai d'allumage du mélange air-gaz (ID2)

La Figure 2.22 représente la variation du délai d'allumage (ID2) du mélange gazeux dans la chambre de combustion en fonction de la charge pour différentes compositions de gaz en fonction du pourcentage d'hydrogène (H_2) existant dans le gaz total. Il est à noter que le délai d'allumage du mélange représente le temps entre l'allumage du gazole et le moment de l'allumage du mélange de gaz. D'après les résultats, pour une même composition de gaz (même pourcentage d'H_2), le ID2 diminue avec l'augmentation de la charge. Pour la même charge, le ID2 diminue avec l'augmentation du pourcentage de H_2.

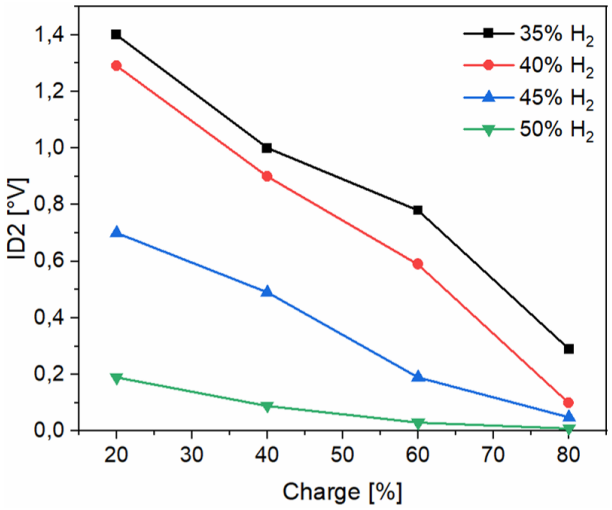


FIGURE 2.22 – Délai d'allumage du mélange air-gaz.

Pour le même pourcentage d'hydrogène, la diminution de ID2 est due aux conditions ambiantes dans la chambre de combustion qui deviennent plus favorables à la combustion avec l'augmentation de la charge.
Pour la même charge, le ID2 diminue avec l'augmentation du pourcentage de H_2, car l'hydrogène nécessite moins d'énergie pour s'enflammer que le gaz naturel. Ainsi, le mélange global nécessite moins d'énergie pour s'enflammer lorsque le pourcentage d'hydrogène augmente (le pourcentage de gaz naturel diminue), ce qui réduit le délai d'allumage du mélange de gaz.

3.3 Taux de dégagement de chaleur

Le modèle quasi-dimensionnel du jet gazole présenté précédemment est un modèle caractérisé par un haut degré de prédictivité puisqu'il nécessite des paramètres directement liés à la physique de la combustion, tels que la richesse (Figure 2.23) qui est contrôlée par la quantité de carburant résultant de la section de séparation de phase comme le montre la Figure 2.12.

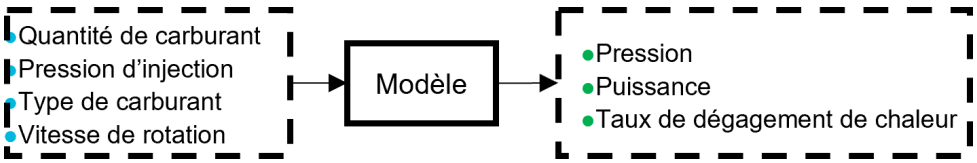


FIGURE 2.23 – Illustration du modèle quasi-dimensionnel.

Cette quantité de combustible effectif qui participe au taux de dégagement de chaleur pendant la première phase est supposée constante pour la même composition de gaz. Après lecture de cette quantité par le modèle de jet, ce dernier est chargé de modéliser le taux de dégagement de chaleur (Figure 2.23-a).
Comme déjà indiqué, le premier objectif du modèle pendant le traitement de la deuxième phase est la recherche de la distribution optimale pour les mini-signaux de Gauss qui est valable pour tous les cas pris pour l'apprentissage du modèle.

La Figure 2.24 représente la distribution finale des mini-fonctions de Gauss en fonction de la phase globale de chaque cas.

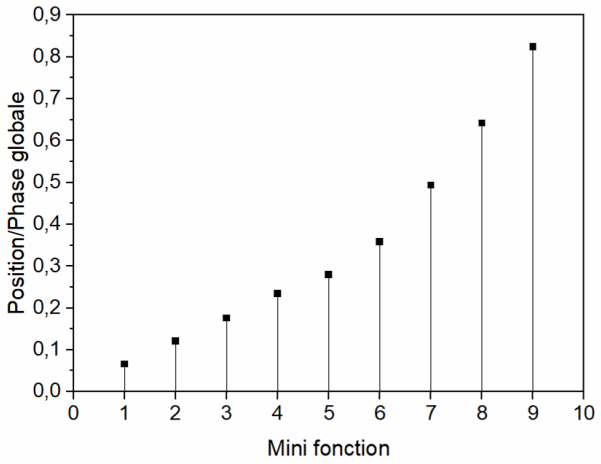


FIGURE 2.24 – Distribution des signaux de Gauss pour la deuxième phase.

Les résultats de la Figure 2.24 présentent une analogie avec la phénoménologie de la combustion du gaz en mode dual fuel, qui se caractérise par une combustion intense au milieu de la phase globale avec un début et une fin de combustion lents, ce qui est illustré par une forte concentration des mini-fonctions au milieu de la phase globale avec une concentration moins intense des deux côtés.

La Figure 2.25 (pour quatre compositions de gaz de la même charge de 40%) représente les distributions et les variations des mini-signaux de Gauss avec leurs sommes qui modélisent le taux global de dégagement de chaleur spécifique à la deuxième phase. Les quatre cas présentés dans cette figure sont des cas illustratifs sachant que les 16 cas d'apprentissage se présentent de la même manière.

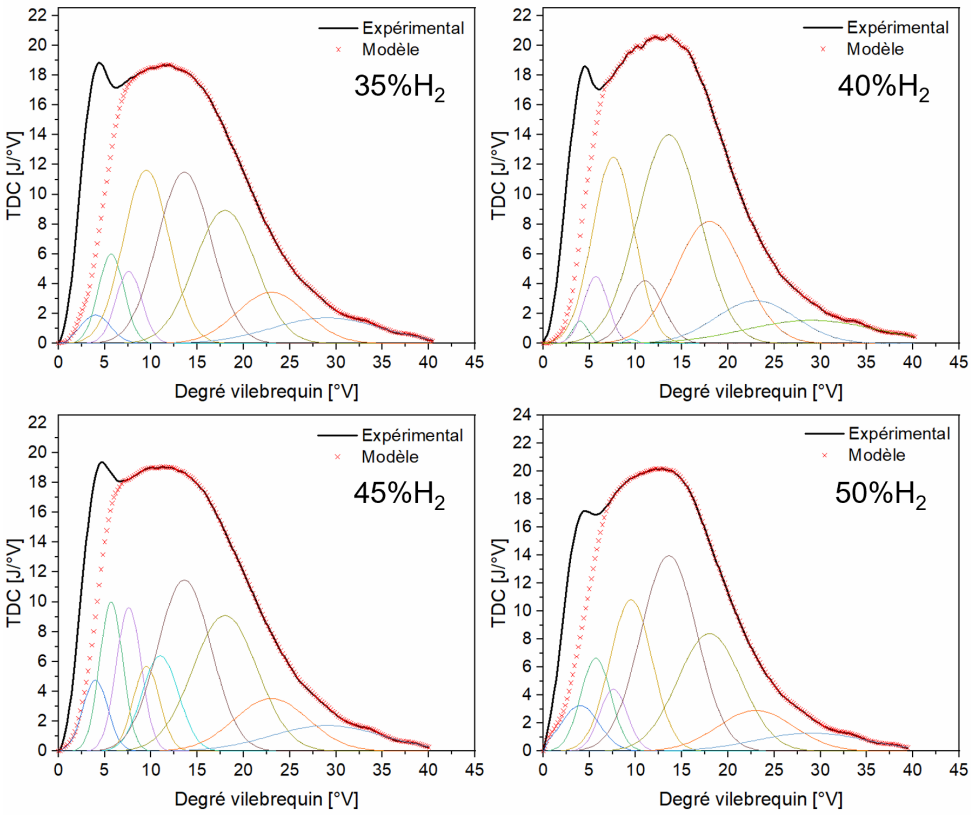


FIGURE 2.25 – Modélisation Gaussienne de la seconde phase pour différentes compositions de gaz (charge = 40%).

La Figure 2.26 présente les résultats finaux du modèle qui résume les deux signaux modélisés pour les deux phases de combustion avec leur somme qui définit le taux global de dégagement de chaleur avec une erreur maximale qui ne dépasse pas 2,14% par rapport aux résultats expérimentaux, ce qui confirme la fidélité et la précision du modèle.

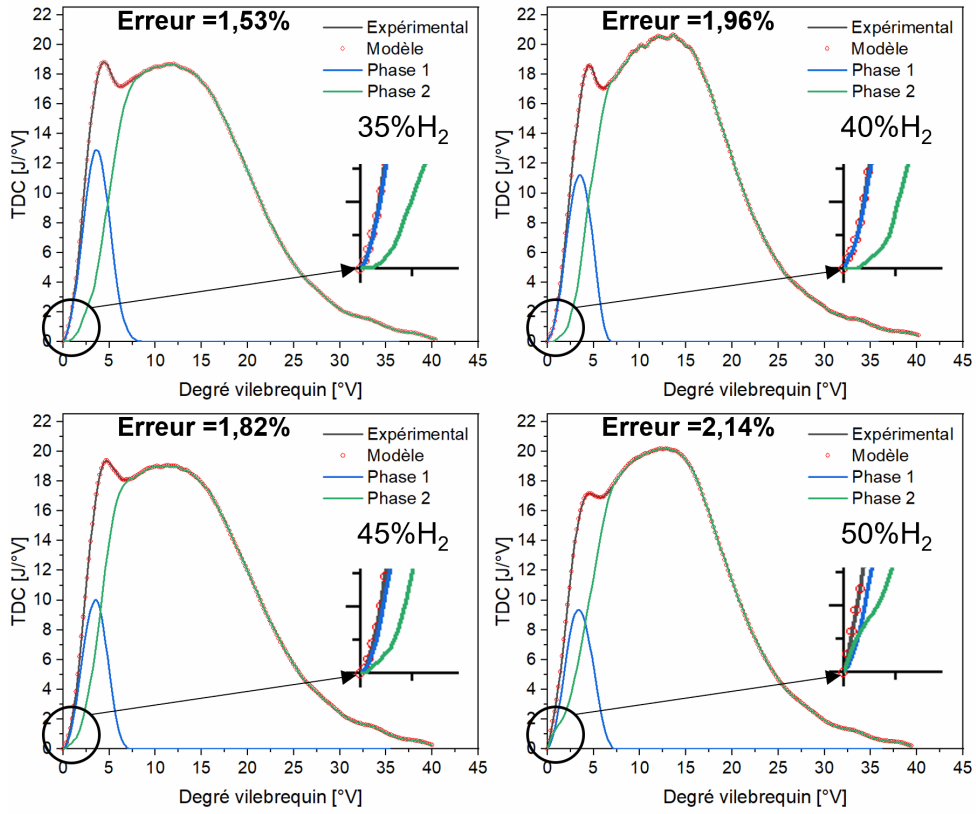


FIGURE 2.26 – Modélisation globale des deux phases pour 40% de charge avec différentes compositions de gaz.

La Figure 2.26 montre un zoom sur le déclenchement du taux de dégagement de chaleur qui est contrôlé par plusieurs paramètres, à savoir le délai d'auto-inflammation du combustible pilote, le délai d'allumage du mélange air-gaz, la charge et la composition du mélange dans la chambre de combustion. Ce zoom confirme les résultats de la Figure 2.25, pour laquelle le délai d'allumage du mélange air-gaz diminue avec l'augmentation du pourcentage de H_2 dans la constitution du gaz. Ce constat s'explique par le fait que l'hydrogène nécessite moins d'énergie pour s'enflammer et que le mélange devient donc moins résistant à l'inflammation, ce qui est confirmé par l'allure du taux de dégagement de chaleur propre à la seconde phase lorsqu'elle est déclenchée plus intensément avec l'augmentation du pourcentage de H_2 dans le mélange air-gaz. D'après les résultats, cette approche de modélisation présente des résultats plus précis que ceux donnés par la modélisation de Wiebe. Cela s'explique par la complexité du taux de dégagement de chaleur en mode dual fuel avec enrichissement en hydrogène, pour lequel la détermination du nombre de fonctions de Wiebe pouvant contrôler le signal global de dégagement de chaleur pendant la deuxième phase devient vraiment complexe.

En particulier à forte charge, où l'allure la variation du taux de dégagement de chaleur sort du conventionnel. Pour cette raison, cette approche basée sur une multi-fonctions de Gauss s'est avérée être une base pour une bonne modélisation, car elle délivre le nombre, la position et la forme des mini-signaux pour modéliser le signal global du taux de dégagement de chaleur. Parti-

culièrement à forte charge, la variation du taux de dégagement de chaleur sort du conventionnel. Malgré ça, l'approche développée garde une précision élevée et une bonne reproductibilité des résultats, comme l'indique la Figure 2.27.

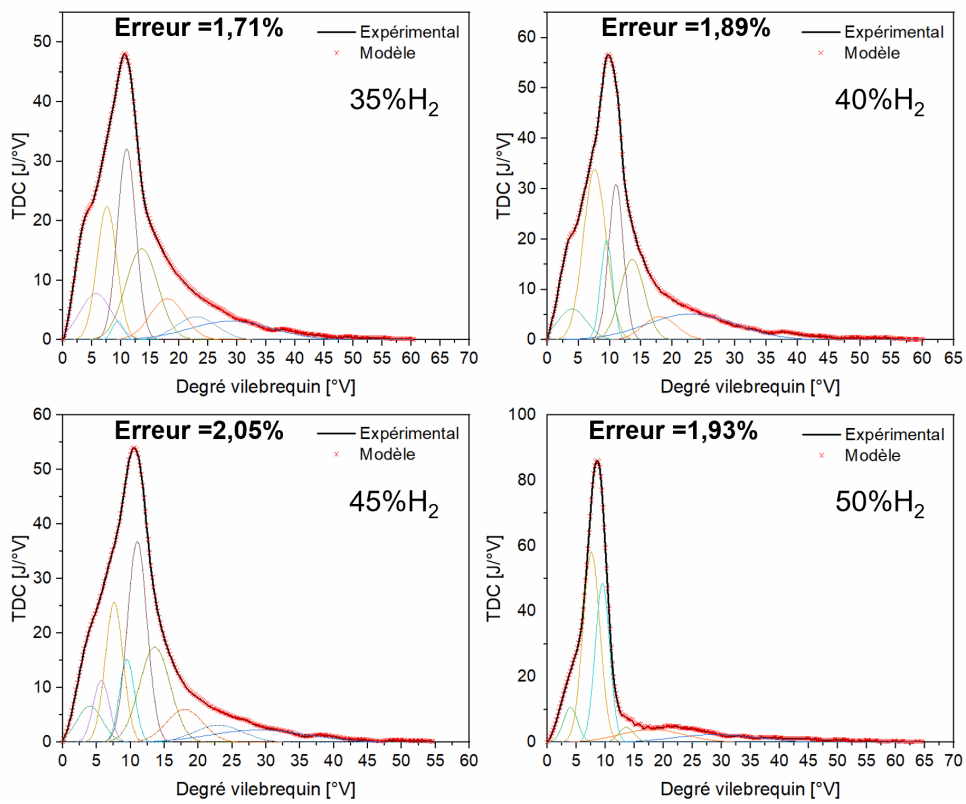


FIGURE 2.27 – Modélisation Gaussienne globale pour une charge de 80% avec différentes compositions de gaz.

Comme mentionné précédemment, la prédictivité de l'approche présentée dans ce travail est considérée comme l'un des principaux objectifs, c'est pourquoi les surfaces de réponse des paramètres a_i et c_i (équation 2.19) sont construites via l'outil "Thin Plate Spline" dans le but d'assurer la continuité des résultats pour l'ensemble de la plage de charge entre 20% et 80% et l'ensemble de la plage d'enrichissement par l'hydrogène entre 35% et 50% . La Figure 2.28 représente deux exemples illustratifs de ces surfaces de réponse pour deux paramètres.

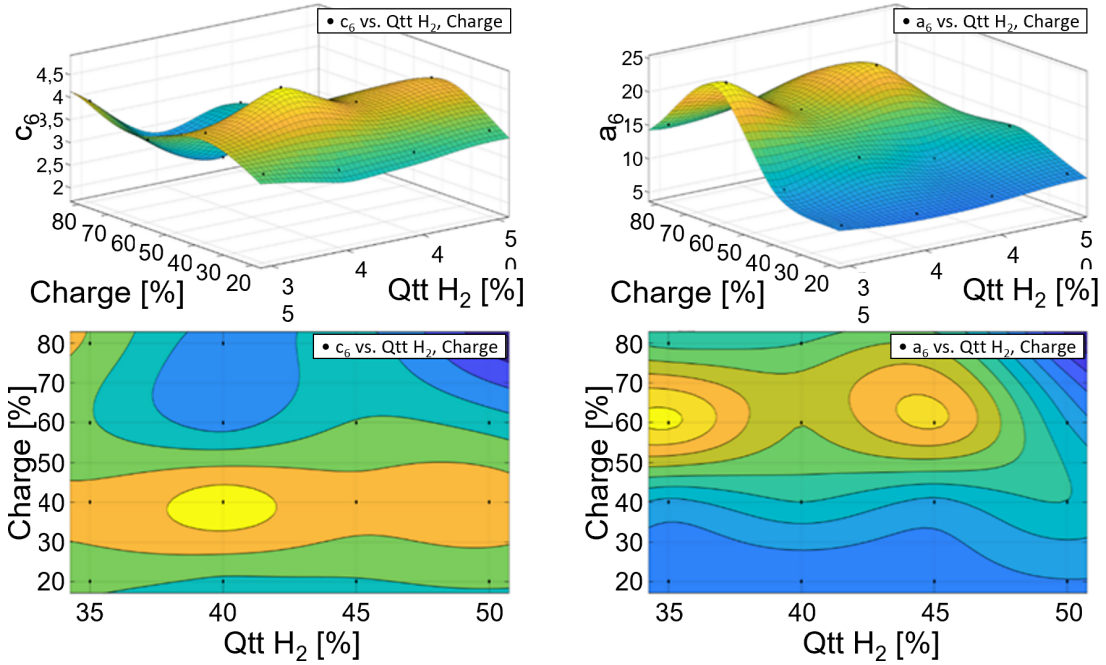


FIGURE 2.28 – Surfaces de réponse pour les exemples de modélisation des paramètres c_6 et a_6.

La prédiction du modèle des émissions de NO_x, présenté précédemment, est validée selon les résultats de la Figure 2.29. Dans cette dernière, une comparaison entre les résultats du modèle et les résultats expérimentaux (fonctionnement en mode dual fuel gaz naturel-hydrogène/gazole sur le banc d'essais Lister-Petter présenté précédemment) est mise en œuvre. Cette validation prend en considération l'effet de la charge et le pourcentage d'hydrogène utilisé pour l'enrichissement, où l'erreur maximale est de 4,95%, ce qui valide largement ce modèle de prédiction de NO_x.

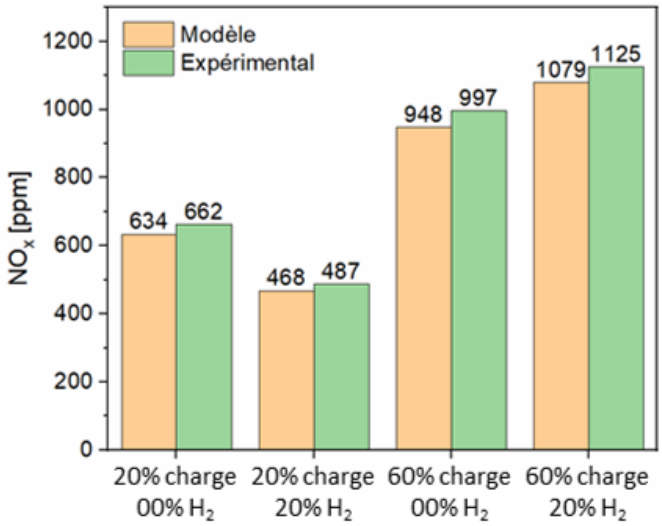


FIGURE 2.29 – Validation du modèle de prédiction de NO_x.

Les résultats du modèle, expliqué précédemment, pour les émissions d'oxydes d'azote (NO_x) sont présentés dans la Figure 2.30. La formation de NO_x est principalement influencée par trois facteurs : la durée de la combustion, la température et la concentration en oxygène. Les émissions

de NO_x sont plus importantes à des charges élevées du moteur en particulier avec l'ajout de l'hydrogène. La présence de H_2 dans la composition du gaz primaire améliore la combustion, ce qui se traduit par un taux de dégagement de chaleur plus élevé et des taux de NO_x plus importants. En d'autres termes, la raison d'augmentation des émissions de NO_x est la formation thermique de NO en raison de l'augmentation de la température de combustion. La formation thermique de NO se produit dans une réaction à haute température avec la décomposition de l'azote qui contient la transformation de l'azote en ses radicaux pour constituer le NO. Selon les résultats, les émissions de NO_x sont 20% plus élevés avec un mélange composé de 30% d'hydrogène par rapport au gaz naturel pure à 80% de charge moteur. Des mesures doivent être prises pour contrôler les émissions de NO_x à des charges élevées où le meilleur compromis doit être trouvé.

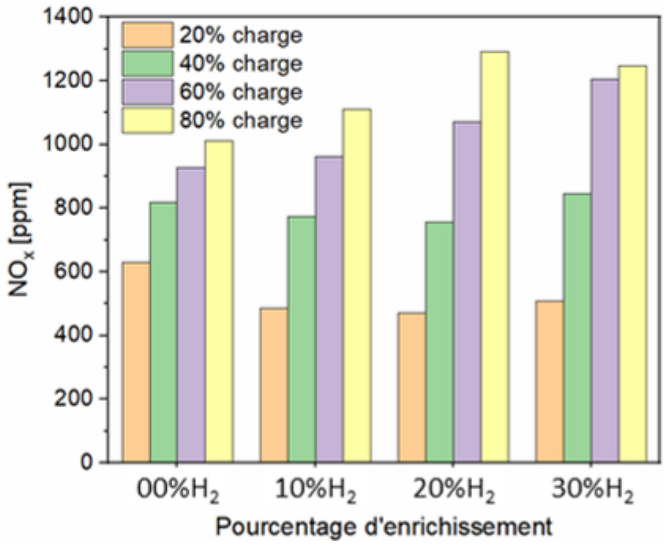


FIGURE 2.30 – Variations de NO_x selon la charge moteur et le taux d'enrichissement avec l'hydrogène.

4 Conclusion

Le modèle présenté dans ce chapitre traite la modélisation de la combustion dans les moteurs fonctionnant en mode dual fuel. Il a été développé pour pallier le manque flagrant de modèles prédictifs traitant ce type de combustion.
Avec une description phénoménologique, le modèle proposé traite une large gamme de fonctionnement du moteur, soit pour la charge allant de 20% à 80%, soit pour la composition du mélange air-gaz environnant dans la chambre de combustion, en traitant le cas du mélange hydrogène/gaz naturel avec une concentration volumétrique d'hydrogène comprise entre 35% et 50% du volume global du mélange gazeux.

Le modèle sépare les phases du taux de dégagement de chaleur, à savoir la phase de combustion du carburant pilote et la phase de combustion du mélange air-gaz. Ensuite, il modélise chacune d'entre elles avec un modèle approprié. La première phase est traitée par un modèle

de jet, développé dans le cadre de ce travail, puisqu'elle est contrôlée par les caractéristiques du jet qui se développe dans la chambre de combustion après l'injection. Alors que la deuxième phase est traitée par un modèle mathématique tout aussi original et qui est basé sur la discrétisation Gaussienne. Le délai d'auto-inflammation du carburant pilote est traité soigneusement vu la complexité de ce paramètre en mode dual fuel. Dans ce cadre deux nouvelle stratégie ont été mise en œuvre en se basant sur une corrélation mathématique d'un côté et sur un outil de méta-modélisation d'un autre côté.

Le modèle a été validé pour plusieurs cas de fonctionnement concernant la charge et la composition du mélange air-gaz. Il a montré une très bonne fiabilité et une forte prédictivité. Cette nouvelle approche a démontré de très bonnes qualités par rapport au modèle conventionnel de Wiebe qui perd sa précision pour le mode dual fuel à forte charge, en particulier avec un mélange air-gaz riche en hydrogène, où le nouveau modèle garde une très bonne précision.
La fiabilité, la précision et la prédictivité sont des propriétés qui caractérisent ce modèle et lui donnent la possibilité d'être un outil pour : la conception préliminaire ou l'adaptation d'une chambre de combustion des moteurs diesel pour un mode dual fuel et l'analyse de fonctionnement pour ce mode de combustion.

Chapitre 3

Limitations du moteur dual fuel : cliquetis et surchauffe d'injecteurs

Objectifs

Le présent chapitre repose sur la modélisation de deux problématiques majeures qui se manifestent dans les moteurs à combustion interne fonctionnant en mode dual fuel. La première section du chapitre est basée sur le développement d'un modèle de prédiction de cliquetis dans les moteurs dual fuel, le modèle final est utilisé pour l'optimisation de la stratégie d'injection directe d'eau comme solution pour la suppression de ce phénomène. La deuxième section se concentre sur l'élaboration d'une nouvelle approche dédiée à l'analyse thermique de l'injecteur du carburant afin de suivre l'évolution du champ de température dans cet élément essentiel et de capter les limites de surchauffe pour un fonctionnement optimal.

Introduction

Vis-à-vis les restrictions des émissions plus en plus sévères, et la parcimonie des carburants conventionnels, le moteur dual fuel se présente comme solution prometteuse satisfaisante pour le volet environnemental et économique. En revanche, ce type de moteur peut être confronté à certaines limitations, notamment le cliquetis et la surchauffe des injecteurs, influant négativement le fonctionnement global.

1 Traitement du cliquetis dans les moteurs dual fuel

Dans cette section, un modèle de prédiction de l'auto-inflammation indésirable, illustrée par le phénomène de cliquetis, est développé. Après une validation approfondie de ce modèle, il est utilisé pour appliquer une technique de suppression du cliquetis en injectant une quantité d'eau en fonction de l'instant prédit de l'auto-inflammation indésirable.

1.1 Contexte général du modèle

La modélisation du cliquetis dans les moteurs dual fuel repose principalement sur la détection de la première auto-inflammation indésirable manifestant dans le mélange air-gaz. Pour répondre à ce besoin, il est obligatoire d'évaluer le temps d'inflammation du mélange imbrûlé dans le cylindre. Dans ce contexte, plusieurs modèles d'auto-inflammation ont été développés, allant de simples expressions empiriques à des formulations complexes avec une cinétique chimique réduite ou complète.

Le travail de Noda et al. [150] est un type de modélisation qui repose sur une cinétique chimique réduite. Les auteurs ont utilisé une technique basée sur la discrétisation de la chambre de combustion en deux zones pour obtenir une meilleure précision de prédiction. Un schéma cinétique général détaillé tenant compte du mécanisme d'oxydation à basse température a été proposé par D'Errico et al. [151]. Ils ont supposé que ce phénomène physique est entièrement contrôlé par la cinétique chimique en couplant un modèle thermo-fluide pour la simulation du moteur avec un schéma cinétique détaillé. Ce type de modélisation n'est pas adapté aux simulations rapides et aux calculs en temps réel en raison de la complexité requise par la dépendance du modèle aux détails des sous-réactions des espèces utilisées et au type de carburant, ce qui limite la prédiction de ces modèles.
Les travaux de Rossomando et al. [152] s'appuient sur des modèles empiriques basés sur l'équation d'Arrhenius [153] en exprimant le délai d'auto-inflammation en fonction des conditions thermodynamiques (pression et température) du mélange imbrûlé pour prédire l'apparition du cliquetis dans les simulations avec une grande précision.

Comme le moteur dual fuel a été considéré comme une tendance au cours de la dernière décennie en raison de restrictions de plus en plus sévères, plusieurs chercheurs ont orienté leurs travaux spécifiquement vers ce mode de combustion. Le Tableau 3.1 présente une vue globale

sur les différents types de modélisation traitant le cliquetis dans les moteurs fonctionnant en mode dual fuel.

TABLE 3.1 – Récapitulatif sur les différents types de modélisation du cliquetis en mode de combustion dual fuel.

Auteurs	**Type de modélisation**	**Méthodologie et Outils**
AL-Sened et al. [90], Li et al. [91]	Modèle 0D phénoménologique avec cinétique chimique	Utilisation d'un mécanisme en 9 étapes avec 11 espèces pour le développement d'un modèle à deux zones.
Jelto et al. [92], Jelto et Peter [80]	Modèle quasi-D phénoménologique	Combinaison d'un modèle de jet 1D avec un modèle d'évaporation pour suivre l'évolution des gouttelettes de carburant dans chaque cellule de jet avant le déclenchement de la combustion qui contrôle le front de flamme.
Xiang et al. [93]	Modèle 0D phénoménologique	Développement d'une approche 0D à deux zones pour la modélisation de la combustion en utilisant une fonction de Wiebe pour déterminer le taux de combustion, utile pour déterminer la température des gaz dans la zone imbrûlée, primordiale pour la prédiction du cliquetis.
Bettis [154]	Modèle empirique	Étude de différentes formes des facteurs de l'expression d'Arrhenius pour analyser et contrôler le début de la combustion et les positions des pics de pression, utiles pour la prédiction du cliquetis.
Hann et al. [155]	Modèle empirique	Modification de l'équation d'Arrhenius pour prendre en compte les différentes conditions de fonctionnement avec plusieurs compositions de gaz dans le cylindre.

Face au moteur à allumage commandé, le moteur dual fuel reste moins exploré en termes de modélisation et de prédiction du cliquetis. Cela est principalement dû à son principe de fonctionnement, compliquant la physique de la combustion. D'après la littérature existante (Tableau 3.1), les chercheurs ont tendance à traiter le moteur dual fuel en utilisant les mêmes approches que pour le moteur à allumage commandé, d'où la nécessité de développer un modèle prédicatif de cliquetis dédié au moteur dual fuel qui peut être utilisé dans l'amélioration du fonctionnement du moteur, notamment avec l'élimination de ce phénomène en appliquant l'une des stratégies de suppression.

1.2 Méthodologie

L'objectif principal de ce travail est de construire un modèle pour prédire l'instant du cliquetis dans un moteur dual fuel, fonctionnant avec le gazole comme carburant pilote et un mélange de gaz naturel (GN) et d'hydrogène (H_2) comme carburant primaire. Pour cette raison, une discrétisation de la chambre de combustion en deux zones est utilisée pour rapprocher ce mode de combustion du cas physique et pour traiter la zone des gaz imbrûlés avec soin puisqu'elle illustre les conditions d'apparition du cliquetis. Une technique d'analyse des variables est utilisée pour sélectionner les facteurs de l'équation d'Arrhenius en fonction de leur signification et des conditions de fonctionnement illustrées dans ce cas par la charge et la composition du gaz primaire régnant dans la chambre de combustion. Cette sélection est cruciale dans ce travail ; elle permet d'augmenter la prédiction du modèle et de diminuer le nombre de facteurs à calibrer, ce qui réduit la dépendance du modèle aux données expérimentales et le classe comme un outil solide et fiable pour la recherche et l'optimisation des moteurs fonctionnant en mode dual fuel.

Après la validation du modèle avec des résultats expérimentaux, il sera couplé avec un logiciel de calcul CFD (Converge^{TM} [156]) pour prévenir ce phénomène de cliquetis lors d'un fonctionnement dans des conditions qui favorisent l'auto-inflammation indésirable en fonction de la charge et de la quantité d'hydrogène qui contribue à la composition du gaz primaire. Juste après l'introduction des conditions de fonctionnement, l'instant de l'apparition du cliquetis sera prédit, et la commande sera donnée pour injecter une quantité infinitésimale d'eau avant cet instant, où la quantité et le moment d'injection par rapport à l'instant prédit pour le cliquetis seront investigués.
Cette approche valorise le modèle de cliquetis en termes de fiabilité et de précision pour pousser le fonctionnement du moteur jusqu'aux limites de l'auto-inflammation indésirable, là où le rendement est maximal, sans aucun risque.
Deux parties principales sont étudiées dans cette section. La première est liée à l'élaboration d'un modèle de cliquetis, tandis que la seconde concerne une stratégie visant la suppression de ce phénomène indésirable.

Les résultats expérimentaux utilisés dans ce travail pour la modélisation proviennent des essais effectués sur le bans d'essai Lister-Petter (TS1) décrit dans le Chapitre 2, avec la même procédure expérimentale pour le mode dual fuel.

1.2.1 Modélisation du cliquetis

L'approche utilisée dans ce travail est basée sur le calcul du délai d'auto-inflammation. Cette modélisation est principalement basée sur la pression et la température des gaz frais (non brûlés) dans la chambre de combustion. Cette liaison directe entre ces deux grandeurs et le phénomène de cliquetis est modélisée par une loi d'Arrhenius pour laquelle le délai d'auto-inflammation (τ)

s'exprime comme suit (équation 3.1).

$$\tau = \alpha_1 \left(\frac{IO}{100}\right)^{\alpha_2} P^{\alpha_3} \exp\left(\frac{\alpha_4}{T_u}\right) \tag{3.1}$$

Avec IO l'indice d'octane, P la pression dans le cylindre, T_u la température dans la zone des gaz frais, et α_i des constantes du modèle.
Un mélange de gaz naturel et d'hydrogène est utilisé comme carburant principal. Pour cette raison l'équation 3.1 est adaptée en raison de l'indice d'octane, qui sera difficilement déterminé pour chaque nouvelle composition de gaz. L'équation 3.2 est donc utilisée pour exprimer le modèle utilisé dans ce travail.

$$\tau = X_1 P^{X_2} \exp\left(\frac{X_3}{T_u}\right) \tag{3.2}$$

Avec X_i représentent les constantes du modèle.
Pour déterminer l'instant (angle du vilebrequin en degré) pour lequel le cliquetis se produit, il convient de rechercher les conditions pour lesquelles l'intégrale exprimée par l'équation 3.3 est égale à l'unité [157].

$$K = \int_{\theta_{com}}^{\theta_{clq}} X_1 P^{X_2} \exp\left(\frac{X_3}{T_u}\right) d\theta \tag{3.3}$$

En d'autres termes, il est nécessaire de déterminer les conditions pour lesquelles la valeur de la fonction définie par l'équation 3.4 est minimale (conventionnellement égale à zéro).

$$f = K - 1 \tag{3.4}$$

La détermination des coefficients du modèle est initialement basée sur des résultats expérimentaux, en utilisant l'algorithme PSO (Particle Swarm Optimization) [158] pour traiter le problème d'optimisation défini par l'équation 3.5.

$$\begin{cases} \text{Fonction objective : Minimisation } f = K - 1 \\ \text{Variables de décision :} X_1, X_2, X_3 \end{cases} \tag{3.5}$$

Étant donné qu'il n'y a pas de recommandation pour les valeurs des trois variables de décision, l'exploration initiale devient un point crucial pour garantir la précision du modèle par la suite. Une technique ingénieuse est utilisée dans ce travail, en commençant par des intervalles réduits pour les trois variables avec un nombre initial de population relativement faible. À chaque fin de calcul, une vérification des valeurs des variables est effectuée pour libérer l'intervalle de chaque variable dans le sens de sa précipitation qui montre une tendance d'exploration dans cette direction. Cette approche peut assurer un excellent compromis entre l'exploration de l'optimiseur et la réduction du coût de calcul.
Pour la détermination de la température des gaz imbrûlés, une approche basée sur un modèle thermodynamique à deux zones est utilisée. Une distinction est faite entre la zone des gaz brûlés et celle des gaz imbrûlés. Les propriétés thermodynamiques des gaz dans la chambre de combustion sont calculées sur la base d'un équilibre chimique. Ce calcul est principalement basé

sur des tables thermodynamiques définissant les différentes propriétés des gaz en fonction de la température.

Le mélange n'étant pas trop riche, les produits de combustion peuvent être évalués sur la base de l'équilibre chimique selon la méthode d'Olikara et Borman [159, 160]. Les paramètres thermodynamiques du mélange sont calculés à chaque pas de temps en fonction des fractions molaires et des paramètres thermodynamiques propres à chaque espèce. Ceci permet d'évaluer les paramètres tels que la température et la pression à partir de l'équation énergétique définie par les équations 3.6 et 3.7.

$$\frac{d(m_u U_u)}{d\theta} = -P\frac{dV_u}{d\theta} + \sum_i \frac{dQ_{u_i}}{d\theta} - H_u\frac{dm_u}{d\theta} \tag{3.6}$$

$$\frac{d(m_b U_b)}{d\theta} = -P\frac{dV_b}{d\theta} + \sum_i \frac{dQ_{b_i}}{d\theta} + H_u\frac{dm_u}{d\theta} \tag{3.7}$$

Où $\sum_i$ c'est la somme des transferts de chaleur à travers les parois du cylindre.

Afin de déterminer l'influence des paramètres du modèle sur le résultat final, qui est défini par l'instant de l'apparition du cliquetis, une analyse des variables (ANOVA) est effectuée. Cette approche est basée principalement sur la séparation de la variance attribuable à un groupe de causes par rapport à d'autres groupes [161], en comparant la moyenne entre les groupes.
Cette étude détermine la sensibilité du phénomène de cliquetis aux paramètres du modèle afin de construire un modèle avec le minimum de paramètres à calibrer. Cette étude vise également à classer le degré de dépendance des paramètres par rapport au phénomène de cliquetis.
La Figure 3.1 présente les principales étapes de l'approche développée. Après la phase initiale d'apprentissage du modèle, qui consiste à calibrer le modèle à l'aide de données expérimentales, les variables sont analysées pour vérifier les points susmentionnés. Ensuite, le modèle est ré-entraîné en incorporant les résultats obtenus au cours des étapes précédentes.

Pour respecter un modèle polynomial, des ajustements doivent être apportés aux variables les moins significatives. Les paramètres corrigés sont ensuite pris en compte lors du deuxième entraînement du modèle de cliquetis. Lorsque la deuxième étape converge, l'approche produit une surface de réponse pour les variations les plus significatives. Au final, le modèle doit posséder un aspect prédictif de haut niveau, ce qui est obtenu grâce à plusieurs surfaces de réponse qui modélisent les différentes variables définissant le modèle de cliquetis.

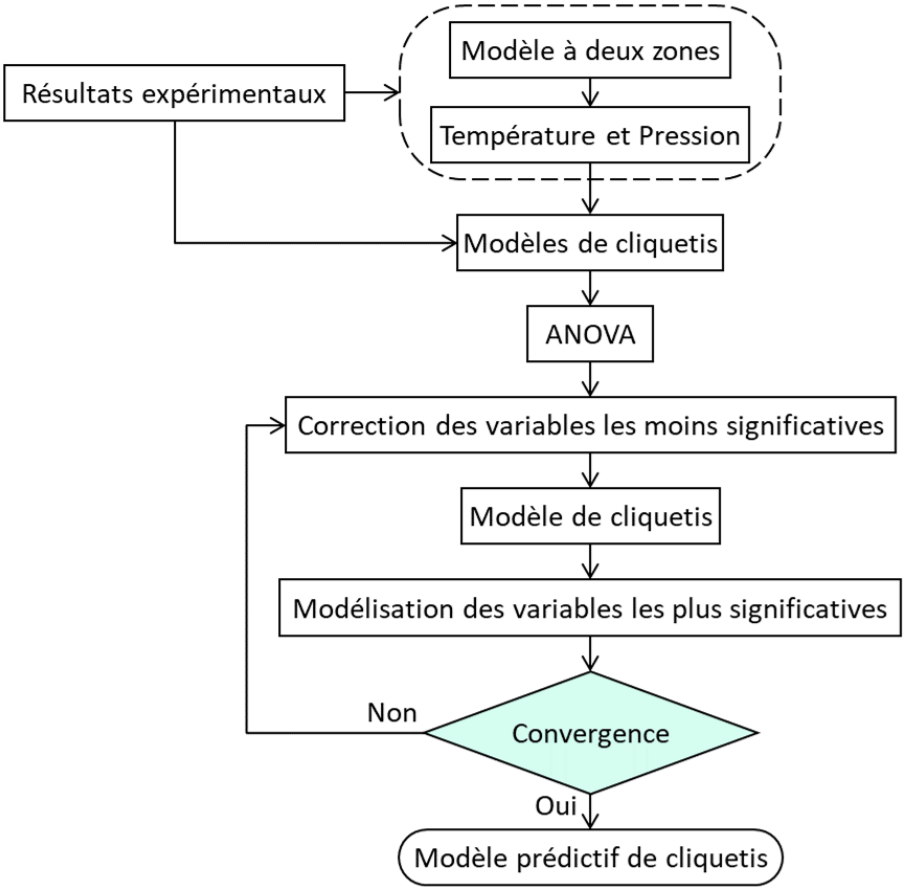


FIGURE 3.1 – Organigramme de l'approche de modélisation du cliquetis.

1.2.2 Suppression de cliquetis

Cette partie est basée sur un couplage entre le modèle développé et un outil de simulation CFD 3D (Converge^{TM}). L'idée principale est de prendre un cas cliquetant, pour lequel le modèle développé prédit l'apparition du cliquetis. Pour supprimer ce problème, une quantité d'eau (q) est injectée en fonction de son apparition. Ensuite, la progression de la combustion en aval de cet effet est analysée.

L'objectif final est d'éviter le cliquetis tout en conservant les mêmes conditions de fonctionnement, à savoir la charge et le pourcentage d'hydrogène dans la composition du carburant primaire. Pour atteindre cet objectif, la quantité d'eau et le temps d'injection (T_{inj}) sont optimisés.

Lors des simulations numériques, la géométrie entière du cylindre est prise comme domaine de calcul, vu que l'aspect axisymétrique n'est pas vérifié comme l'indique la Figure 3.2. Ce domaine de calcul comprend les quatre buses d'injection du gazole.

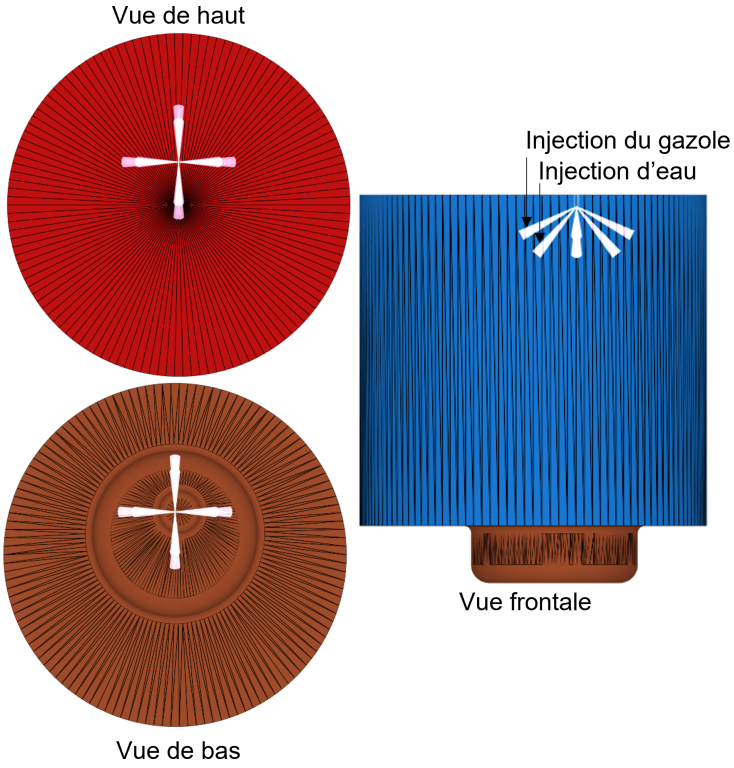


FIGURE 3.2 – Configuration simulée en 3D.

Lors de la modélisation, le gazole à l'état liquide est modélisé en utilisant les propriétés du n-heptane (C_7H_{16}) de la bibliothèque Converge^{TM}. Le gaz naturel est modélisé comme un mélange de 85% de méthane, 10% d'éthane et 5% de propane. Les conditions de fonctionnement (l'énergie fournie par le carburant pilote et le carburant primaire est de 10% et 90%, respectivement) et les dimensions géométriques telles que l'alésage et la course, ainsi que le diamètre de la buse d'injection sont celles du moteur Lister-Petter (cf. Chapite 2).
L'eau est injectée au moment T_{inj}, via quatre buses, de manière similaire au gazole, avec une pression d'injection de 250 bar et une température de 300 K (Figure 3.3).

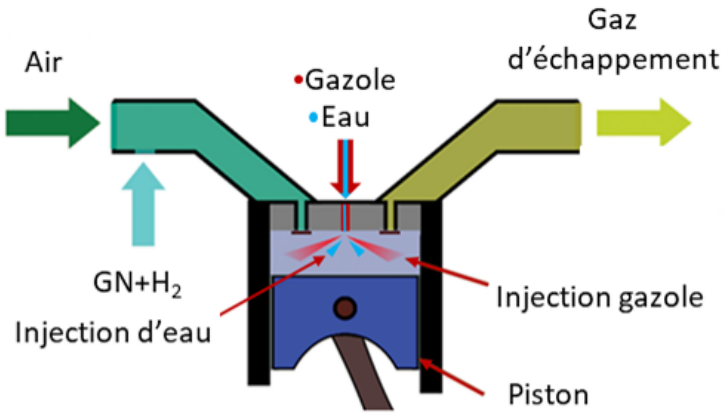


FIGURE 3.3 – Processus d'injection d'eau.

1.3 Résultats et discussions

Dans cette partie les principaux résultats sont présentés pour la modélisation du cliquetis dans un premier temps, puis pour la suppression de cliquetis par l'injection directe de l'eau dans la chambre de combustion en fonction de l'instant d'apparition du cliquetis par le modèle développé.

1.3.1 Modélisation du cliquetis

Comme expliqué précédemment, cette approche est principalement basée sur des résultats expérimentaux afin d'assurer l'apprentissage du modèle qui sera considéré comme un outil prédictif par la suite. Les résultats présentés dans le Tableau 3.2 montrent les différents instants de cliquetis détermines expérimentalement sur la base du signal de pression de chaque cas de fonctionnement, comme l'explique la Figure 3.4. Elle montre les résultats expérimentaux pour un cas de fonctionnement à 90% de charge avec un gaz primaire composé de H_2 (40% en volume) et de GN (60% en volume).
Pour chaque cas de fonctionnement, l'indice de cliquetis est déterminé à l'aide de l'équation 3.8 basée sur l'approche MAPO (Maximum Amplitude of Pressure Oscillations).

$$MAPO = \max_{\theta_i, \theta_i + W} |\tilde{P}| \tag{3.8}$$

Où θ_i est l'angle vilebrequin correspondant au début de la fenêtre de calcul, W la largeur de la fenêtre de calcul, et $\tilde{P}$ la pression filtrée.
Dans cette section, la combustion est considérée cliquetante si cet indice ($MAPO$) dépasse une limite maximale de 4,5 bar, similaire à celle rapportée par Lounici et al. [162]. L'instant de cliquetis est fixé au point où cette limite est dépassée.

Table 3.2 – Résultats expérimentaux du cliquetis.

Charge	80%		90%			
Pourcentage de H_2 [%]	45	50	35	40	45	50
Instant de cliquetis [°V]	364,2	360,2	359,6	356,0	354,2	353,6

Les résultats présentés dans le Tableau 3.2 confirment la relation directe entre l'instant de cliquetis, la charge du moteur et le pourcentage d'hydrogène existant dans la composition du gaz primaire dans la chambre de combustion.

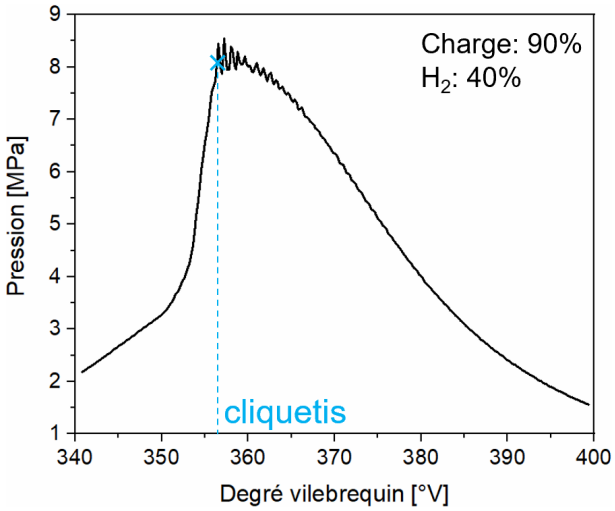


FIGURE 3.4 – Détection du cliquetis sur le signal de pression expérimental.

Le Tableau 3.3 résume les résultats basés sur l'analyse des trois variables X_i du modèle selon l'approche de Bonferroni [163].

TABLE 3.3 – Résultats de l'analyse des variables.

	X_1	X_2	X_1	X_3	X_2	X_3
Moyenne	0,05331	1,16145	0,05331	1921,2	1,16145	1921,2
Variance	0,00038	0,17536	0,00038	76455,16	0,17536	76455,16
Observations	6	6	6	6	6	6
Degré de liberté	5	5	5	5	5	5
F	0,0022		5,05941E-09		2,2937E-06	
P_r unilatéral ($F<=f$)	1,23168E-06		0		4,3299E-14	
Valeur critique pour F (unilatéral)	0,1980069		0,1980069		0,1980069	

Sachant que le facteur f dans cette analyse est fixé à 5%, représentant un degré maximum de dépendance autorisé entre deux paramètres du modèle. La constante P_r dans le Tableau 3.3 représente la probabilité de dépendance des paramètres deux à deux. Les valeurs de P_r montrent clairement le choix correct des trois paramètres du modèle de cliquetis avec un degré de dépendance qui tend vers zéro pour les différentes combinaisons de paramètres.
La comparaison entre les trois valeurs de P_r montre que le paramètre X_3 a l'effet le plus significatif sur le résultat final (l'instant de cliquetis). Le X_1 vient en second, puis le X_2 en dernier. Cet ordre d'importance et d'impact sur le résultat final sera utile ultérieurement pour déterminer les paramètres du modèle afin d'augmenter son degré de prédictivité. Dans un premier temps, l'objectif est de modéliser les deux paramètres les moins significatifs (X_1 et X_2) tout en maintenant constant le paramètre le plus significatif (X_3). Cela permet d'éviter de trop contraindre le modèle global, puisque le résultat final est plus fortement influencé par le paramètre le plus significatif.
Sur la base des résultats de la Figure 3.5, un type de modélisation linéaire peut être approprié

pour modéliser le paramètre X_1 et un autre parabolique pour le paramètre X_2, conformément aux équations 3.9 et 3.10, respectivement. Les surfaces de réponse décrivant les équations 3.9 et 3.10 sont illustrées par la Figure 3.5.

$$X_1 = -0{,}3339 + 0{,}003789.[\text{charge}(\%)] + 0{,}001333.[\text{H}_2(\%)] \tag{3.9}$$

$$X_2 = 0{,}1272 - 0{,}1352.[\text{charge}(\%)]^{0{,}6388} + 0{,}4237.[\text{H}_2(\%)]^{0{,}5481} \tag{3.10}$$

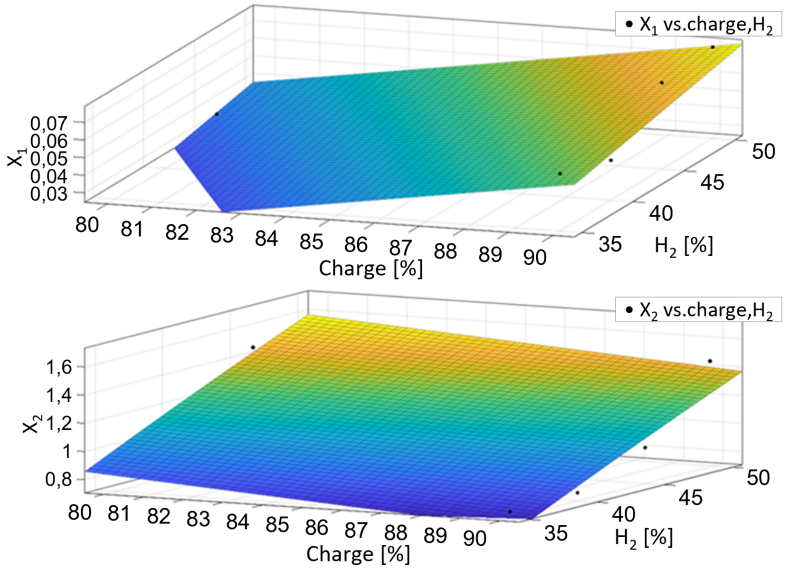


FIGURE 3.5 – Surfaces de réponse pour les paramètres X_1 et X_2.

Après avoir fixé les paramètres X_1 et X_2, leurs valeurs initiales sont corrigées en les collant sur leurs surfaces de réponse, comme le montre la Figure 3.6 , qui représente les variations de X_1 et X_2 en fonction des iso-charges. Ensuite la re-modélisation doit être faite avec les nouveaux paramètres X_1 et X_2 calculés en fonction de la charge et du pourcentage d'hydrogène dans le gaz à l'intérieur de la chambre de combustion selon les modèles décrits par les équations 3.9 et 3.10 afin d'identifier les valeurs de X_3 qui assurent à nouveau la fiabilité et la précision du modèle.

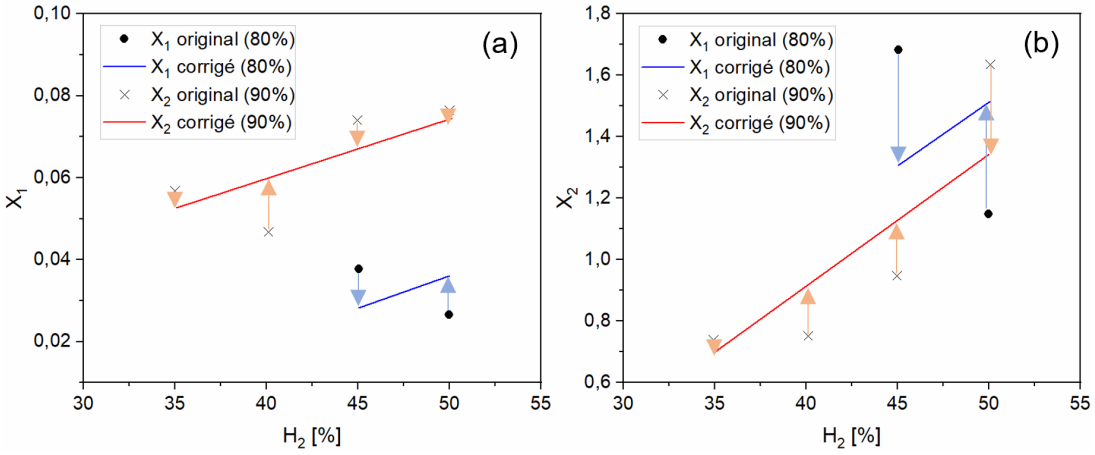


FIGURE 3.6 – Approche de correction des paramètres : (a) X_1 et (b) X_2.

Après cette correction, la modélisation de X_3 est essentielle pour améliorer encore la prédictivité du modèle. Le choix du modèle est une étape cruciale pour rester dans un cadre de précision acceptable, en gardant une bonne pondération entre la prédictivité et la précision du modèle. La Figure 3.7 représente la variation de X_3 pour les iso-charges (80, 90%) concernées par le phénomène du cliquetis selon la présente étude. Les résultats affirment la grande sensibilité de ce paramètre à la charge et au pourcentage d'hydrogène présent dans le gaz primaire. Ceci donne une description logique du modèle contrôlant le X_3, qui dépend fortement de ces deux variables (charge et pourcentage d'H_2).

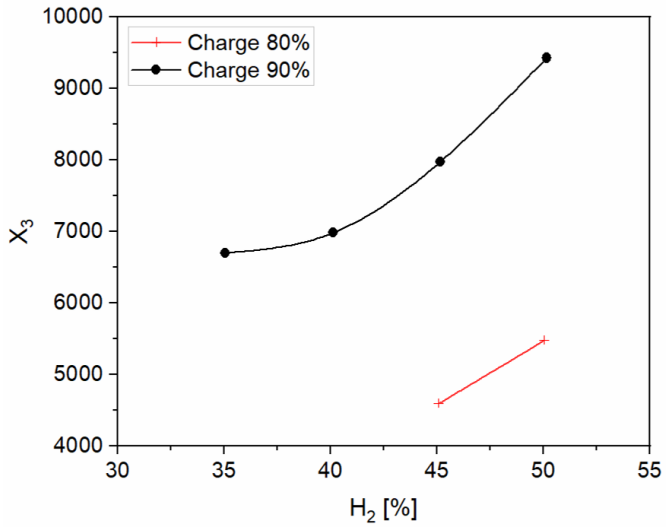


FIGURE 3.7 – Variations de X_3 en fonction du pourcentage de H_2 et de la charge.

Le modèle final proposé pour suivre les variations du paramètre X_3 est définis par l'équation 3.11, qui est une fonction de la charge et du pourcentage de H_2. L'objectif final est d'augmenter la précision de ce modèle en prenant en considération la plage d'apprentissage qui est considérée

comme un paramètre important dans ce travail pour une modélisation fiable et solide.

$$X_3 = 0{,}06575 + 0{,}0003421.\left[\frac{\text{charge}(\%)}{max(\text{charge}) - min(\text{charge})}\right]^{7{,}598} + 10{,}84.\left[\frac{\text{H}_2(\%)}{max(\text{H}_2) - min(\text{H}_2)}\right]^{4{,}719} \tag{3.11}$$

La Figure 3.8 illustre la surface de réponse pour la variation de X_3 décrite par l'équation 3.11, assurant une excellente continuité des résultats pour les différentes combinaisons de charge et de pourcentage de H_2, avec une erreur relative moyenne de 1,86%, ce qui affirme fortement la grande précision du modèle contrôlant la variation du paramètre X_3.

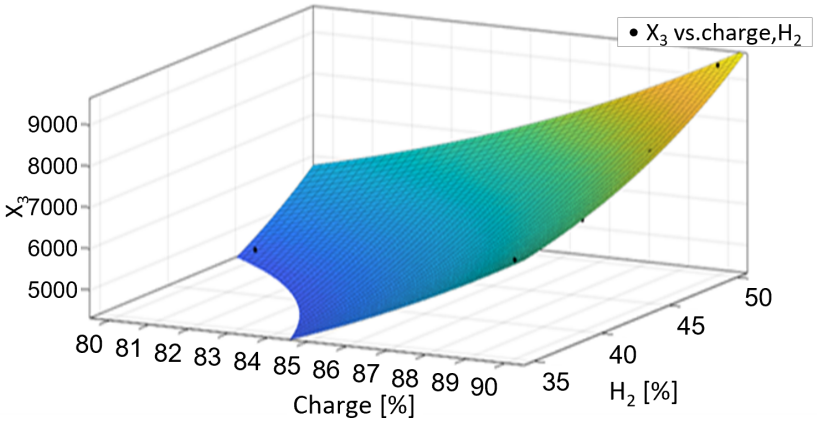


FIGURE 3.8 – Surface de réponse du paramètre X_3.

La Figure 3.9 montre les variations du rendement thermique du moteur en fonction de la charge pour différents pourcentages d'hydrogène dans le gaz primaire. La limite de la zone de cliquetis est également présentée selon le modèle développé, qui coïncide avec les résultats expérimentaux pour lesquels l'augmentation de la charge et du pourcentage d'hydrogène provoque le cliquetis car les conditions résultantes dans la chambre de combustion favorisent l'auto-inflammation du mélange gazeux. Les résultats du modèle indiquent que plus la quantité d'hydrogène présente dans la chambre de combustion est importante, plus la probabilité du cliquetis augmente, car le mélange gazeux devient moins résistant à l'auto-inflammation.

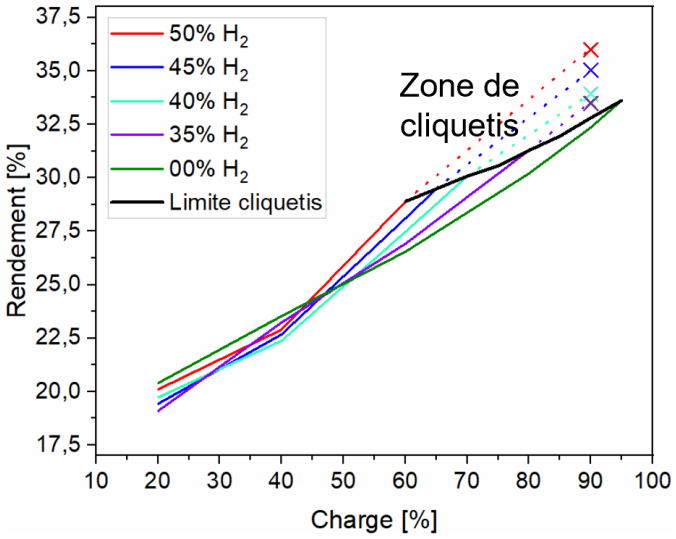


FIGURE 3.9 – Limites de cliquetis selon les conditions de fonctionnement.

La Figure 3.10 montre les variations expérimentales de la pression dans la chambre de combustion pour différentes conditions de fonctionnement (en fonction de la charge et du pourcentage d'hydrogène). Les résultats du modèle développé dans cette section pour la prédiction du cliquetis sont également présentés dans la même Figure.
L'erreur relative moyenne pour tous les cas présentés pour l'apparition du cliquetis est de 1,88% (entre les résultats expérimentaux et les résultats donnés par le modèle). La fiabilité et la précision du modèle sont testées dans cette phase, confirmant une bonne prédiction du modèle basée sur des techniques de modélisation avancées.

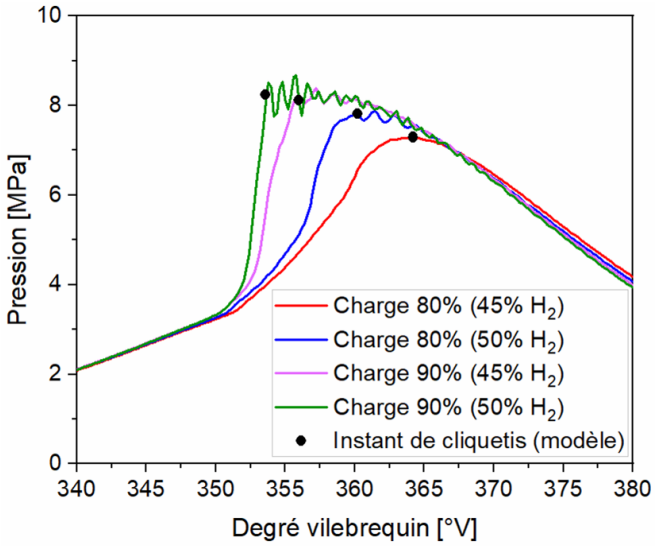


FIGURE 3.10 – Modélisation du cliquetis selon les conditions de fonctionnement.

1.3.2 Suppression de cliquetis

La prédiction et la précision du modèle développé lui permettent d'être utilisé comme outil pour modéliser le fonctionnement des moteurs dual fuel utilisant des carburants alternatifs, avec une combustion propre. L'objectif final est de tester ce type de combustion dans les limites de fonctionnement imposées par le problème du cliquetis afin d'optimiser son fonctionnement et d'atteindre plusieurs objectifs, à savoir la minimisation des NO_x avec un fonctionnement sûr (sans cliquetis), ce qui est considéré comme un défi important lorsque l'hydrogène est utilisé comme carburant primaire.

A • Validation du modèle CFD

Afin de vérifier la précision du modèle CFD, la pression dans le cylindre et les émissions du moteur Lister-Petter sont étudiées numériquement et expérimentalement à un régime moteur de 1500 tr/min pour une charge moteur élevée (80% de la pleine charge). Les Figures 3.11-a et 3.11-b présentent une comparaison entre la pression calculée et mesurée dans le cylindre et les émissions (NO_x) du moteur, respectivement. Ces résultats indiquent que les erreurs quadratiques moyennes pour le signal de pression et les NO_x sont respectivement de 4,47% et 3,69%. Cela montre que les résultats du modèle CFD sont en bon accord avec les valeurs expérimentales.

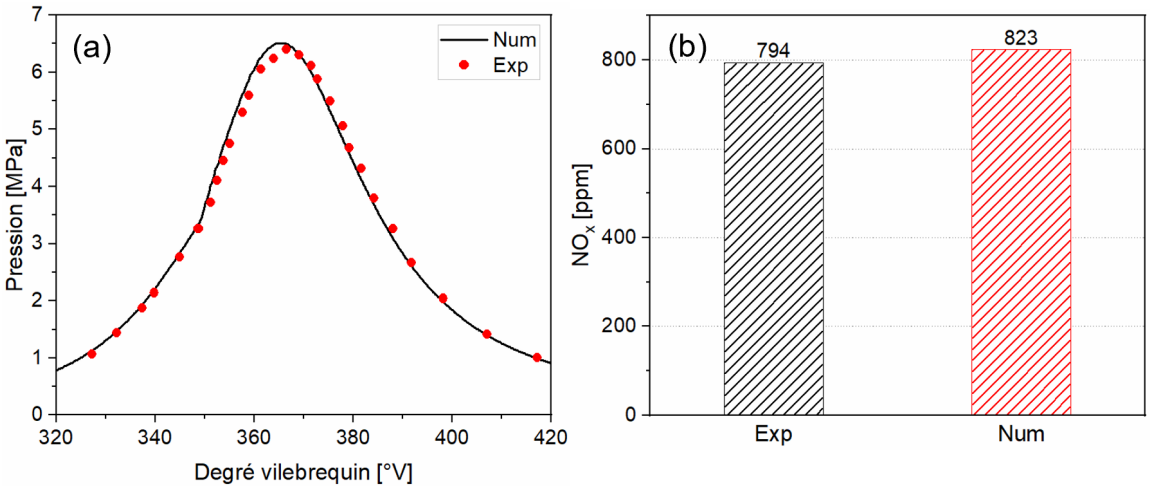


FIGURE 3.11 – Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées : (a) pression dans le cylindre, (b) NO_x.

B • Injection d'eau pour la suppression du cliquetis

Le cas d'analyse dans cette partie est choisi dans la zone de cliquetis illustrée dans la Figure 3.9. Ce cas de fonctionnement est choisi pour un pourcentage d'hydrogène de 50%, avec 85% de la pleine charge. Selon l'approche développée précédemment, ces conditions de fonctionnement favorisent le cliquetis.
Ce cas de fonctionnement sera utilisé dans un premier temps pour valider le modèle du cliquetis développé, puis dans un second temps pour analyser les résultats de la stratégie d'injection d'eau visant la suppression du cliquetis. La partie suivante se concentre sur l'impact d'injection d'eau

sur la prévention du cliquetis. Différentes quantités d'eau à différents instants d'injection sont examinées.
L'effet d'injection d'eau sur le phénomène de cliquetis est attendu car l'eau absorbe une quantité de chaleur dans la chambre de combustion, ce qui entraîne une diminution de la température permettant d'éviter le cliquetis. Lorsque le temps passé par la flamme après l'auto-inflammation du carburant pilote injecté est supérieur au temps d'auto-inflammation du mélange dans la chambre de combustion, le cliquetis se produit. Pour cette raison, il est nécessaire d'assurer une bonne pondération entre la quantité d'eau et le moment de son injection pour abaisser la température dans les zones où le cliquetis est possible sans affecter les performances du moteur.

Tout d'abord, une étude est menée pour tester l'influence de la quantité d'eau injectée sur la température globale avec un temps d'injection fixe. La Figure 3.12 montre les variations de la température dans le cylindre et le travail indiqué pour chaque quantité d'eau injectée (la quantité d'eau injectée est exprimée en pourcentage de masse par rapport à la quantité de gazole injectée). L'eau absorbe de la chaleur pour s'évaporer lorsqu'elle se mélange avec le gaz dans la chambre de combustion. Pour cette raison, plus la quantité d'eau augmente, plus la température dans le cylindre diminue, ce qui est confirmé par les résultats présentés par la Figure 3.12-a. Cependant, la présence d'eau limite la combustion, ce qui explique la diminution du travail indiqué dans la Figure 3.12-b. L'optimisation de la quantité d'eau est donc cruciale pour maintenir un rendement maximal.

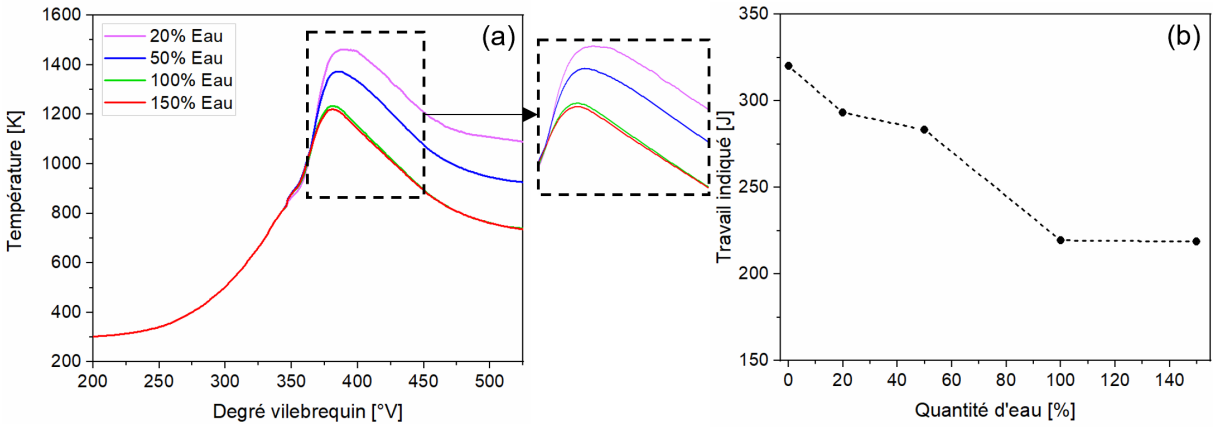


FIGURE 3.12 – Effet de la quantité d'eau injectée sur : (a) la température interne, (b) le travail indiqué.

En ce qui concerne l'effet du moment d'injection, la plus petite quantité d'eau a été considérée lors de la variation du moment d'injection afin d'éviter le cliquetis.
La Figure 3.13 montre les signaux de pression pour trois temps d'injection différents de la même quantité d'eau (20% de la masse du gazole injectée). Ces résultats confirment l'influence d'injection d'eau sur le phénomène de cliquetis. Une valeur critique pour le moment d'injection d'eau peut également être remarquée. Pour cette valeur, le cliquetis est pratiquement supprimé, comme l'indique la Figure 3.13-c. D'autre part, bien avant cette valeur critique, la stratégie d'injection d'eau est inefficace. Cela est expliqué par le fait que l'eau injectée s'évapore bien

avant l'apparition du cliquetis et que la température augmente à nouveau dans les zones des gaz imbrûlés. Par conséquent, le cliquetis se produit normalement (Figure 3.13-b).
En revanche, si le moment d'injection d'eau est trop proche de l'apparition du cliquetis, l'effet de l'eau est retardé. Pour cette raison la Figure 3.13-d montre une atténuation des oscillations de pression dans la phase finale du cliquetis, mais les premières fortes oscillations ne sont pas atténuées. Cela est expliqué par le temps d'évaporation de l'eau, puisque la température diminue en raison de la consommation d'énergie liée au processus d'évaporation.

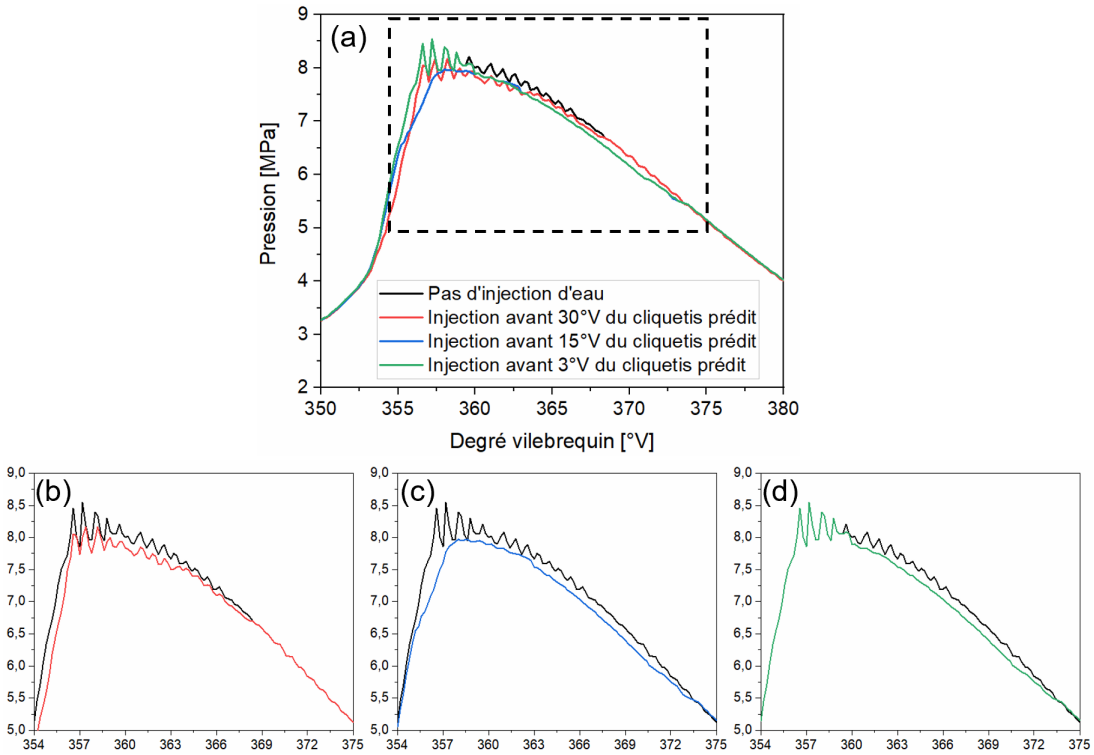


FIGURE 3.13 – Effet d'injection d'eau sur le cliquetis.

La Figure 3.14 illustre un filtrage du signal de pression pour montrer l'intensité du cliquetis. Elle confirme les résultats antérieurs selon lesquels la procédure de suppression du cliquetis est efficace pour un intervalle d'instant d'injection d'eau avant l'instant modélisé du cliquetis.

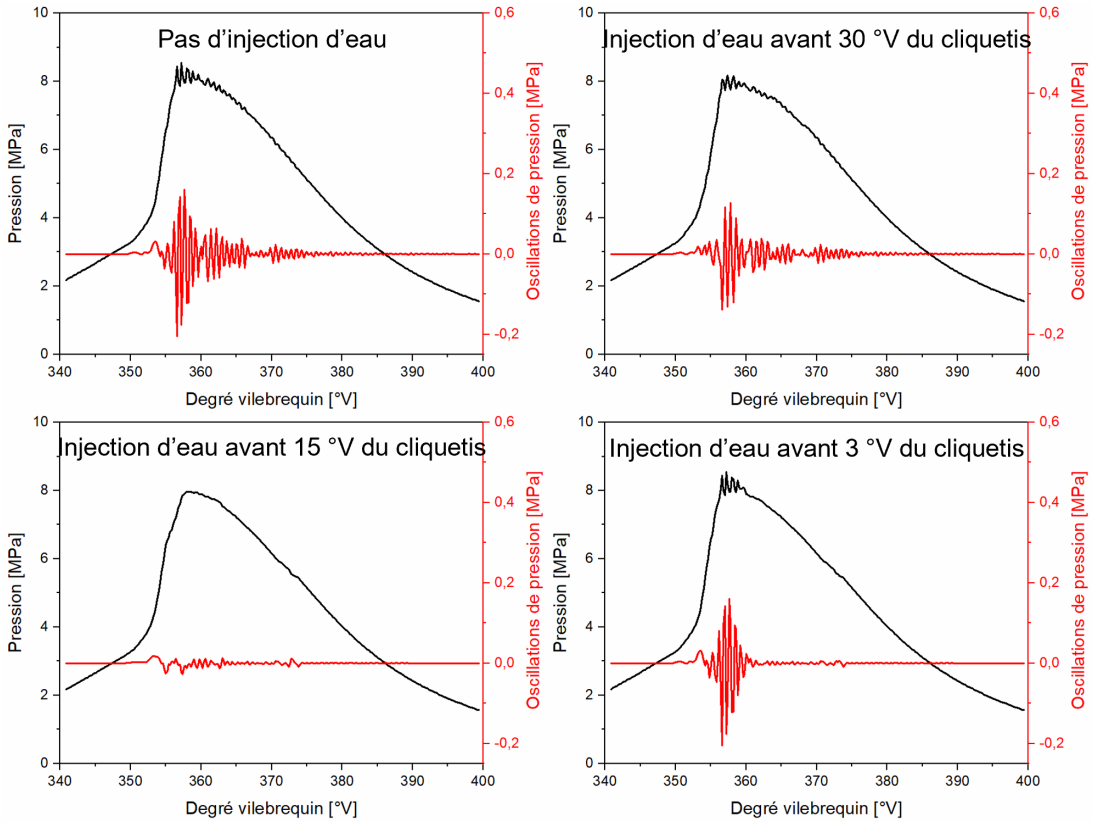


FIGURE 3.14 – Variation de l'intensité du cliquetis en fonction du moment d'injection d'eau.

Les résultats présentés dans la Figure 3.14 confirment que la suppression du cliquetis par l'injection directe d'eau est très efficace, à condition que le moment d'injection soit bien choisi. Cela souligne l'importance du modèle développé pour la prédiction du cliquetis.

2 Analyse thermique des injecteurs

Comme motionné dans des sections précédentes les moteurs à combustion interne jouent un rôle essentiel dans le transport et la propulsion mécanique, alimentant une multitude de véhicules et d'équipements. Les performances et la durabilité de ces moteurs dépendent en grande partie de la manière dont le carburant est injecté dans les chambres de combustion. L'injecteur de carburant, en tant que composant clé du système d'injection, est soumis à des conditions de fonctionnement extrêmement sévères, caractérisées par des températures élevées et des gradients thermiques rapides et importants. Ces conditions extrêmes s'aggravent en mode de combustion dual fuel, caractérisé par une quantité réduite du carburant liquide injectée, ce qui réduit le refroidissement des injecteurs. Dans ce contexte, la modélisation de la température dans les injecteurs de carburant avec la prise en compte du mode de combustion est cruciale pour comprendre et contrôler le transfert de chaleur dans ces composants ce qui aide à l'amélioration de la conception, le rendement et la fiabilité des moteurs.

2.1 Contexte général de l'étude

La gestion thermique de l'injecteur du carburant est un défi majeur pour les concepteurs de moteurs à combustion interne. Des températures excessives peuvent entraîner une dégradation prématurée de ces composants, une perturbation de la quantité du carburant injectée et une réduction des performances. Ces températures excessives sont particulièrement remarquables dans le cas de fonctionnement en mode dual fuel [164], où une quantité réduite de carburant liquide est injectée, contrairement au fonctionnement diesel conventionnel où toute l'énergie fournie provient du carburant liquide. Cette réduction de la quantité de carburant liquide injectée a un impact direct sur la température dans l'injecteur, car ce carburant contribue dans le refroidissement de l'injecteur, d'où la nécessité d'un modèle précis pour la température dans l'injecteur afin d'optimiser les performances globales du moteur selon le mode de fonctionnement.

Au fil des années, plusieurs études ont été menées pour la modélisation de la température dans l'injecteur de carburant et plus particulièrement à la pointe de l'injecteur, qui est la plus exposée à des températures excessives. Le Tableau 3.4 résume les principaux travaux existant dans ce contexte selon deux volets, expérimental et numérique.

TABLE 3.4 – Récapitulatif sur les différents types de modélisation de la température dans l'injecteur.

Auteurs	**Parties modélisée**	**Type de modélisation**	**Méthodes et Outils**
Risberg et al. [165], Sykes et al. [166]	Pointe de l'injecteur	Expérimentale	Thermocouple
Czarneski et al. [167]			Thermocouple type-K
Malbec et al. [168]			Thermographie infrarouge haute vitesse
Gander et al. [169]			Imagerie infrarouge
Payri et al. [170]	Pointe de l'injecteur	Numérique	Modèle 1D
Rahim et al. [171]	Injecteur complet		
Shi et al. [172]	Partie inférieure de la buse d'injecteur		
Anantharaman et al. [173]	Pointe de l'injecteur		Réseau de neurones artificiel

Les modèles basés sur des approches numériques sont caractérisés par une simplicité affectant leur précision vu que la prise en compte des conditions réelles de fonctionnement environnantes de l'injecteur est quasiment absente. Bien que les approches expérimentales puissent être plus représentatives des conditions réelles de fonctionnement, elles peuvent être coûteuses, difficiles à mettre en œuvre et ne fournissent pas toujours une résolution temporelle et spatiale suffisam-

ment fine, en fonction de la zone traitée dans l'injecteur. Malgré les progrès réalisés dans ce domaine, il existe encore des lacunes dans la modélisation précise et complète de la température dans l'injecteur de carburant. Cette recherche vise donc à combler ces lacunes en proposant une approche innovante basée sur une modélisation numérique avancée. Cette modélisation est utilisée pour assurer un suivi spatial de la température dans l'injecteur en mode diesel et en mode dual fuel afin de mettre en évidence les limites du risque de la surchauffe de l'injecteur surtout en mode dual fuel.

Cette section porte sur la modélisation du transfert de chaleur à travers les injecteurs. Une approche rigoureuse est mise en œuvre en subdivisant l'injecteur en plusieurs sous-zones afin d'affiner le traitement du transfert de chaleur en fonction des conditions contrôlant chaque sous-zone. Ces conditions ont été soigneusement définies et appliquées aux endroits appropriés, en tenant compte des variations de pression et de température dans la chambre de combustion au cours d'un cycle moteur. Ensuite, le code Ansys-FLUENT est utilisé pour résoudre les équations de conduction, ce qui permet d'obtenir des cartographies de température spatiales et temporelles illustrant en détail le processus de transfert de chaleur à travers les injecteurs.

2.2 Développement de l'approche

Les principes fondamentaux du transfert de chaleur ont été utilisées dans cette section pour traiter la problématique du transfert de chaleur à travers les injecteurs des moteurs à combustion interne en contrôlant les conditions aux limites. Pour estimer le coefficient de transfert de chaleur dans les moteurs à combustion interne, Finol et Robinson [174] ont travaillé sur l'évaluation empirique des corrélations utilisées dans la mise en évidence d'associations pour prédire le flux de chaleur moyen dans le temps et l'espace, ainsi que d'autre relations pour estimer les flux de chaleur instantanés à des endroits spécifiques.
Pour les corrélations de la première catégorie, il est possible d'utiliser les mesures des débits de liquide de refroidissement et des gradients de température dans différentes conditions de fonctionnement du moteur pour calculer les flux de chaleur globaux moyennés dans le temps, puis dériver le coefficient de transfert de chaleur. Le transfert thermique instantané repose sur l'hypothèse selon laquelle, à chaque instant, le taux de transfert thermique peut être considéré comme proportionnel à la différence de température entre le fluide et la surface métallique [175]. Le flux de chaleur convectif instantané $q(t)$ peut être écrit comme suit (équation 3.12).

$$q(t) = h(t)A\left[TAP(t) - T_p(t)\right] \tag{3.12}$$

Où $h(t)$ le coefficient de transfert de chaleur instantané (CTC), A la surface exposée, $T_p(t)$ la température instantanée à la paroi et $TAP(t)$ la température adiabatique de la paroi illustrée par la température de fluide près de la paroi.
Afin d'obtenir la distribution de la température, les valeurs moyennes de la température adiabatique de la paroi et du coefficient de transfert de chaleur sont utilisées comme conditions aux limites dans le modèle CFD pendant le calcul. La température moyenne adiabatique de la paroi

est estimée à partir de la valeur moyenne du flux de chaleur et du coefficient de transfert de chaleur [175] comme suit (équation 3.13).

$$\begin{cases} \overline{CTC} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} CTC(\theta).d\theta \\ \overline{TAP} = \frac{1}{4\pi\overline{CTC}} \int_0^{4\pi} TAP(\theta).CTC(\theta).d\theta \end{cases} \tag{3.13}$$

2.2.1 Subdivision de la géométrie de l'injecteur

Dans le cas étudié, la géométrie de l'injecteur adoptée a été inspirée des configurations conventionnelles, comme le montre la Figure 3.15, dont les caractéristiques géométriques sont résumées dans la Figure 3.16.

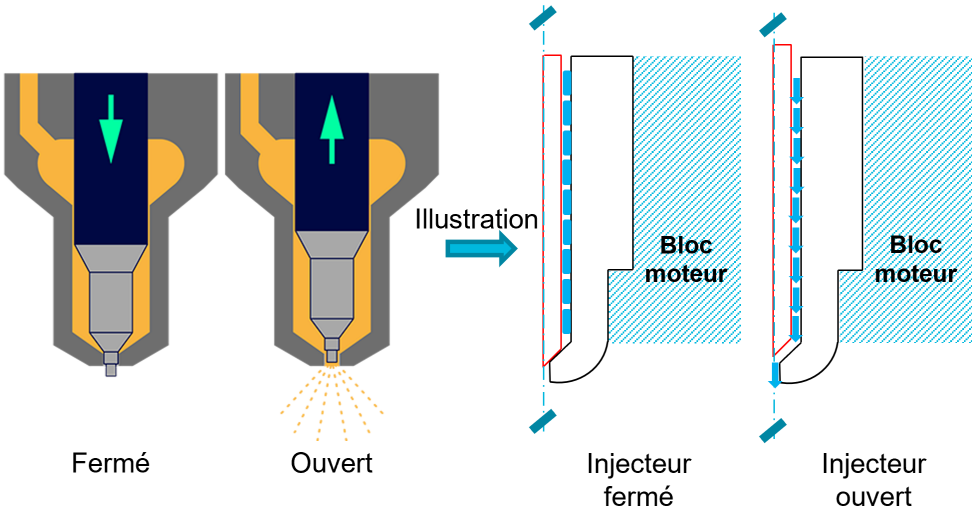


FIGURE 3.15 – Illustration des configurations des injecteurs.

Compte tenu de la configuration géométrique de l'injecteur et de la nature de l'écoulement dans sa canalisation lors de l'injection, le calcul est effectué dans un plan 2D axisymétrique.

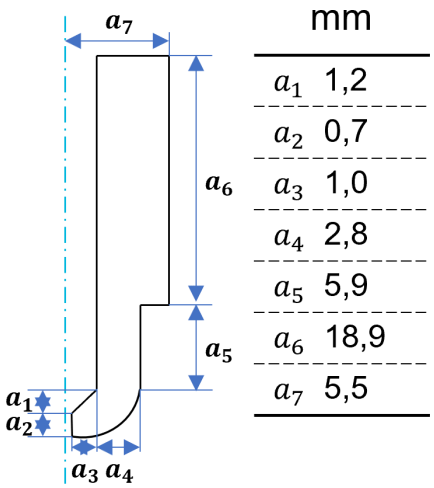


FIGURE 3.16 – Taille de l'injecteur étudié.

La prise en compte des différentes zones, comme le montre la Figure 3.17, est essentielle pour

cette étude du transfert de chaleur à travers l'injecteur. Une approche de subdivision appropriée, basée sur la géométrie du bloc moteur ainsi que sur la position de l'aiguille de l'injecteur qui contrôle le processus d'injection pendant le cycle du moteur, est nécessaire pour capturer de manière exhaustive les variations instantanées des propriétés du fluide. Grâce à cette approche innovante, il devient possible d'identifier et de quantifier avec précision les conditions aux limites inhérentes au système en termes de CTC et TAP. Par conséquent, le Tableau 3.5 présente une définition de la subdivision de la géométrie selon le fonctionnement de l'injecteur en termes de position de l'aiguille (Fermé : F ou Ouvert : O) qui contrôle le flux de carburant.

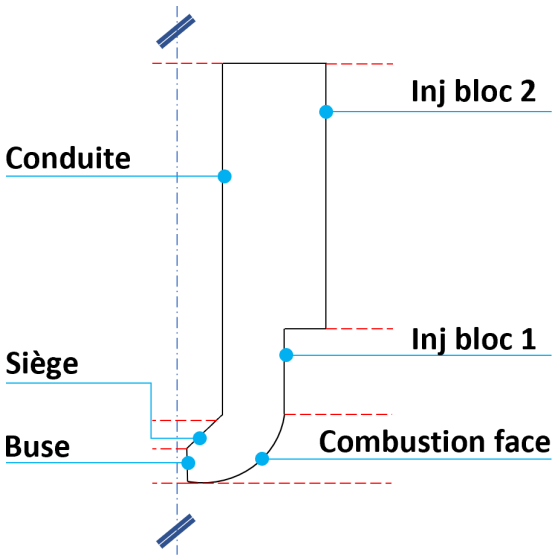


FIGURE 3.17 – Zones d'injecteur.

TABLE 3.5 – Définitions des zones d'injecteurs.

Zones		Injecteur	Définitions
1	Combustion face	F/O	Partie de la tête de l'injecteur qui est exposée en permanence à l'intérieur de la chambre de combustion.
2	Inj bloc 1	F/O	Première partie du contact entre l'injecteur et la culasse.
3	Inj bloc 2	F/O	Deuxième partie du contact entre l'injecteur et la culasse.
4	Buse	F	Partie exposée à la chambre de combustion, telle que "Combustion face".
		O	Partie assurant le passage du carburant jusqu'à la chambre de combustion.
5	Siège	F	Zone de contact entre l'injecteur et son aiguille.
		O	Section d'écoulement du carburant.
6	Conduite	F	Zone de contact entre l'injecteur et le carburant stationnaire dans la conduite.
		O	Section d'écoulement du carburant.

Selon cette subdivision, les conditions aux limites ($\overline{CTC}$, $\overline{TAP}$) dépendent fortement de la

position de l'aiguille de l'injecteur, qui est contrôlée principalement par le délai d'injection qui sera discuté par la suite. Dans ce travail, la partie transitoire entre les deux positions de l'aiguille de l'injecteur (fermé, ouvert) est négligée en raison de la rapidité du phénomène.
Le processus de calcul de cette approche est illustré par la Figure 3.18, où les conditions aux limites ($\overline{CTC}$, $\overline{TAP}$) sont appliquées à la géométrie dans un code CFD basé sur le calcul par volumes finis. Les conditions aux limites sont représentées par les moyennes, calculées par l'équation 3.13, pendant un cycle de combustion complet. Cette hypothèse est permise en raison de la fréquence élevée des cycles du moteur, qui élimine l'effet de la variation instantanée de ces conditions aux limites.

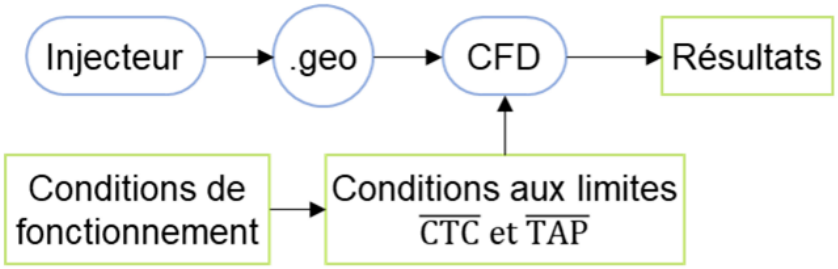


FIGURE 3.18 – Organigramme de la simulation globale.

2.2.2 Estimation des conditions aux limites

Cette partie se concentre sur la détermination du coefficient de transfert de chaleur (CTC) et de la température adiabatique de la paroi (TAP) en fonction de la position de l'aiguille et des zones de l'injecteur définies précédemment.

A • Combustion face :

Le transfert de chaleur entre les gaz et les surfaces internes du moteur est contrôlé par le phénomène de convection [76]. Plusieurs corrélations ont été utilisées pour prédire le flux de chaleur dans les moteurs à combustion interne. Il s'agit notamment de la corrélation de Woschni [109], qui est largement utilisée de manière universelle pour la détermination du coefficient de transfert de chaleur instantané dans les moteurs à combustion interne.
Dans cette étude, la tête de l'injecteur étant exposée en permanence à la chambre de combustion, le CTC est estimée à l'aide du modèle de Woschni via l'équation 3.14.

$$CTC = 127{,}9 D^{-0,2} P^{0,8} T_{gaz}^{-0,53} \left[C_1 V_p + C_2 \frac{V_s T_r}{P_r V_r} (p - p_m) \right]^{0,8} \tag{3.14}$$

Avec P et T la pression et la température, respectivement, D l'alésage du piston, V_p la vitesse moyenne du piston, T_r, P_r et V_r sont la température, la pression, et le volume, respectivement, à n'importe quel point de fonctionnement, p et p_m les pressions avec et sans combustion, respectivement, C_1 et C_2 des constantes du modèle.
Le suivi de l'évolution de la pression et de la température dans le cylindre est essentiel pour l'approche de Woschni et aussi pour l'approche globale présentée dans ce travail, qui nécessite

la température adiabatique de chaque paroi, illustrée par la température dans la chambre de combustion pour la zone "Combustion face".

B • Inj block 1 :

Le transfert de chaleur dans la zone d'encastrement entre l'injecteur et le bloc moteur (en aluminium) est considéré comme une conduction typique à travers un cylindre multicouche, comme le montre la Figure 3.19. Toutefois, le passage du modèle réel à un modèle idéal intègre l'effet du liquide de refroidissement (eau) et la résistance résultante du contact entre l'injecteur et le bloc moteur, à cause de l'assemblage forcé illustré par le serrage. La résistance globale est exprimée par l'équation 3.15.

$$R_{eq} = R_{q.inj\ bloc} + \frac{L_{Al}}{k_{Al}A_{Al}} + \frac{1}{h_{H_2O}A_{H_2O}} \tag{3.15}$$

Avec L_{Al} l'épaisseur réelle du compartiment d'aluminium dans la direction perpendiculaire au contact entre l'injecteur et le bloc moteur, A_{Al} la surface latérale d'un cylindre de rayon moyen R_{Al} et de hauteur h_{Al} égale à la longueur moyenne réelle de l'élément parallèle à la zone de contact (équation 3.16).

$$A_{Al} = 2\pi r_{Al} h_{Al} \tag{3.16}$$

A_{H_2O} représente la surface latérale d'un cylindre de rayon égal au rayon R_{H_2O}, la hauteur h_{H_2O} est égale à la longueur mouillée réelle de l'élément parallèle à la zone de contact (équation 3.17).

$$A_{H_2O} = 2\pi R_{H_2O} h_{H_2O} \tag{3.17}$$

Une fois les résistances des matériaux sont définies, la résistance équivalente nécessite l'estimation de la conduction thermique de contact (h_c) du bloc moteur-injecteur (aluminium-injecteur). De nombreux chercheurs ont mené des études sur ce paramètre à la fois théoriques et expérimentales. Les modèles classiques sont représentés par le modèle plastique de Cooper, Mikic et Yovanovich (CMY [176]) et le modèle élastoplastique proposé par Sridhar et Yovanovich [177].
Dans cette étude, le modèle établi par CMY est adopté. Une relation sans dimension entre la pression appliquée, les propriétés des matériaux et la conductance thermique de contact a été établie comme suit (équation 3.18).

$$h_c = 1{,}45\frac{k_s m_s}{\sigma_s}\left(\frac{P}{H_c}\right)^{0{,}985} \tag{3.18}$$

Avec P la pression spécifique, m_s et σ_s représentent la pente moyenne absolue de l'aspérité et la rugosité effective de la surface, respectivement. La conductivité thermique effective (k_s) est donnée par l'équation 3.19 [178].

$$k_s = \frac{2k_1k_2}{k_1 + k_2} \tag{3.19}$$

Song et Yovanovich [179] ont développé une formule exprimant la pression relative P/H_c comme

suit (équation 3.20).

$$\frac{P}{H_c} = \left[\frac{P}{1{,}62c_1\left(\frac{\sigma_s}{\sigma_0}m\right)^{c_2}}\right]^{1/(1+0{,}071c_1)} \tag{3.20}$$

Avec σ_s= 1 μm, c_1 le coefficient de la corrélation de Vickers et c_2 est l'indice de taille de Vickers. Sridhar et Yovanovich [177] ont proposé des relations empiriques afin d'estimer les coefficients de micro dureté Vickers, en utilisant la dureté apparente du matériau. Dans ce cas, la pression spécifique P est supposée égale à la pression de serrage entre l'injecteur et le bloc moteur.

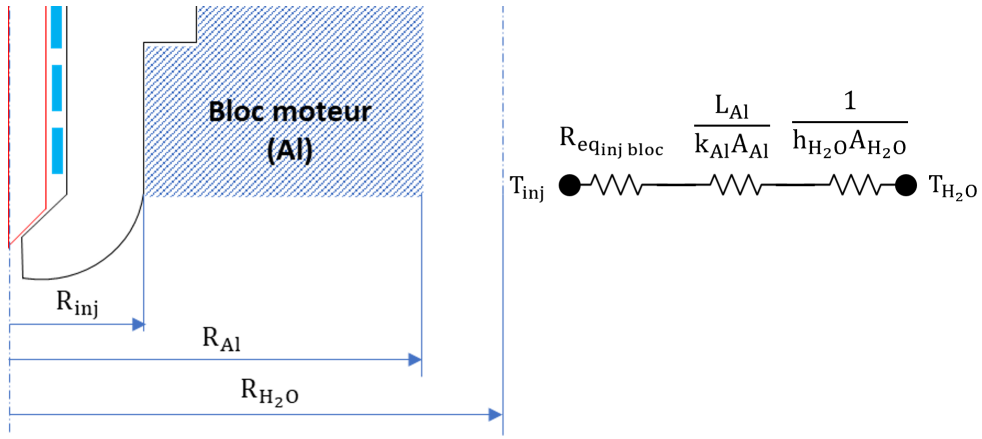


FIGURE 3.19 – Illustration du processus de transfert de chaleur dans la zone "Inj bloc 1".

C • Inj block 2 :

Il est à noter que le transfert de chaleur dans cette zone obéit à la même loi que dans la zone "Inj block 1". Dans ce travail, une distinction a été faite en raison de la configuration géométrique, manifestée par le paramètre géométrique R_{inj} d'une part, et la distribution de la température dans le bloc moteur, d'autre part, qui influence par la suite le flux de chaleur. La température dans la zone de contact "Inj block 1" est plus élevée que celle dans la zone de contact "Inj block 2", comme sera montré dans la suite du travail.

D • Buse :

• *Buse : injecteur fermé*

Dans ce cas, cette partie tubulaire est exposée à la chambre de combustion de manière similaire à la zone "Combustion face". C'est pourquoi elle obéit aux mêmes lois en termes de coefficient de transfert de chaleur, calculé selon l'approche de Woschni, et de la température adiabatique de la paroi.

• *Buse : injecteur ouvert*

Dans ce cas, le carburant injecté s'écoule dans cette zone tubulaire. Pour cette raison, cette zone sera contrôlée par les lois de la convection forcée dans un tube en déterminant le nombre de Nusselt (N_u) (équation 3.21).

$$N_u = \frac{hD_h}{\lambda} \tag{3.21}$$

Le diamètre hydraulique (D_h) dans ce cas est égal au diamètre de la buse d'injection spécifique à

l'injecteur utilisé dans l'étude. La corrélation Dittus-Boelter [180], illustrée par l'équation 3.22, relative à une conduite interne dans un cas d'écoulement turbulent est utilisée.

$$N_u = 0{,}023 Re^{0,8} Pr^{0,4} \tag{3.22}$$

E • Siège :

• *Siège : injecteur fermé*

Dans cette partie, où l'injecteur est fermé, l'aiguille de l'injecteur repose sur l'injecteur, sous la pression du ressort de l'injecteur, afin d'assurer l'étanchéité et d'empêcher le carburant de circuler dans cette zone.

La détermination de la chaleur transférée de l'injecteur à son aiguille d'injection nécessite la considération de la géométrie complexe et des propriétés thermo-physiques des deux parties (injecteur et aiguille). Le modèle réel du contact injecteur-aiguille (Figure 3.20-a) est transformé en un modèle idéal (Figure 3.20-b) afin d'évaluer le flux de chaleur conduit de l'injecteur à son aiguille. La résistance totale du modèle équivalent est exprimée par l'équation 3.23.

$$R_{tot} = \frac{L_{AC}}{k_{AC} A_{AC}} + R_{eq_{inj_aig}} \tag{3.23}$$

Où l'épaisseur L_{AC} est supposée égale à l'épaisseur réelle mesurée dans la direction orthogonale du siège entre l'injecteur et son aiguille. A_{AC} est supposée égale à la surface latérale d'un cylindre caractérisée par le rayon moyen R_{AC}, la hauteur h_{AC} est égale à la longueur moyenne réelle de l'élément évaluée parallèlement à la zone de contact (équation 3.24).

$$A_{AC} = 2\pi R_{AC} h_{AC} \tag{3.24}$$

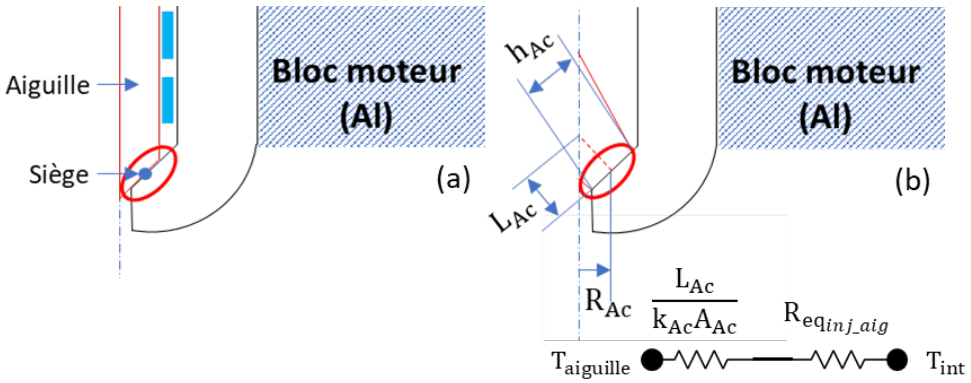


FIGURE 3.20 – (a) Modèle réel et (b) modèle idéal adopté pour la zone "Siège".

Dans cette étude, le modèle établi par CMY [176] est adopté pour calculer la conductance thermique de contact via l'approche illustrée par l'équation 3.18, similairement à ce qui est expliqué ci-dessus.

La pression spécifique (P) est déterminée en appliquant la première loi de Newton, le long de l'axe de révolution de l'injecteur, sur le système : injecteur, aiguille. La pression spécifique dans

cette situation sera une fonction entre la pression dans la chambre combustion, appliquée à la pointe de l'aiguille d'injecteur, et la pression de consigne, appliquée par le ressort de l'injecteur sur l'aiguille, comme défini par les équations 3.25 et 3.26.

$$P = \frac{F}{A_{AC}} \tag{3.25}$$

$$F = \frac{\pi}{4}\left[D^2_{Aiguille}P_{consigne} - D^2_{Buse}P_{cylindre}\right] \tag{3.26}$$

Avec $D_{Aiguille}$, D_{Buse} les diamètres de l'aiguille et de la buse, respectivement, $P_{consigne}$, $P_{cylindre}$ la pression de consigne et la pression dans la chambre de combustion, respectivement.

• *Siège : injecteur ouvert*

Dans ce cas, le combustible s'écoule à travers le tube conique. Comme évoqué ci-dessus, la corrélation de Dittus-Boelter [180] est appliquée via l'équation 3.22.

F • Conduite :

• *Conduite : injecteur fermé*

Dans cette partie, où l'injecteur est fermé, une quantité de carburant est piégée dans la conduite qui amène le carburant à l'injecteur. La chaleur transférée de l'injecteur à son aiguille en présence de cette quantité de carburant dans la conduite est déterminée en mettant en œuvre le modèle idéal : injecteur, aiguille, illustré par la Figure 3.21. La résistante totale équivalente du modèle est définie par les équations 3.27-3.29.

$$R_{tot} = \frac{R_{Aiguille}}{k_{Aiguille}A_{Aiguille}} + \frac{1}{h_{Carburant}A_{Carburant}} \tag{3.27}$$

$$A_{Aiguille} = 2\pi R_{Aiguille}h_{Aiguille} \tag{3.28}$$

$$A_{Carburant} = 2\pi R_{Carburant}h_{Aiguille} \tag{3.29}$$

Avec $A_{Aiguille}$, $A_{Carburant}$ la surface latérale d'un cylindre caractérisée par le rayon moyen $R_{Aiguille}$ et $R_{Carburant}$, respectivement. La hauteur $h_{Aiguille}$ est égale à la longueur moyenne réelle de l'élément évaluée parallèlement à la zone de contact.

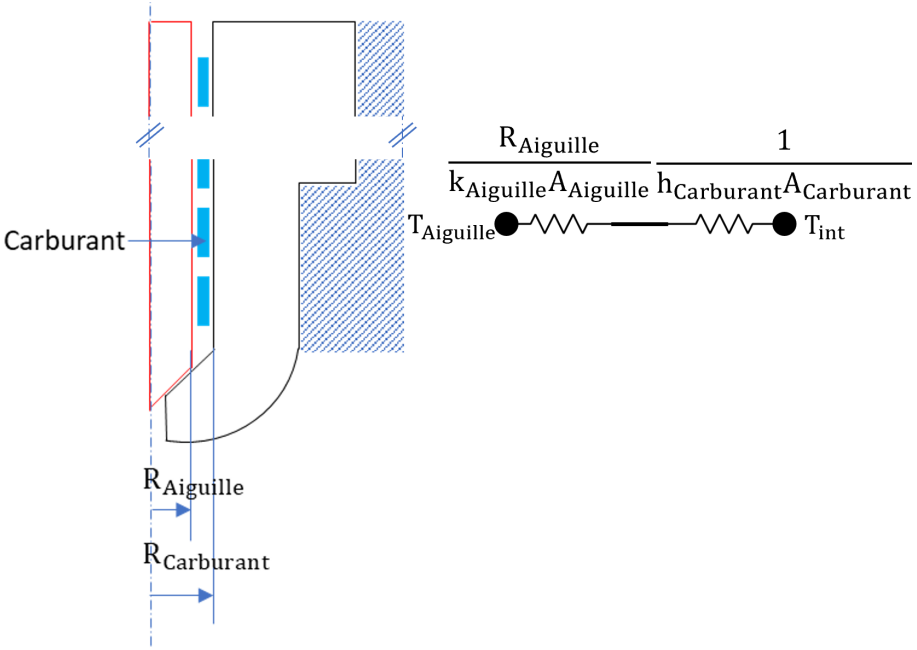


FIGURE 3.21 – Illustration du processus de transfert de chaleur dans la zone "Conduite".

• *Conduite : injecteur ouvert*

Dans ce cas, l'équation 3.22 est appliquée, puisque le transfert de chaleur est contrôlé par une convection forcée d'un écoulement turbulent dans un tube. Le diamètre hydraulique (D_h) dans ce cas est calculé comme suit (équation 3.30).

$$D_h = 2\left(R_{Carburant} - R_{Aiguille}\right) \tag{3.30}$$

2.3 Application : Injecteur pour moteur dual fuel gaz naturel/gazole

Afin de valoriser le modèle développé pour la modélisation de la température dans les injecteurs, une application est présentée dans cette section. Elle concerne le suivi de l'évolution de la température dans un injecteur de carburant d'un moteur dual fuel.

2.3.1 Modèle du moteur dual fuel gaz naturel/gazole

L'analyse mise en œuvre dans le cadre du présent travail traite le cas de l'injecteur monté dans le banc d'essais Lister-Petter (TS1). Les principales caractéristiques du moteur et les différentes conditions de fonctionnement sont présentées dans le Chapitre 2.

2.3.2 Analyse des éléments finis

Dans ce travail, la configuration de l'injecteur utilisé vérifie l'axisymétrie géométrique, pour cette raison le modèle est étudié en deux dimensions avec un aspect axisymétrique. Le code Ansys-FLUENT est utilisé pour simuler la conduction à travers cet injecteur, dans lequel le champ de température est une fonction du temps et des coordonnées spatiales. Un maillage non structuré avec un élément triangulaire est choisi pour cette analyse, où un raffinement

est appliqué près de la zone "Combustion face" pour capturer avec précision le flux de chaleur échangé avec la chambre de combustion via cette zone (Figure 3.22-a).
Les valeurs moyennes du coefficient de transfert de chaleur et de la température adiabatique de la paroi de chaque zone sont calculées et imposées comme conditions aux limites dans le code de calcul. La distribution de la taille des éléments à l'intérieur de l'injecteur étant un paramètre clé, six maillages triangulaires ont été testés. Pour obtenir un maxima de température relativement stables et minimiser les erreurs dues à la discrétisation spatiale, une grille moyenne de 1668 éléments est utilisée pour les simulations, comme l'illustre la Figure 3.22-b.

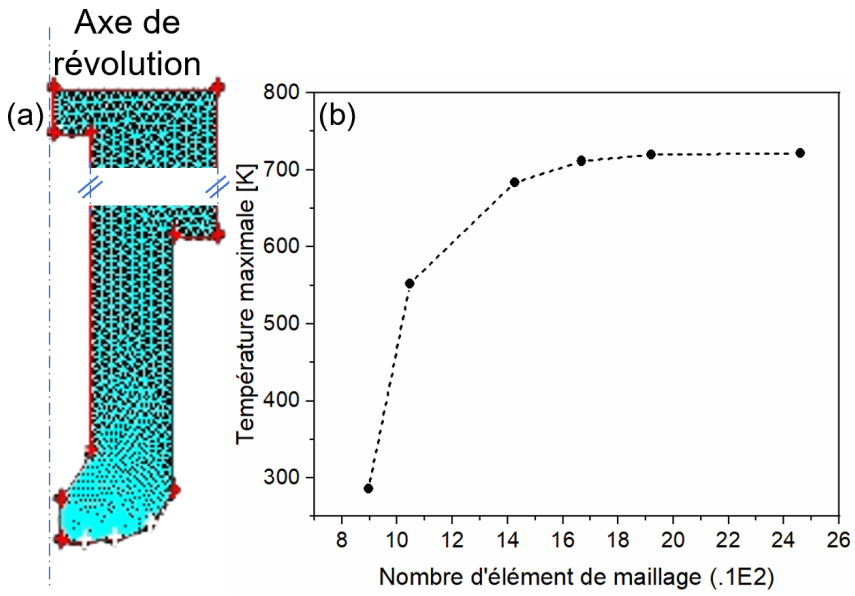


FIGURE 3.22 – (a) Maillage de la géométrie de l'injecteur, (b) variation de la température maximale dans l'injecteur en fonction du nombre d'éléments de maillage.

2.4 Résultats du modèle

Dans cette partie les principaux résultats sont présentés, en termes de calcul des conditions aux limites et de simulations numériques en fonction de ces conditions. Une comparaison entre l'évolution de la température dans l'injecteur fonctionnant en mode diesel conventionnel et en mode dual fuel est aussi mise en œuvre.

2.4.1 Caractéristiques de l'injection

Comme mentionné précédemment, le moteur DF utilise deux carburants simultanément : une quantité du gazole est injectée près du PMH (Point Mort Haut) pour s'auto-enflammer et initier la combustion du carburant gazeux déjà introduit dans le cylindre. Dans les moteurs diesel conventionnels, la quantité de carburant liquide injectée est proportionnelle à la charge et contribue énormément au refroidissement de l'injecteur. Cet effet est réduit dans le cas du moteur dual fuel en raison de la réduction de la quantité de carburant liquide injectée. La présente approche a été développée et appliquée aux injecteurs dans le cas d'un moteur diesel conventionnel et d'un moteur dual fuel.

Dans ce travail, une charge de 60% de la pleine charge est initialement utilisée. Pour le fonctionnement dual fuel, la fraction énergétique du gazole introduit est de 20%, le reste de l'énergie est assuré par le gaz naturel (GN). Le Tableau 3.6 résume les caractéristiques d'injection dans les deux cas de fonctionnement.

TABLE 3.6 – Caractéristiques d'injection.

Mode de combustion	Diesel	Dual fuel
Durée d'injection [°V]	30	15
Quantité du gazole injectée/cycle [mg]	0,8331	0,0983

Les profils réels et simplifiés de l'injection du gazole dans les deux modes de combustion sont illustrés dans la Figure 3.23. Le calcul du profil simplifié est basé principalement sur le maintien de la même quantité du carburant injectée par rapport au cas réel. Dans la suite du travail, afin de simplifier l'étude, les profils simplifiés sont utilisés pour assurer le passage instantané de l'aiguille de l'injecteur entre les positions fermée - ouverte - fermée.

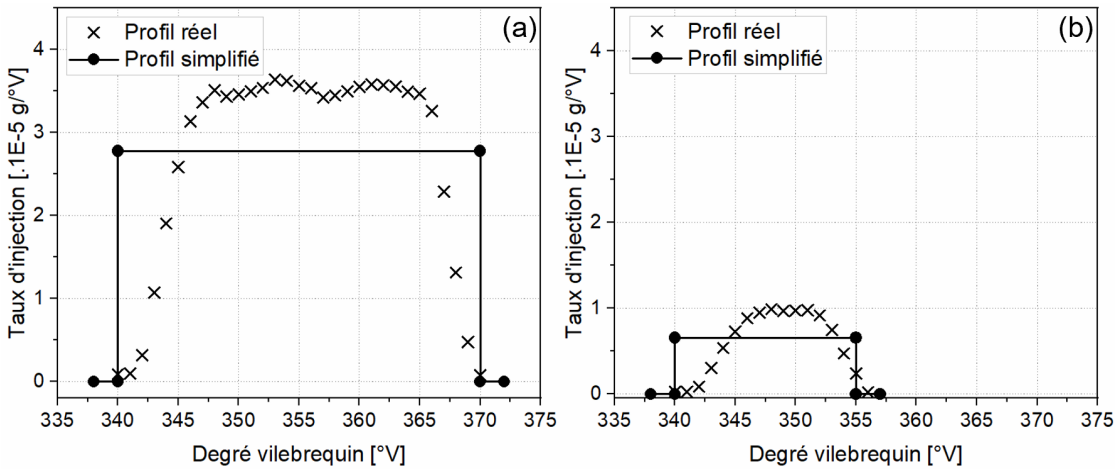


FIGURE 3.23 – Profil d'injection réel et simplifié pour : (a) le mode diesel, (b) le mode dual fuel.

2.4.2 Conditions aux limites

Cette partie traite principalement la détermination et la quantification des conditions aux limites contrôlées par l'environnement de l'injecteur.

A • Combustion face :

Une fois le signal de pression expérimental est mesuré sur le banc d'essais moteur selon les conditions de fonctionnement, la variation de la température interne est calculée à l'aide d'un modèle d'analyse [181]. Cette température est supposée être la température adiabatique de la paroi. Elle est utilisée aussi selon l'approche de Woshni pour le calcul du coefficient de transfert de chaleur. Les résultats sont présentés par la Figure 3.24.

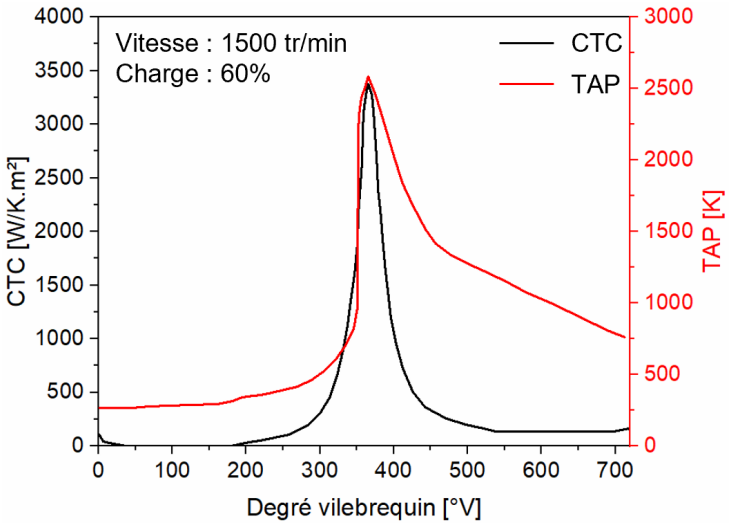


FIGURE 3.24 – Variation de CTC et de TAP.

Dans cette étude, la pression interne du cylindre et supposée être similaire dans les deux modes de combustion : diesel et dual fuel.

B • Buse :

Comme déjà mentionné, le transfert de chaleur à travers la buse s'effectue selon deux modes : un mode contrôlé par les conditions dans la chambre de combustion en termes de température et de pression, et un mode contrôlé par les caractéristiques du carburant injecté à travers cette partie de l'injecteur. La Figure 3.25 montre les variations de CTC et de TAP représentant les conditions aux limites de cette zone.

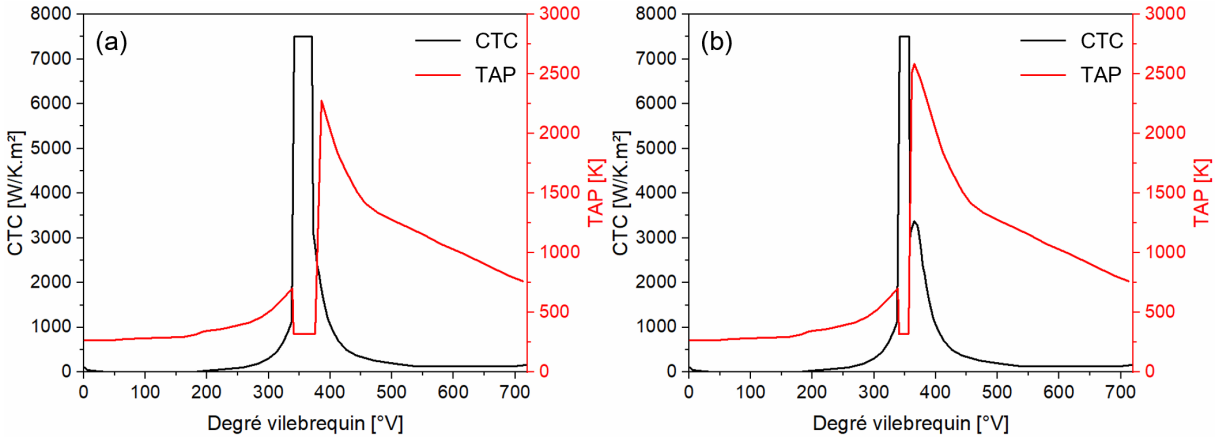


FIGURE 3.25 – Variation de CTC et de TAP pour la zone "Buse" dans le cas : (a) diesel, (b) dual fuel.

La différence entre les deux modes de combustion est remarquables, selon les résultats présentés par la Figure 3.25, dans la période de refroidissement subie par la partie buse de l'injecteur, qui est plus importante dans le cas diesel, avec une légère diminution de CTC dans le cas dual fuel, causée principalement par la réduction du taux d'injection de carburant, comme le montre

la Figure 3.23.

C • Siège :

Les valeurs des paramètres géométriques nécessaires au calcul du modèle idéal développé précédemment pour la détermination du CTC de cette zone sont résumées dans le Tableau 3.7.

TABLE 3.7 – Paramètres géométriques de la zone "Siège".

Paramètres	Valeurs (mm)
h_{AC}	1,2531
L_{AC}	0,8816
R_{AC}	0,7206

Une pression moyenne est prise pour la chambre de combustion pendant un cycle complet afin de calculer la conduction thermique du contact entre l'injecteur et l'aiguille de l'injecteur.
Comme le montre la Figure 3.26, le débit de carburant a une légère influence sur le CTC entre les modes diesel et dual fuel, ce qui affecte le transfert de chaleur dans cette zone, qui est déjà sensible à l'instant d'injection.

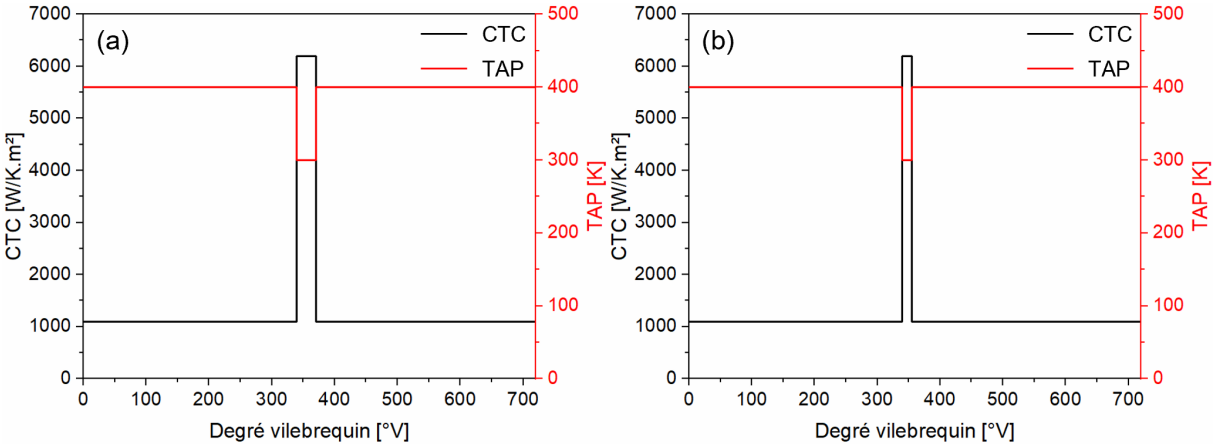


FIGURE 3.26 – Variation de CTC et de TAP pour la zone "Siège" dans le cas : (a) diesel, (b) dual fuel.

D • Conduite :

Les Variations de CTC et de TAP pour les deux modes de combustion sont illustrées par la Figure 3.27. Les paramètres d'injection, en termes de débit et de période d'injection, sont affectés par le mode de combustion. Cette différence affectera le transfert de chaleur dans l'injecteur, comme il sera montré ultérieurement.

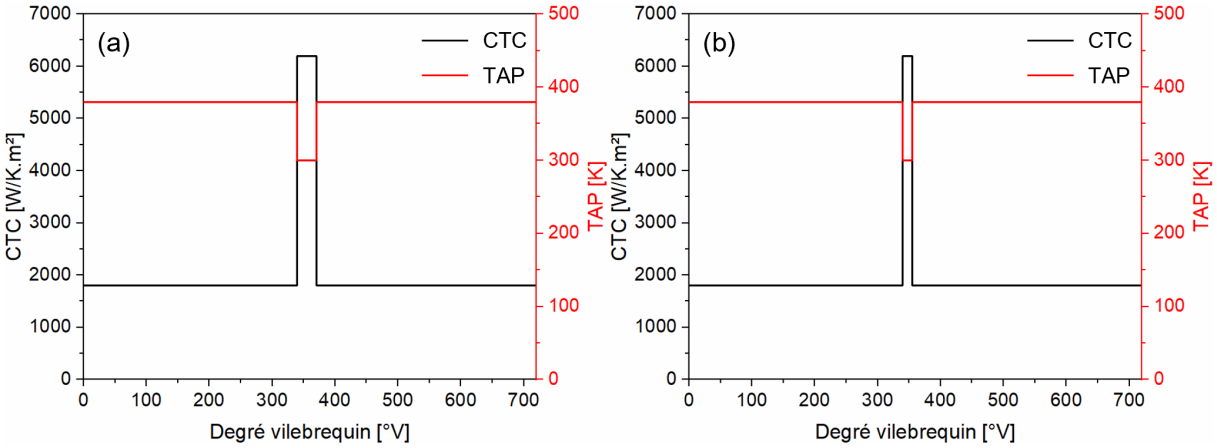


FIGURE 3.27 – Variation de CTC et de TAP pour la zone "Conduite" dans le cas : (a) diesel, (b) dual fuel.

E • Inj bloc 1 et Inj bloc 2 :

Ces deux zones ne sont pas affectées par le mode de fonctionnement du moteur, mais plutôt par la température de la chambre de combustion, qui affecte directement la température du bloc moteur et du fluide de refroidissement, illustré par l'eau dans cette étude. Le Tableau 3.8 résume les valeurs des paramètres nécessaires au calcul de CTC selon le modèle idéal présenté précédemment.

TABLE 3.8 – Paramètres géométriques des zones "Inj bloc 1" et "Inj bloc 2".

Paramètres	Valeurs
k_{Al}	121 W/mK
R_{AL}	3,54 mm
h_{H_2O}	14375 W/m^{2}K
R_{H_2O}	10 mm
T_{H_2O}	343,15 mm

Après la détermination des variables CTC et TAP pour chaque zone au cours d'un cycle moteur, le Tableau 3.9 résume les moyennes pour chaque zone pour les deux modes de combustion calculées via l'équation 3.13. Ces moyennes ont été utilisées dans le code Ansys-FLUENT comme conditions aux limites. L'utilisation des moyennes est autorisée car cette étude porte sur l'effet de la température de l'injecteur pour un grand nombre de cycle moteur. C'est pourquoi il est possible d'étudier un grand nombre de cycles moteur avec un coût de calcul réduit et sans affecter la précision du modèle.

TABLE 3.9 – Valeurs moyennes de TAP et de CTC pour le mode diesel et dual fuel.

Zones	$\overline{TAP}$ $[K]$		$\overline{CTC}$ $[W/m^2K]$	
	Dual fuel	Diesel	Dual fuel	Diesel
Combustion face	968,12	968,12	364,42	364,42
Buse	668,18	563,79	534,12	633,02
Siège	397,88	385,80	1222,64	1328,64
Conduite	397,88	385,80	1765,88	1860,33
Inj bloc 1	480	480	1359,19	1359,19
Inj bloc 2	380	380	1359,19	1359,19

2.4.3 Cartographie de température de l'injecteur

Au début des calculs, une température ambiante de 300 K est supposés pour toutes les subdivisions de l'injecteur. Les conditions aux limites sont initiées par les moyennes calculées précédemment pour le lancement des simulations instationnaires avec le code Ansys-FLUENT afin d'évaluer les cartographies de température de l'injecteur. L'objectif principal est d'identifier et de localiser les zones de température maximale, en fournissant des informations cruciales sur la distribution de la température à l'intérieur, là où il semble difficile d'obtenir des données expérimentales.
Les variations spatiales et temporelles de la température à l'intérieure de l'injecteur sont présentées par la Figure 3.28, pour un fonctionnement diesel et dual fuel. Pour les deux modes de combustion, la chaleur très élevée de la chambre de combustion est transférée à l'injecteur via la zone "Combustion face". Après un seul cycle moteur, l'homogénéité de la température dans l'injecteur n'est pas affectée, seul une augmentation de quelques degrés est détectée à la pointe de l'injecteur. Après 10 cycles de fonctionnement, la chaleur commence à progresser à l'intérieur de l'injecteur à partir de la zone "Combustion face". Après 100 cycles (soit 8 s), l'injecteur entier est affecté par le flux de chaleur entrant de la tête exposée à l'intérieur de la chambre de combustion. Après 500 cycles, une zone de température critique commence à devenir remarquable, avec des températures dépassant 700 K, ce qui influe sur la température moyenne de l'injecteur. La distribution et la valeur de la température maximale tendent à se stabiliser après environ 2500 cycles du moteur.

La différence de distribution de la température entre les deux modes de fonctionnement est remarquable. La progression des températures élevées à l'intérieur de l'injecteur dans le cas de fonctionnement dual fuel est beaucoup plus rapide que dans le cas diesel conventionnel, c'est pourquoi la température maximale apparaît beaucoup plus tôt dans le cas dual fuel, ce qui est dû à un gradient de température important. La température maximale atteint des limites beaucoup plus élevées dans le cas dual fuel après l'équilibre (3000 cycles).

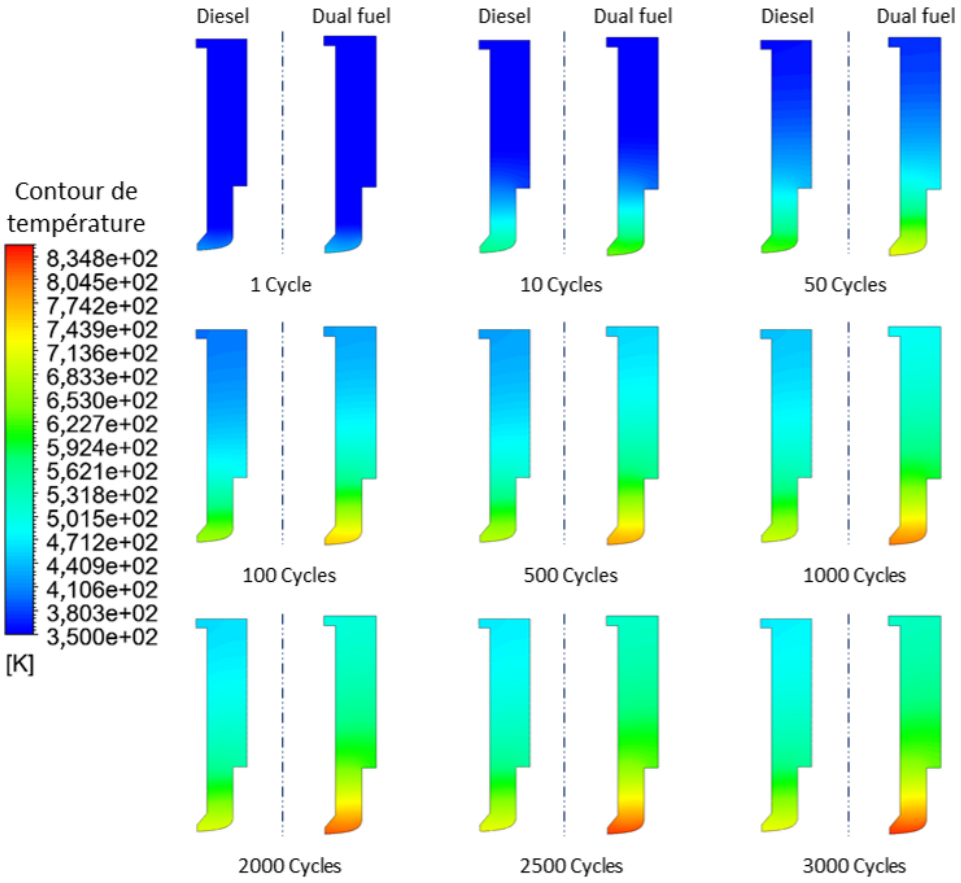


FIGURE 3.28 – Cartographies des températures de l'injecteur à différents cycles moteurs pour un fonctionnement diesel et dual fuel.

Afin d'analyser avec précision la température à l'intérieur de l'injecteur après l'équilibre, des points de référence ont été fixés comme indiqué dans la Figure 3.29-a.

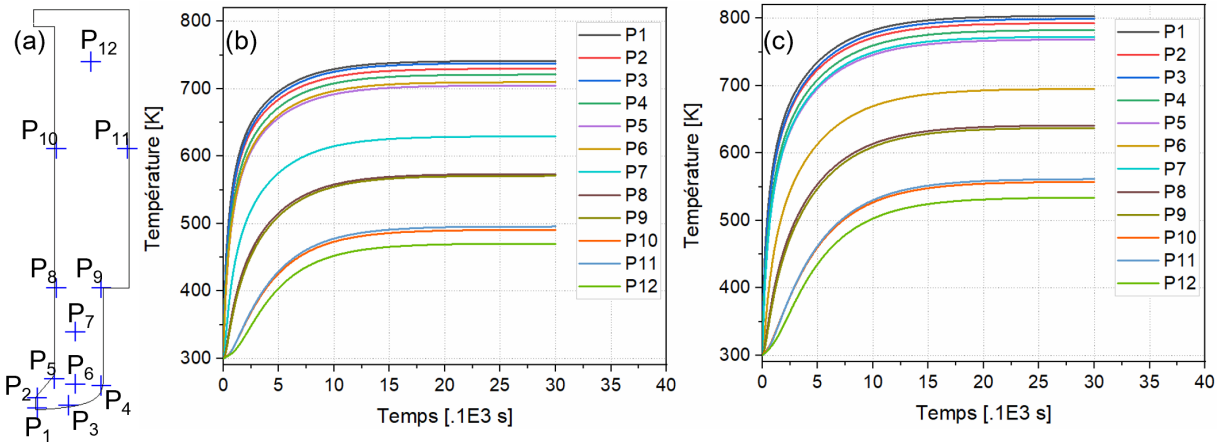


FIGURE 3.29 – (a) Points de contrôle et variation de la température dans ces points pour différents cycles moteur en mode : (b) diesel, (c) dual fuel.

La température maximale capturée à l'intérieur de l'injecteur fonctionnant sous le mode dual

fuel est de 830 K, alors qu'elle est de 712 K dans le cas diesel conventionnel. Cette différence est principalement due à l'intervalle de temps de refroidissement assuré par l'injection du carburant liquide (gazole), qui est beaucoup plus important dans le second cas de fonctionnement. En d'autre termes, la réduction de la quantité du gazole injectée dans le cas dual fuel entraîne une réduction de la quantité de chaleur normalement absorbée par le carburant lors de son passage dans l'injecteur jusqu'à la buse d'injection.
D'après les résultats des Figures 3.29-b et 3.29-c, dans le cas de fonctionnement diesel, les températures dans le même plan horizontal sont égales (T_8=T_9, T_{10}=T_{11}), mais ce n'est pas le cas dans le mode dual fuel, où la température à côté de la conduite de passage du carburant deviennent plus élevées que les autres températures dans le même plan horizontal (T_8>T_9, T_{10}>T_{11}). Cela s'explique également par la réduction de la chaleur absorbée par le combustible introduit dans le système.

L'effet de la quantité de carburant liquide injectée est capté principalement dans la zone de la pointe de l'injecteur. D'après les résultats de la Figure 3.30-a, les maxima des différences de température entre les cas de fonctionnement diesel et dual fuel sont enregistrés dans cette zone. En revanche, les température dans le cas de fonctionnement diesel sont très éloignées les unes des autres, en raison de l'effet de refroidissement, contrairement au cas dual fuel, pour lequel toute la zone atteint presque la même température maximale, étant donné que la quantité relativement faible de carburant introduite a un effet presque négligeable en termes d'absorption de chaleur, ce qui justifie la différence entre les écarts types entre les températures dans cette zone pour les deux modes de fonctionnement comme présenté par la Figure 3.30-b.

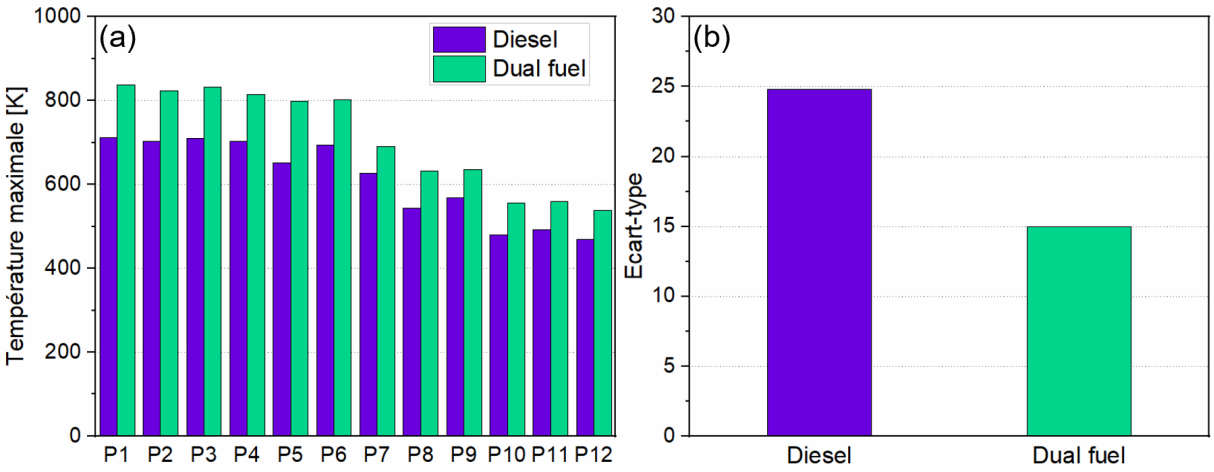


FIGURE 3.30 – (a) Variation de la température d'équilibre pour chaque point de contrôle, (b) variation de l'écart-type des températures d'équilibre dans la zone de la pointe de l'injecteur.

2.4.4 Cartographie de température de l'injecteur : Cas général

Dans la partie précédente, un seul cas de fonctionnement dual fuel a été étudié (60% de la pleine charge, 20% de l'énergie provenant du gazole). Comme constaté, la quantité du gazole injectée affecte directement la température à l'intérieur de l'injecteur, qui est également fonction de

la température dans la chambre de combustion, qui dépend directement de la charge du moteur. Pour cette raison l'effet de la charge du moteur et de la quantité de carburant liquide (carburant pilote) injectée dans le cas dual fuel sur la température maximale à l'intérieur de l'injecteur est crucial. Les résultats obtenus pour cette partie sont résumés dans la cartographie présentée par la Figure 3.31, où la température maximale après l'équilibre est présentée en fonction de la charge du moteur et de la quantité du gazole injectée, allant d'un cas de fonctionnement diesel conventionnel (cas 1) à un cas avec la plus petite quantité du gazole permise (cas 2), qui illustre un cas de fonctionnement avec 10% de l'énergie totale fournie par le gazole.

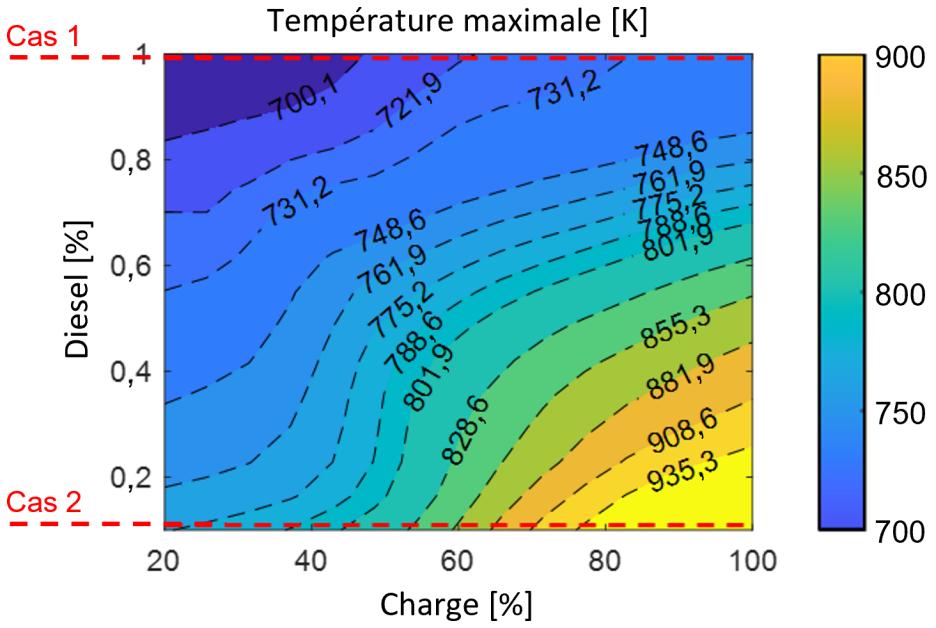


FIGURE 3.31 – Cartographie de la température maximale des injecteurs en fonction de la charge du moteur et de la quantité de carburant pilote injectée.

D'après les résultats, pour le cas 1 (diesel conventionnel), la différence de température maximale entre le fonctionnement à pleine charge et à 20% de charge est d'environ 21 K, contrairement au cas 2 (dual fuel avec la plus petite quantité du gazole injectée), pour lequel cette augmentation de température maximale entre les deux charges limites atteint plus de 215 K. En revanche, la différence de cette température maximale entre un mode diesel et dual fuel fonctionnant tous les deux à pleine charge dépasse 257 K. Cet effet est principalement justifié par l'équilibre entre la température dans la chambre de combustion et la quantité de carburant liquide injectée. Dans le cas d'un fonctionnement diesel conventionnel (cas 1), l'augmentation de la température en fonction de la charge s'accompagne d'une augmentation du carburant liquide injecté, ce qui permet de refroidir l'injecteur et d'absorber la chaleur supplémentaire. Contrairement au cas dual fuel (cas 2) où l'augmentation de la charge du moteur, qui entraîne une augmentation de la température dans la chambre de combustion, n'est pas causée par l'augmentation de la quantité de carburant liquide mais plutôt par la quantité de carburant gazeux (carburant primaire). En d'autres termes, la chaleur augmente sous l'effet de l'augmentation de la charge du moteur mais la quantité de carburant liquide reste constante, c'est pourquoi les différences des tempé-

ratures maximales entre le fonctionnement en mode dual fuel à 20% et à 100% d'une part et le fonctionnement diesel et dual fuel à pleine charge d'autre part, sont significatives.

3 Conclusion

Ce chapitre traite la modélisation de deux problèmes majeurs qui se manifestent dans les moteurs fonctionnant en mode dual fuel, notamment le cliquetis et la surchauffe des injecteurs.

La première section de ce chapitre a visé le développement d'un modèle de prédiction du cliquetis dédié aux moteurs dual fuel GN-H_2/gazole. Ce modèle est utilisé par la suite pour l'élimination de ce phénomène. Dans un premier temps, une modélisation thermodynamique à deux zones est utilisée pour modéliser l'évolution de la pression et de la température dans le cylindre dans la zone des gaz imbrûlés. En utilisant une approche de modélisation basée sur la formulation d'Arrhenius combinée avec une analyse de variables, l'instant prévu pour le cliquetis est prédit en fonction des conditions de fonctionnement.
Le modèle développé est couplé avec un outil de calcul CFD (Converge^{TM}) pour assurer l'élimination du cliquetis avec l'injection directe d'eau dans le cylindre. Ainsi, une petite quantité d'eau est injectée avant l'apparition du cliquetis. En outre, l'effet de la quantité d'eau et de l'instant d'injection, est étudié. Une combinaison optimale entre les deux paramètres est trouvée afin de supprimer le cliquetis tout en maintenant des performances élevés du moteur. Pour le moteur utilisé dans cette étude, la combinaison d'une quantité d'eau de 20% de la quantité du gazole injectée et une injection à 15°V avant l'instant prédit pour le cliquetis s'est avérée optimale.

L'étude présentée dans la deuxième section s'est penchée sur le phénomène de transfert de chaleur dans les injecteurs. Une approche rigoureuse et innovante a été mise en œuvre en subdivisant le corps de l'injecteur en plusieurs sous-zones, ce qui a permis d'affiner le traitement du transfert de chaleur en tenant compte des conditions propres à chaque sous-zone.

Grâce à une définition minutieuse des conditions aux limites, en tenant compte des variations de pression et de température au cours d'un cycle moteur, l'étude a permis d'obtenir des informations précieuses sur la dynamique du transfert de chaleur à l'intérieur des injecteurs. Le logiciel Ansys-FLUENT a été utilisé pour résoudre les équations de conduction et générer des cartographies de température spatiales et temporelles pour l'injecteur.
L'application de la méthode proposée à un injecteur de moteur à combustion interne a montré son efficacité dans des scénarios d'ingénierie pratiques avec un coût de calcul réduit. Les résultats ont révélé des différences significatives dans les profils de température entre les modes de combustion diesel et dual fuel. En mode dual fuel, caractérisé par une quantité réduite de carburant pilote, l'injecteur subit des températures plus élevées, en particulier au niveau de la pointe de l'injecteur. La différence de température observée entre le mode dual fuel et le mode diesel conventionnel à pleine charge dépasse 250 K dans cette zone critique, ce qui risque d'accélérer le vieillissement de l'injecteur.

Chapitre 4

Modélisation CFD : Application à la décarbonation

Objectifs

Le présent chapitre aborde un sujet d'actualité : la décarbonation des moteurs à combustion interne. Dans une première section, l'outil CFD Converge^{TM} est décrit en détaillant les différents modèles et sous modèles disponibles dans ce code pour la simulation des phénomènes physiques se produisant dans le cylindre durant un cycle moteur à 04 temps. La deuxième section se concentre principalement sur l'exploration de l'utilisation de deux combustibles alternatifs, notamment l'ammoniac et le méthanol, comme carburant primaire dans un moteur diesel fonctionnant en mode dual fuel. A cet effet, les limites de ces alternatives ont été exposées en mettant en œuvre des techniques d'optimisation pour les surmonter.

Introduction

Entre la raréfaction des ressources fossiles et la restriction de plus en plus sévère par rapport aux normes des émissions polluantes, la recherche de nouveaux carburants alternatifs pour le moteur dual fuel est extrêmement essentielle. Suite à une description de l'outil de simulation numérique, deux carburants ont été investigués en qualité de carburant primaire au moteur diesel fonctionnant en mode dual fuel. Les performances du moteur et ses émissions polluantes ont été analysées dans la perspective d'améliorer le fonctionnement du moteur, avec l'utilisation d'outils avancés de modélisation et d'optimisation.

1 Modélisation CFD des moteurs diesel en mode dual fuel

1.1 Contexte de l'étude

Cette étude repose sur une approche numérique avec laquelle les écoulements de fluides internes au moteur ont été simulés. Pour ce faire, le logiciel Converge^{TM} est utilisé en raison de sa capacité à fournir des solutions précises et efficaces pour une variété de configurations d'écoulement de type réactif.

1.2 Logiciel Converge^{TM} et schéma numérique

Converge^{TM} est un logiciel de dynamique des fluides computationnel (CFD) conçu pour la simulation des écoulements de fluides, incompressibles ou compressibles, avec des réactions chimiques, dans des géométries complexes avec des frontières stationnaires ou mobiles. Il peut traiter un nombre varié d'espèces et de réactions chimiques, des pulvérisations liquides transitoires ainsi que des écoulements laminaires ou turbulents. Cet outil de simulation repose sur la méthode de discrétisation du domaine de calcul dite "frontières immergées". A ce titre, une grille cartésienne uniforme est créée avec la combinaison de la méthode de cellules découpées (*Cut-Cell*) aux frontières, pour éliminer ainsi la nécessité de transformer la grille de calcul dans la géométrie d'intérêt, tout en représentant correctement la structure originale des frontières. Cette méthode permet l'utilisation de grilles orthogonales simples et automatise entièrement le processus de génération de maillage.

Les équations de conservation sont résolues en utilisant la méthode des volumes finis avec un schéma de discrétisation centré d'ordre 2. Le solveur transitoire utilise la méthode de division des opérateurs avec impulsion de pression (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*) pour le couplage vitesse-pression. Il est inclu dans les équations gouvernantes la conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces chimiques. Lorsqu'un modèle de turbulence est activé, des équations de transport supplémentaires incluant le transport d'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation turbulente sont introduites.
Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement pour les écoulements

compressibles peuvent être exprimées par les équations 4.1 et 4.2 :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_i\right)}{\partial x_i} = S \tag{4.1}$$

$$\frac{\partial \left(\rho u_i\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_i u_j\right)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i + S_i \tag{4.2}$$

Où le tenseur de contrainte visqueuse σ_{ij} est défini par l'équation 4.3.

$$\sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \mu_j}{\partial x_i} \right) + \left(\mu\prime - \frac{2}{3}\mu \right) \frac{\partial \mu_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \tag{4.3}$$

Avec u la vitesse, ρ la masse volumique, P la pression, S_i le terme source, μ la viscosité dynamique, $\mu\prime$ la viscosité dilatationnelle (supposée null), g_i la composante accélération d'une force corporelle, et δ_{ij} le delta Kronecker.

Les équations d'énergie et de transport des espèces peuvent être résolues de manière indépendante ou conjointe avec les équations de masse et de quantité de mouvement. Pour les écoulements compressibles, une équation d'état est nécessaire pour coupler la masse volumique, la pression et la température. Converge^{TM} inclut l'équation d'état Redlich-Kwong pour les simulations. Les équations d'état cubiques couramment utilisées peuvent être exprimées de manière simplifiée comme l'indique l'équation 4.4.

$$P = \frac{RT}{\nu - b} - \frac{a}{\nu^2 + ub\nu + wb^2} \tag{4.4}$$

Où P est la pression, R la constante des gaz parfaits, T la température, ν le volume molaire, a et b des constantes spécifiques à chaque substance, u et w des paramètres spécifiques à chaque équation d'état.

1.3 Méthodes de maillage

Converge^{TM} présente une approche innovante de maillage "frontières immergées" qui élimine le besoin de faire coïncider la grille de calcul avec la géométrie d'intérêt. Cette méthode offre des avantages significatifs ; elle permet de générer automatiquement une grille parfaitement orthogonale et structurée, en fonction de paramètres de contrôle de maillage définis par l'utilisateur. Cette méthode de génération de maillage élimine la complexité de la génération de maillage et la nécessité de générer manuellement une grille. De plus, le temps nécessaire à la génération de la grille est considérablement réduit.

Pendant l'exécution, le code utilise la surface triangulée fournie pour découper les cellules qui intersectent la surface, en suivant la méthode de cellule découpée. Cette approche de génération de maillage permet la modification du maillage pendant la simulation, notamment l'ajustement de la taille des cellules du domaine (raffinements ou grossissements locaux) pendant la simulation. Un avantage significatif de cette génération de maillage est la capacité du code à gérer les surfaces

mobiles en régénérant automatiquement le maillage près de parois pendant la simulation, sans nécessiter d'intervention de l'utilisateur. Converge^{TM} propose divers outils pour contrôler la taille du maillage avant et pendant une simulation. La fonction "encastrement fixe" (*fixed embedding*) permet un raffinement du maillage à des emplacements et moments bien définis. Le raffinement de maillage adaptatif (AMR) ajuste automatiquement le maillage en fonction des conditions fluctuantes et mobiles. Cette méthode peut considérablement réduire les temps de calcul en augmentant la taille des cellules pendant les moments non critiques de la simulation et en capturant avec précision les phénomènes physiques qui devront se produire. En utilisant un facteur de redimensionnement pour l'ensemble de la simulation, la taille des cellules dans le maillage redimensionné (dx) est égale à la taille des cellules dans le maillage de base (dx_{base}) divisée par 2 à la puissance du redimensionnement, comme défini par l'équation 4.5.

$$dx = \frac{dx_{base}}{2^{\text{redimensionnement de maillage}}} \tag{4.5}$$

Un redimensionnement de maillage de 0 maintient les cellules de base inchangées, une valeur négative les agrandit, et une valeur positive les affine. Converge^{TM} ajuste également dy_{base} et dz_{base} selon l'équation 4.5. L'encastrement fixe est également utilisé pour minimiser le temps de simulation, en permettant d'affiner le maillage à des emplacements précis où une résolution plus fine est cruciale pour l'exactitude de la solution. Cinq types d'encastrement fixe sont proposés : *BOUND* (*BORDER*, *WALL*), *SPHERE*, *CYLINDER*, *BEC* (*NOZZLE*, *INJECTOR*), *BOX*, *REGION*. Chaque type d'encastrement fixe nécessite une échelle d'encastrement spécifiant comment Converge^{TM} affine le maillage en ces points, tout en contrôlant le début et la fin de l'encastrement fixe. L'encastrement fixe permet de résoudre des simulations complexes, telles que celles des moteurs à combustion interne, en offrant une grille haute résolution aux endroits critiques, comme la sortie de la buse, tout en conservant une grille plus grossière ailleurs pour optimiser le temps de simulation.

1.4 Modèle de turbulence

Pour prendre en compte les effets de la turbulence dans les écoulements, l'outil utilisé propose une variété de modèles, allant des modèles de type k-epsilon aux approches plus avancées telles que les modèles RANS à équations de transports. Ces modèles sont cruciaux pour capturer la diffusion accrue de masse, de quantité de mouvement, d'énergie et d'espèces chimiques induite par la turbulence.
Dans le cadre des modèles de turbulence les plus couramment utilisés, tels que le modèle k-epsilon standard, les équations de transport de l'énergie cinétique turbulente (k) et de sa dissipation (ϵ) sont résolues. Ces équations sont représentées par les équations 4.6 et 4.7.

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla.(\rho u k) = \nabla.\left(\frac{\mu_t}{\sigma_k}\nabla k\right) + G_k - \rho\epsilon \tag{4.6}$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \nabla.(\rho u \epsilon) = \nabla.\left(\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}\nabla \epsilon\right) + C_{\epsilon 1}\frac{\epsilon}{k}G_k - C_{\epsilon 2}\frac{\rho\epsilon^2}{k} \tag{4.7}$$

Où k représente l'énergie cinétique turbulente, ϵ la dissipation turbulente, μ_t la viscosité turbulente, σ_k et σ_ϵ des constantes de modèle, G_k la génération d'énergie turbulente, $C_{\epsilon 1}$ et $C_{\epsilon 2}$ des constantes empiriques.
En outre, pour les écoulements compressibles, en particulier les écoulements réactifs, la fluctuation de la masse volumique est très importante. La solution des équations de Reynolds moyennées devient plus complexe, et une seconde opération, la moyenne de Favre (moyenne pondéré par la masse), est introduite. Cette moyenne est définie pour la vitesse par l'équation 4.8.

$$\tilde{u}_i = \frac{\overline{\rho u_i}}{\overline{\rho}} \tag{4.8}$$

En appliquant la moyenne de Favre aux équations de Navier-Stokes, leurs expressions moyennées sont alors données comme suit :
Conservation de la masse (équation 4.9) et de la quantité de mouvement (équation 4.10) :

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \tag{4.9}$$

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\tilde{u}_i\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j\right)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\mu\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}\right)\delta_{ij}\right] + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(-\widetilde{u_i^{"}u_j^{"}}\right) \tag{4.10}$$

Équation des espèces chimiques (équation 4.11) :

$$\frac{\partial \overline{\rho}_m}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}_m \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}_m D \frac{\partial \tilde{Y}_m}{\partial x_j}\right) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(-\overline{\rho}\widetilde{u_i^{"}Y_m^{"}}\right) \tag{4.11}$$

Équation de l'énergie (équation 4.12) :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{e}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_j \overline{\rho}\tilde{e}}{\partial x_j} = -\overline{P}\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} + \overline{\sigma}_{ij}\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(K\frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j}\right) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D \sum_m \tilde{h}_m \frac{\partial \tilde{Y}_m}{\partial x_j}\right) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(-\overline{\rho}\widetilde{u_i^{"}e^{"}}\right) \tag{4.12}$$

Dans ces équations, $\overline{\rho}$ représente la masse volumique moyenne, $\tilde{u}_i$ la vitesse moyenne, $\overline{P}$ la pression moyenne, $\overline{T}$ la température moyenne, μ la viscosité dynamique, D le coefficient de diffusion, $\tilde{Y}_m$ la fraction molaire moyenne, $\tilde{h}_m$ l'enthalpie moyenne, et $\overline{\sigma}_{ij}$ le tenseur de contrainte moyen.

1.5 Modélisation de la pulvérisation

La modélisation de la pulvérisation dans Converge^{TM} exploite des méthodes avancées telles que la méthode de Volume de Fluide (VoF) ou la méthode de suivi de particules avec une approche Lagrangienne-Eulerienne, pour représenter de manière précise la dispersion des gouttelettes de carburant dans le cylindre du moteur, ainsi que les phénomènes de collision, de coalescence et d'évaporation qui peuvent se produire pendant le processus de pulvérisation.
Dans le cadre de la simulation, la pulvérisation du carburant liquide, injecté dans la chambre de combustion, subit des processus d'atomisation et de vaporisation, suivis du mélange carburant-air. Ainsi, les gouttelettes de pulvérisation sont soumises à plusieurs processus depuis le mo-

ment de l'injection. Converge^{TM} utilise un modèle de pulvérisation basé sur le type Lagrangien-Eulérien, où la phase liquide est modélisée comme un composant unique avec les propriétés thermodynamiques du gazole obtenues à partir de la bibliothèque de propriétés de Converge^{TM}.

Dans ce modèle, plusieurs mécanismes de pulvérisation sont disponibles, notamment des modèles basés sur les instabilités de Kelvin-Helmholtz (KH) et de Rayleigh-Taylor (RT), l'atomisation par feuille d'instabilité linéaire (LISA : *Linear Instability Sheet Atomisation*), et le modèle de rupture de gouttelettes de Taylor Analogy (TAB). Ces mécanismes sont activés en fonction de la distance caractéristique d'atomisation L_b (équation 4.13). Les instabilités de type KH sont responsables de l'atomisation de la goutte dans cette plage de distance, tandis qu'au-delà, le mécanisme de RT entre également en jeu.

$$L_b = C_{b1}\sqrt{\frac{\rho_1}{\rho_g}}d_0 \tag{4.13}$$

Les collisions et la coalescence des gouttelettes sont également modélisées à l'aide du modèle *NO Time Counter* (NTC) de Schmidt et Rutland [182], qui implique un sous-échantillonnage stochastique des parcelles dans chaque cellule pour des calculs de collision plus rapides. La dispersion turbulente des gouttelettes est prise en compte en ajoutant une vitesse fluctuante aux particules de gaz dans le modèle, tandis que l'interaction des gouttelettes avec les parois solides est modélisée à l'aide du modèle Rebound/Slide de Naber et Reiltz [183].
La vaporisation des gouttelettes est modélisée en utilisant la corrélation de Frossling d'Amsden et al. [184], où le taux de variation du rayon de la goutte est calculé en fonction de la diffusivité de masse laminaire du vaporisateur de carburant et d'un nombre de transfert de masse supposant une température homogène des gouttelettes.
Cette approche de modélisation de la pulvérisation permet une représentation précise et réaliste des processus complexes associés à la pulvérisation du carburant liquide, ce qui est essentiel pour une conception et une optimisation efficace des systèmes de combustion et de pulvérisation dans diverses applications industrielles.

1.5.1 Structure du jet

Un jet de combustible liquide injecté dans une atmosphère gazeuse est formé d'une partie liquide et d'une partie gazeuse. La Figure 4.1 illustre la structure typique d'un jet (spray) lors d'une injection. On définit l'angle du jet, la longueur de dissolution et la pénétration du jet. Le jet entraîne lors de sa formation du mélange gazeux. Pour cela, la richesse totale dans le jet n'est pas uniforme. Elle a une valeur maximale dans l'axe, et diminue vers les extrémités.

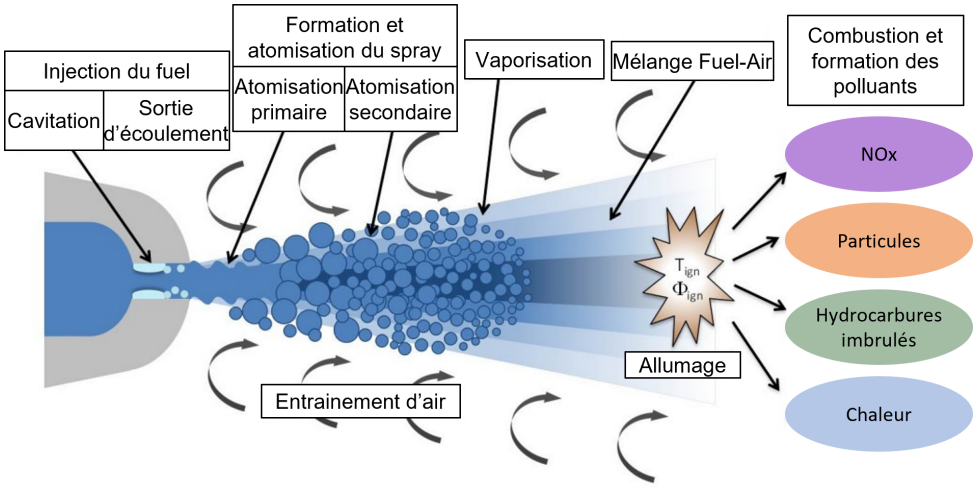


FIGURE 4.1 – Structure typique d'un jet[2] (Reproduit avec la permission de ARCHIE-West).

La turbulence créée dans le cylindre a une influence très importante sur la structure du jet. Trois principaux mouvements de turbulence ont été mis en évidence : le Swirl, le Squish et le Tumble. A la sortie de la buse d'injection, les gouttelettes du combustible ont une vitesse assez élevée, qui peut varier entre 100 et 500 m/s. Cependant, la vitesse des gouttelettes dans le jet n'est pas uniforme ; elle décroît du centre vers l'extérieur du jet [185].

1.5.2 Nombres adimensionnels caractéristiques d'un jet

Le but de cette sous-section est de présenter les différents nombres adimensionnels caractéristiques d'un jet. Ces nombres peuvent caractériser soit le jet liquide complet soit simplement une goutte liquide ou un ligament liquide.

• *Nombre de Weber (We)*
Le nombre de Weber représente le rapport des forces d'inertie et de tension de surface. Les forces d'inertie ou aérodynamiques sont déstabilisatrices, c'est-à-dire qu'elles favorisent la fragmentation d'un élément liquide. Au contraire, les forces de tension de surface sont stabilisatrices, ce qui signifie qu'elles s'opposent à la fragmentation de l'élément liquide. Le nombre de Weber mesure la compétition entre ces deux actions exercées sur un élément liquide, sa forme générale est donnée par l'expression 4.14.

$$We = \frac{\rho U^2 L}{\sigma} \tag{4.14}$$

Où ρ est la masse volumique, U l'échelle de vitesse, L l'échelle de longueur et σ la tension de surface.

• *Nombre d'Ohnesorge (Oh)*
Le nombre d'Ohnesorge représente le rapport de la force de viscosité interne à la goutte et de

2. https://www.archie-west.ac.uk/projects/computational-fluid-dynamics/the-cfd-development-of-non-premixed-dual-fuel-combustion-diesel-engine-injected-by-high-pressure-gas-in-the

la force de tension de surface, il est donné par l'expression 4.15.

$$Oh = \frac{\sqrt{We}}{Re} \tag{4.15}$$

Il représente le rapport de la force de viscosité interne de la goutte sur les forces de tension superficielle et aérodynamique. Il caractérise par exemple la capacité d'une goutte à résister à la collision par dissipation visqueuse de l'énergie cinétique.

• *Nombre de Reynolds (Re)*
Le nombre de Reynolds est défini par l'expression 4.16.

$$Re = \frac{\rho U L}{\mu} \tag{4.16}$$

Il représente le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses ou le rapport (qualitatif) du transfert par convection sur le transfert par diffusion de la quantité de mouvement. Il est possible de définir un nombre de Reynolds gazeux d'une goutte de diamètre d par l'expression 4.17.

$$Re_g = \frac{\rho_g |U_l - U_g| d}{\mu_g} \tag{4.17}$$

Ce nombre de Reynolds correspond au rapport des forces aérodynamiques externes sur les forces de viscosité du gaz. Il caractérise l'écoulement gazeux autour de la goutte.
On peut aussi définir un nombre de Reynolds liquide ou de collision par l'expression 4.18.

$$Re_l = \frac{\rho_l |U_l - U_g| d}{\mu_l} \tag{4.18}$$

Ce nombre de Reynolds caractérise le rapport des forces aérodynamiques mises en jeu lors de la collision sur les forces dissipées dans la goutte.

1.6 Modélisation de la combustion

La modélisation de la combustion dans Converge^{TM} est caractérisée par une variété d'approches, chacune offrant des capacités spécifiques pour capturer les phénomènes complexes associés à la combustion. Parmi ces approches figurent les modèles de flamme chimiquement réduite, les modèles de flamme en équilibre chimique, ainsi que la simulation directe de la combustion turbulent-flamelet.

Pour représenter les réactions chimiques impliquées dans la combustion, un large éventail de modèles de cinétique chimique est intégré, notamment des modèles pour la combustion générale, la combustion prémélangée, la combustion turbulente non prémélangée, et des modèles simplifiés de chimie générale. Parmi ces modèles, le solveur de cinétique chimique détaillée (SAGE), développé par Senecal et al. [186], est utilisé pour modéliser la combustion. Ce solveur utilise un mécanisme de cinétique chimique, qui est un ensemble de réactions élémentaires et des informations sur les constantes de vitesse associées. Ces réactions élémentaires sont résolues comme

un système d'équations différentielles ordinaires afin de décrire les taux de réaction globaux qui se produisent pendant la combustion.

Un mécanisme chimique dual fuel pour le n-heptane comme carburant pilote est largement utilisé dans les applications ; il comprend 76 espèces et 464 réactions réversibles. Le gazole est représenté par le n-heptane (C_7H_{16}) en raison de ses propriétés de délai d'auto-inflammation similaires au gazole [187].
Les simulations utilisent un solveur de chimie multi-zones développé par Babajimopoulos [188]. Dans ce modèle, les cellules sont regroupées en zones en fonction de leur état thermodynamique, et la cinétique chimique détaillée est résolue dans chaque zone pour réduire le temps de calcul. Les variables d'intérêt dans ces simulations sont la température et le rapport de réaction, qui sont essentiels pour comprendre et prédire les mécanismes de combustion.

1.7 Modélisation des émissions polluantes

La modélisation des émissions polluantes dans Converge^{TM} est une fonctionnalité robuste qui prend en compte divers processus physiques et chimiques impliqués dans la formulation des polluants atmosphériques tels que les oxydes d'azote et les particules de suies. Le logiciel propose une gamme d'options pour la modélisation des émissions, permettant ainsi de prédire avec précision les concentrations et les distributions spatiales de ces polluants.
Pour simuler la formation de suies, Converge^{TM} propose un modèle empirique, (modèle Hiroyasu-NSC), qui prend en compte les étapes d'inception, de croissance de surface, de coagulation et d'oxydation de suies. Ce modèle décrit la production de masse de suies dans une cellule de calcul en fonction de la compétition entre le taux de formation de la masse de suies et le taux d'oxydation de la suie, selon les travaux de Hiroyasu et Kadota [189].

La formation de NO est modélisée à l'aide du mécanisme étendu de Zeldovich, comme présenté par Heywood [76]. Ce mécanisme comprend trois réactions, utilisant des hypothèses d'état quasi-stationnaire et des constantes d'équilibre pour résoudre la formation thermique de NO.

2 Moteur dual fuel ammoniac/gazole : Effet de la forme du bol et de l'enrichissement par l'hydrogène

En réponse aux réglementations de plus en plus strictes en matière d'émissions pollantes et à l'épuisement des ressources de carburant conventionnelles, il est devenu impératif d'intégrer des carburants sans carbone dans le secteur des transports. Tandis que l'hydrogène (H_2) présente des défis techniques importants, l'ammoniac (NH_3) pourrait constituer une meilleure alternative en facilitant le transport, le stockage et la stabilité de combustion et en offrant des avantages écologiques et économiques. Cependant, la substitution de l'ammoniac entraîne l'augmentation des émissions de NH_3 non brûlé, en particulier à des charges élevées, où la faible réactivité de l'ammoniac se manifeste (cf. Chapitre 1), pénalisant ainsi le rendement du moteur.

2.1 Contexte général

À cause de la faible réactivité de l'ammoniac, son utilisation comme carburant primaire dans les moteurs dual fuel reste toujours restreinte. Plusieurs recherches ont focalisé leurs intérêts sur cette problématique dans le but de maximiser le taux de participation de l'ammoniac dans la combustion dual fuel. Afin de répondre à ces objectifs, plusieurs stratégies d'intervention à différents niveaux du moteur peuvent être mises en place. Elle sont résumées dans le Tableau 4.1.

TABLE 4.1 – Stratégies d'amélioration de la combustion d'ammoniac.

Nature d'intervention	**Description**	**Auteurs et année**	**Principaux résultats**
Nature du carburant pilote	Utilisation de dimethyl ether	Gross et Kong (2013) [190]	Prolongation du délai d'auto-inflammation, augmentation de CO, HC et NO_x.
	Utilisation du biodiesel	Nadimi et al. (2022) [191]	Réduction du rendement, CO_2, CO et HC, augmentation de NO_x.
Nature de l'ammoniac	Utilisation de l'ammoniac aqueux	Chen et al. (2023) [192]	Reduction du dégagement de chaleur, réduction de NO_x et de suies.
Nature de gaz primaire	Enrichissement par H_2	Xu et Bai (2023) [193]	Amélioration de la combustion de l'ammoniac, augmentation de NO_x.
	Utilisation du peroxyde d'hydrogène	Shafiq et Omar (2023) [194]	Augmentation de la puissance, réduction de NO_x.
Stratégie d'injection	Avancement de l'injection pilote	Tay et al. (2017) [195]	Augmentation du dégagement de chaleur, réduction d'ammoniac non-brûlé.
		Shin et Park (2023) [196]	Amélioration de l'efficacité de combustion, augmentation de NO_x.
Caractéristiques de la chambre de combustion	Utilisation de préchambre de combustion	Liu et al. (2024) [197]	Amélioration notable du rendement thermique accompagnée de faibles émissions d'ammoniac.

La plupart des travaux de recherche de la littérature se concentrent sur l'exploration de l'effet la loi d'injection sur l'amélioration de la combustion, en restant sur des configurations de moteur très proches de celle du diesel conventionnel. Ceci a permis de constater l'insuffisance des solutions proposées, principalement due à la nature de la combustion de l'ammoniac caractérisée par la réduction de la vitesse de de propagation de la flamme.

Dans ce contexte, l'effet de la forme du bol de la chambre de combustion d'un gros moteur dual fuel ammoniac/gazole sur le processus de combustion a été investigué. L'objectif principal est d'adapter la forme du bol de la chambre de combustion et le taux de Swirl dans le cylindre

afin d'améliorer la turbulence interne, qui a un effet direct sur la vitesse de propagation de la flamme. Cette approche est contrôlée par le développement d'un méta-modèle, reliant les performances et les émissions au taux de Swirl et aux paramètres géométriques contrôlant la forme du bol, et l'optimisation multi-objectifs en parallèle. Le rendement thermique et l'efficacité de la combustion sont à maximiser en réduisant les émissions de NO_x. Les différents résultats numériques ont été utilisés pour caractériser la turbulence dans la chambre de combustion et expliquer son influence sur l'amélioration de la combustion. Une fois la géométrie optimale est obtenue, l'influence de l'enrichissement du mélange air-ammoniac avec de faibles pourcentages d'hydrogène sera combinée, afin de comprendre la phénoménologie de la combustion dans ces conditions et d'envisager des moyens pour fonctionner le moteur dual fuel ammoniac/gazole dans les conditions optimales.

2.2 Données expérimentales pour validation

Dans cette section, des résultats de la littérature ont été utilisés pour la validation de l'approche numérique adoptée. Les résultats utilisés sont issus des essais expérimentaux réalisés par Jin et al. [198] sur un moteur suralimenté modifié, conçu à l'origine pour les camions. Il s'agit d'un moteur diesel six cylindres à quatre temps et à allumage par compression. Les auteurs ont modifié le moteur d'origine pour permettre un fonctionnement dual fuel ammoniac/gazole. Ils ont intégré un kit d'injection de carburant gazeux dans le collecteur d'admission afin d'introduire l'ammoniac dans le moteur. Le Tableau 4.2 présente les principales caractéristiques et les conditions de fonctionnement.

TABLE 4.2 – Caractéristiques du moteur [198].

Élement	Caractéristique
Alésage × Course (mm × mm)	116 × 150
Langueur de bielle (mm)	261,62
Taux de compression	18,5
Pression maximale dans le cylindre (MPa)	24
Cylindrée unitaire (L)	1,58
Méthode d'injection d'ammoniac	Injection par port
Pression d'injection d'ammoniac (bar)	6

2.3 Modèle numérique et sa validation

L'étude utilise le code CFD Converge^{TM} [156] pour simuler la géométrie complète du moteur avec les parties d'admission et d'échappement, comme le montre la Figure 4.2. Une fois le cycle complet est simulé, les conditions dans la chambre de combustion au point mort bas (PMB) seront utilisées pour lancer les calculs pour des périodes du cycle où les deux soupapes sont fermées (les phases d'admission et d'échappement ne sont pas calculées).

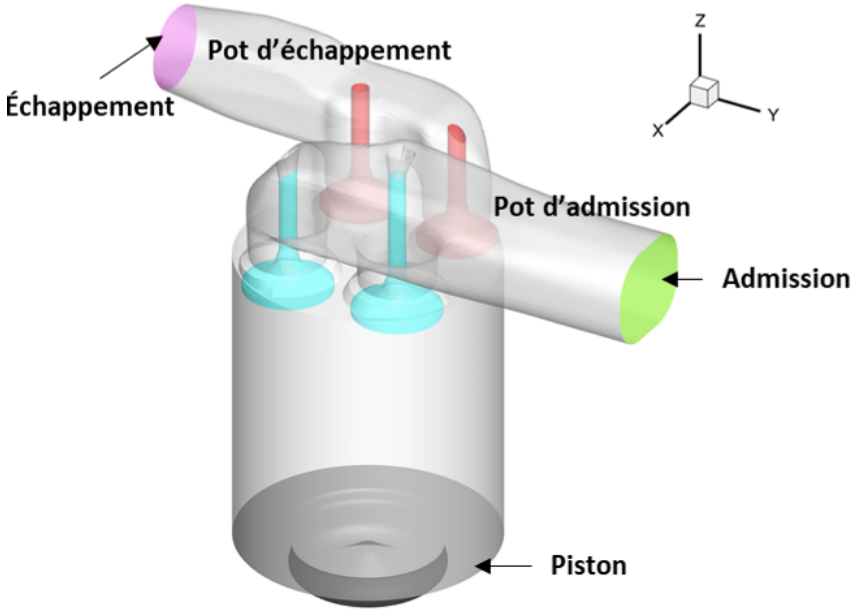


FIGURE 4.2 – Domaine de calcul considéré.

Pour les cycles fermés, une grille cartésienne structurée est utilisé avec une taille de cellule de base de 2 mm et un raffinement adaptatif du maillage (AMR). La Figure 4.3 illustre les différents raffinements de la grille à l'aide de l'outil AMR à -14,3, -3,9 et +10,0 °V après PMH. Un raffinement local de la grille est appliqué au bol du piston, à la culasse, aux parois du cylindre et à la sortie du jet du gazole dans la chambre de combustion pour résoudre avec précision les gradients de vitesse et de température.

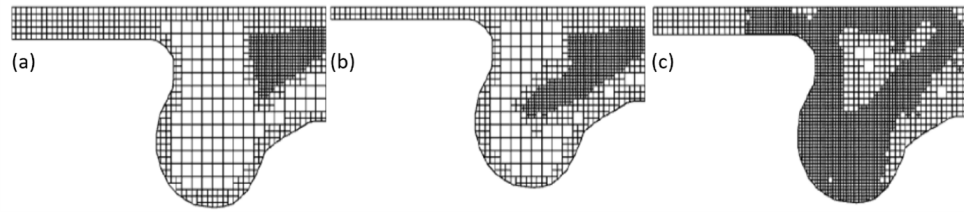


FIGURE 4.3 – Différents raffinements de la grille par Converge^{TM} : (a) -14,3 °V Après PMH, (b) -3,9 °V Après PMH, (c) +10,0 °V Après PMH.

La simulation du combustible primaire injecté est basée sur le *Droplet Discrete Model* (DDM) [76], tandis que le modèle KH-RT est utilisé pour l'atomisation et la pulvérisation du gazole. Pour la modélisation de la combustion, le n-heptane (C_7H_{16}) représente les propriétés physiques du gazole. Les différents sous modèles utilisés sont présentés dans le Tableau 4.3.

TABLE 4.3 – Sous modèles de la simulation.

Phénomènes	Modèles
Injection	KH-RT [199]
Combustion	SAGE [200]
Mécanisme réactionnel	CHEMKIN-II, (5 éléments, 138 espèces, 765 réactions) [201]
Turbulence	RNG $k-\epsilon$ [200]
Collision	No-Time-Counter (NTC) [202]
Émission	Modèle de Zeldovitch (NO_x) [76], modèle de Hyroyasu (suies) [189]

◇ Étude de maillage

Dans un premier temps, une étude de maillage est réalisée. Le régime du moteur pour cette partie de validation est fixé à 1000 tr/min sur la base des résultats disponibles [198]. Comme le montre la Figure 4.4, cette étude est basée sur la convergence de l'erreur relative du travail indiqué et des émissions de NO_x. Cette erreur relative représente l'erreur du modèle numérique par rapport aux données expérimentales. D'après ces résultats, la convergence est atteinte pour un nombre de cellules de 4 E+04, où l'erreur sur les deux grandeurs est supposée acceptable, compte tenu de son effet sur le temps de calcul (8,26% et 6,53% sur le travail indiqué et les NO_x, respectivement).

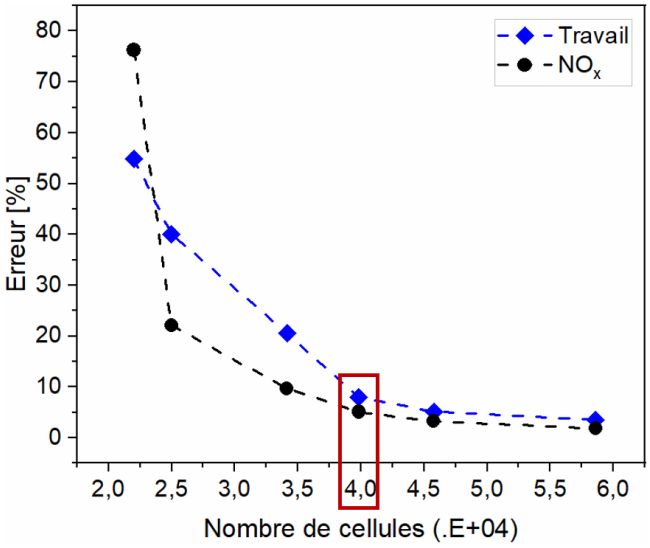


FIGURE 4.4 – Effet du nombre de cellules sur l'erreur relative basée sur le travail du moteur et les émissions de NO_x.

◇ Validation du modèle

Après l'étude du maillage, la validation du schéma numérique a été entreprise. A ce titre, le moteur fonctionne en mode dual fuel à 80% de la pleine charge et à une vitesse de 1000 tr/min. Le carburant primaire (ammoniac) et le carburant pilote (gazole) fournissent respectivement 50% et 50% de l'énergie totale développée. La Figure 4.5-a montre une comparaison entre le profil de

pression de la simulation et celui obtenu expérimentalement [198]. La concordance entre les deux profiles est considérée comme acceptable avec une erreur de 4,28%. La Figure 4.5-b montre une comparaison en termes de rendement thermique, de pression maximale, de durée de combustion (typiquement représentée par CA10-CA90 *) et d'émissions de NO_x. Les faibles décalages observés sont principalement liés aux incertitudes des modèles physico-chimiques utilisés, ce qui valide fortement le modèle CFD global utilisé dans ce travail.

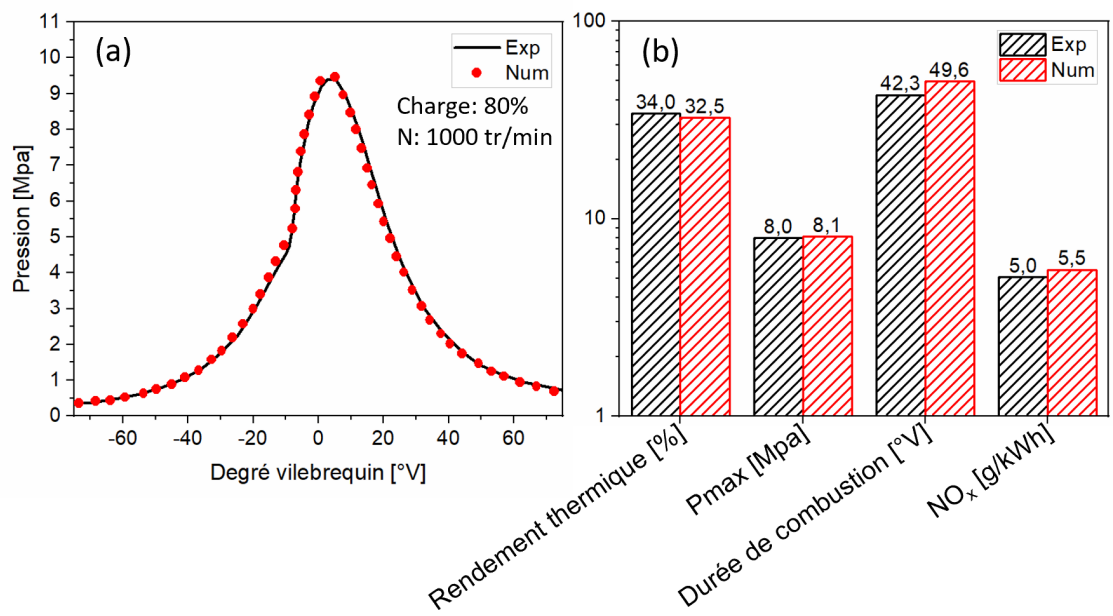


FIGURE 4.5 – Validation du modèle CFD : (a) signal de pression et (b) performances et émissions.

2.4 Description de l'approche et adaptation du bol

L'optimisation multi-objectifs est une discipline essentielle dans le domaine de la recherche. Ce type d'optimisation vise un ensemble de solutions optimales pour des problèmes comportant plusieurs objectifs contradictoires, ce qui implique l'inexistence d'une solution unique qui maximise ou minimise toutes les fonctions objectives simultanément. L'algorithme génétique de tri non dominé II (NSGA-II) [203], utilisé dans cette section, apparaît comme une méthode puissante pour résoudre ces types de problèmes, en exploitant les principes de l'évolution génétique.

Cette étude est basée sur un algorithme d'optimisation parallèle (ON-line). Dans ce type d'optimisation, le modèle reliant les fonctions objectives aux variables de décision est créé en parallèl au processus d'optimisation.
Les fonctions objectives et les variables de décision régissant ce problème d'optimisation sont présentées dans le Tableau 4.4.

∗. La durée en termes d'angles vilebrequin entre 10% et 90% du dégagement de chaleur cumulé pendant le processus de combustion.

TABLE 4.4 – Paramètres de définition du problème d'optimisation.

Fonctions objectives	Variables de décision
• Maximisation du rendement thermique (η_{th}) • Maximisation de l'efficacité de combustion (eff_{comb}) • Minimisation de NO_x	• Forme de Bol • Taux de Swirl (S)

À la fin de cette optimisation, un cas appartenant au front de Pareto est choisi pour tester l'influence de l'enrichissement en hydrogène sur les performances du moteur et les émissions polluantes.
Pour contrôler la forme du bol illustrée dans la Figure 4.6-a, trois paramètres géométriques ont été fixés (P, b et d), comme le montre la Figure 4.6-b. Le Tableau 4.5 résume les plages de variation permises pour les paramètres contrôlant la forme du bol et le taux de Swirl (S).

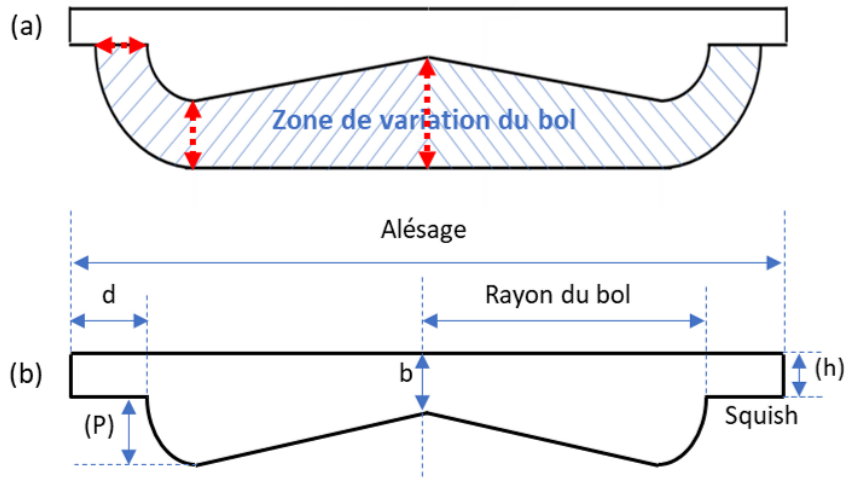


FIGURE 4.6 – (a) Plage de déformation du bol, (b) paramètres de contrôle de déformation.

TABLE 4.5 – Plages de variation des paramètres de contrôle de la géométrie du bol.

P (mm)	b (mm)	d (mm)	Swirl (S)
0-10	2-12	0-10	0,2-8

L'optimiseur est implémenté de façon à assurer le contrôle des trois paramètres (P, b et d), en veillant à ce que les géométries puissent être réalisées avec le même taux de compression, et contrôle le taux de Swirl (S) limité par des conditions mécaniques directement liées à la création de l'aspect tourbillonnaire. L'objectif final est de minimiser le taux de NO_x selon la première fonction objective et de maximiser une fonction de pondération entre le rendement thermique et l'efficacité de la combustion définie par l'équation 4.19, en garantissant un rapport d'énergie

fixe pour tous les cas d'optimisation.

$$\begin{cases} \text{Min} : \text{F}_1, \text{Max} : \text{F}_2 \\ \text{F}_1(\text{g/kWh}) = \text{NO}_x \\ \text{F}_2(\%) = \frac{2}{3}\eta_{th} + \frac{1}{3}eff_{comb} \end{cases} \tag{4.19}$$

Dans ce problème d'optimisation, l'optimiseur est contrôlé par des variables de précision directement liées aux contraintes environnementales représentées par des limites sur les taux autorisés de CO et de HC fixés à 1,5 g/kWh et 0,13 g/kWh, respectivement [198]. Ces limites représentent les taux d'émission relevés lorsque le même moteur fonctionne en mode dual fuel gaz naturel/gazole à pleine charge et à 1100 tr/min.
Selon l'organigramme proposé dans la Figure 4.7, ce problème d'optimisation se déroule principalement en trois étapes essentielles. Ces étapes sont basées sur des techniques et des outils existants et sont décrites comme suit :

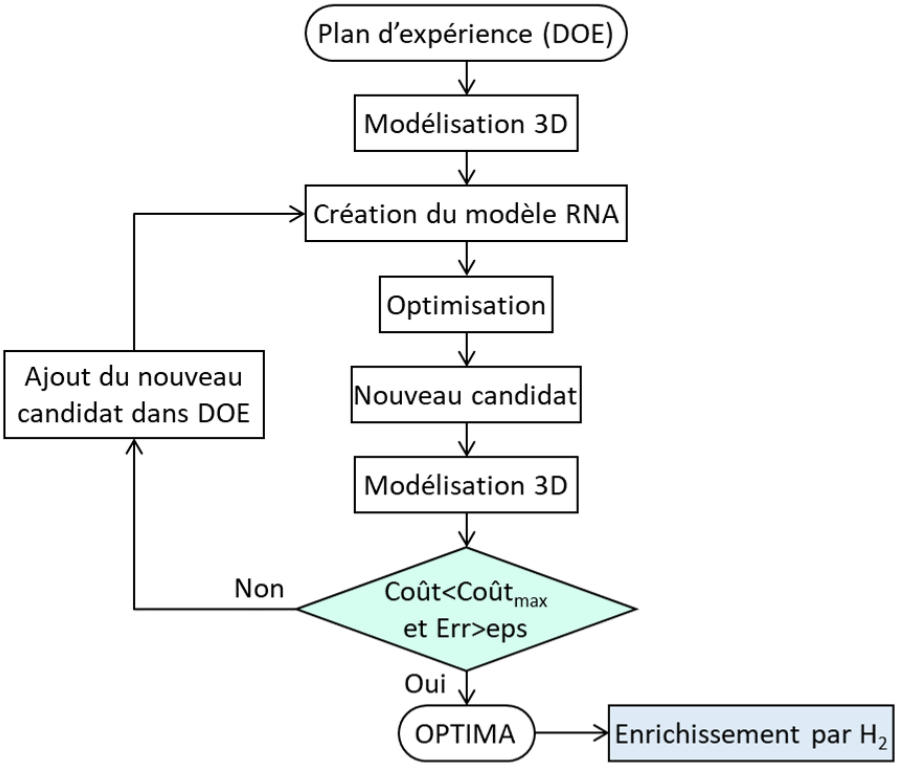


FIGURE 4.7 – Organigramme de l'approche proposée.

• Génération de plan d'expérience

La conception du plan d'expérience initial (DOE) revêt une importance significative dans cette étude. Un échantillonnage par la technique latins hypercubes (LHS) est utilisé [204]. Le principe de cette technique repose sur la subdivision de l'espace des variables d'entrée en n sous-espaces. Le paramètre n représente la taille du plan d'expérience.

• Construction d'un méta-modèle à l'aide d'un réseau de neurones artificiels (RNA)

L'outil de modélisation RNA a prouvé sa capacité à prédire en temps réel les performances et les émissions des moteurs à combustion interne. L'architecture globale de ce modèle est présentée dans la Figure 4.8, contrôlant les variables d'entrée (variables de décision) et de sortie (fonctions objectives).

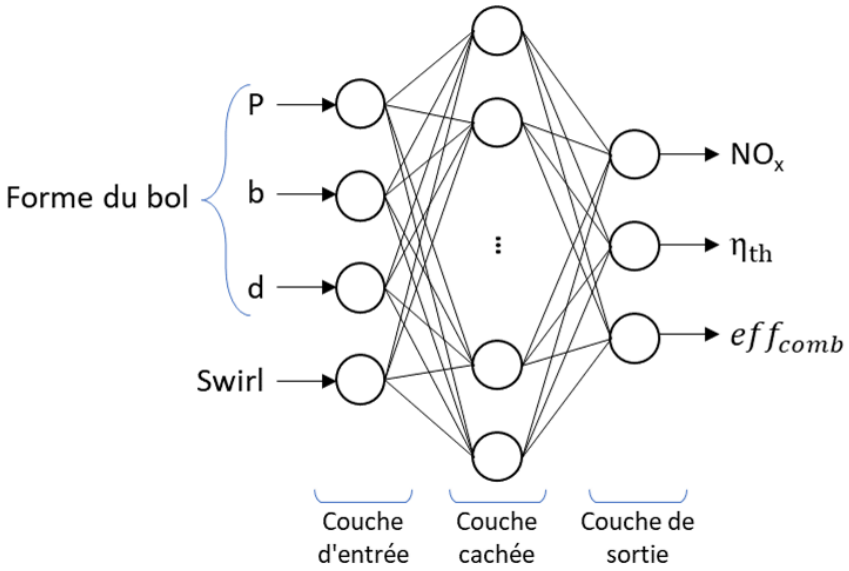


FIGURE 4.8 – Architecture du modèle RNA.

Plus de détail sur l'architecture du modèle RNA ainsi que les différentes étapes pour son développement sont présentés précédemment dans le Chapitre 2.

• Sélection des points de raffinement

L'incorporation de la méthodologie de raffinement du plan d'expérience constitue une phase cruciale pour garantir la précision du modèle. Cette procédure implique la sélection d'un point de raffinement (Pr) par l'application du critère de "distance max-min", comme indiqué dans l'équation 4.20. L'objectif est d'explorer systématiquement des zones inexplorées dans le plan d'expérience. Ensuite, le point de raffinement identifié est évalué à l'aide du méta-modèle construit et de la CFD afin de déterminer l'erreur relative. Si cette erreur (Err) dépasse un seuil critique (eps), le point est reconsidéré dans la création du méta-modèle via une boucle itérative. Dans le cas contraire, ou si le coût ($Coût$) atteint son maximum ($Cost_{max}$), la boucle itérative s'arrête et fournit la solution optimale.

$$Pr = \max_{x_j \in X^*_{Front}} \left[\min_{x_l \in DOE} |x^*_j - x_l| \right] \tag{4.20}$$

Où les vecteurs $x_1, ..., x_n \in$ DOE et $x^*_1, ..., x^*_{PopSize} \in X^*_{Front}$ désignent respectivement les ensembles correspondant à l'espace du plan d'expérience et au front de Pareto actuel.

2.5 Résultats et analyse de la combustion

Dans cette sous-section les principaux résultats de l'approche d'optimisation sur le moteur dual fuel ammoniac/gazole seront présentés, ainsi qu'une analyse des cas résultant en termes de caractéristiques et de déroulement de combustion.
Dans tous les cas étudiés, le moteur présenté dans le Tableau 4.2 fonctionne en mode dual fuel à pleine charge. Le carburant primaire (ammoniac) et le carburant pilote (gazole) fournissent respectivement 85% et 15% de l'énergie totale développée. L'ammoniac est introduit, sous forme gazeuse mélangée avec l'air, par la soupape d'admission, tandis que le gazole est injecté directement dans le cylindre.

2.5.1 Influence des caractéristiques de la chambre de combustion

La Figure 4.9 montre un historique des sept derniers front de Pareto selon la boucle globale d'optimisation présentée par l'organigramme de la Figure 4.7 qui satisfait les deux fonctions objectives (F_1 et F_2) définies par l'équation (4.19).

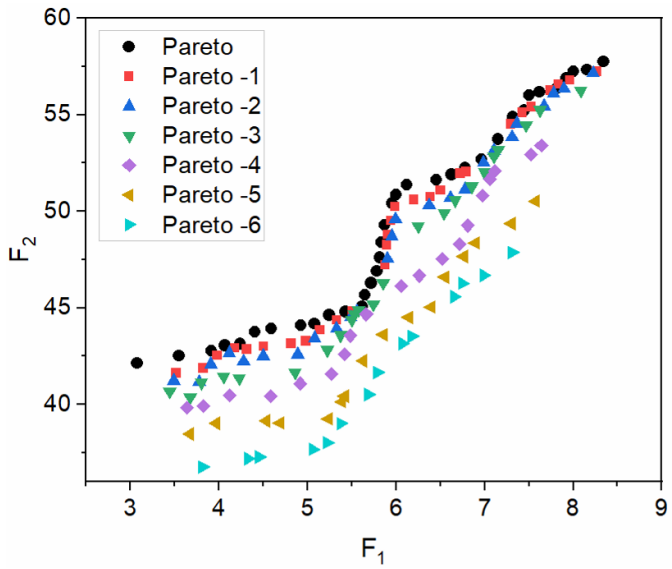


FIGURE 4.9 – Historique des sept derniers fronts de Pareto.

D'après ces résultats, les sept derniers front de Pareto sont proches les uns des autres. Cela implique que les perturbations maximales admissibles par rapport au front final sont relativement importantes, comme le montrent les résultats du Tableau 4.6. En d'autres termes, le dernier front de Pareto résiste aux perturbations des variables de décision (P, b, d et S), ce qui confirme sa robustesse.

TABLE 4.6 – Perturbations maximales des derniers fronts de Pareto par rapport au front final.

Perturbation	Pareto-1	Pareto-2	Pareto-3	Pareto-4	Pareto-5	Pareto-6
Max/Pareto (%)	1,73	2,16	2,94	4,08	4,91	5,57

La Figure 4.10 représente le front de Pareto final résumant tous les cas non dominés selon cette optimisation, où les deux cas limites de ce front sont indiqués ; Cas 1, pour lequel l'optimiseur se concentre sur la maximisation du rendement thermique et l'efficacité de la combustion. Tandis que le Cas 2 représente le cas où l'optimiseur se concentre sur la minimisation des émissions de NO_x.

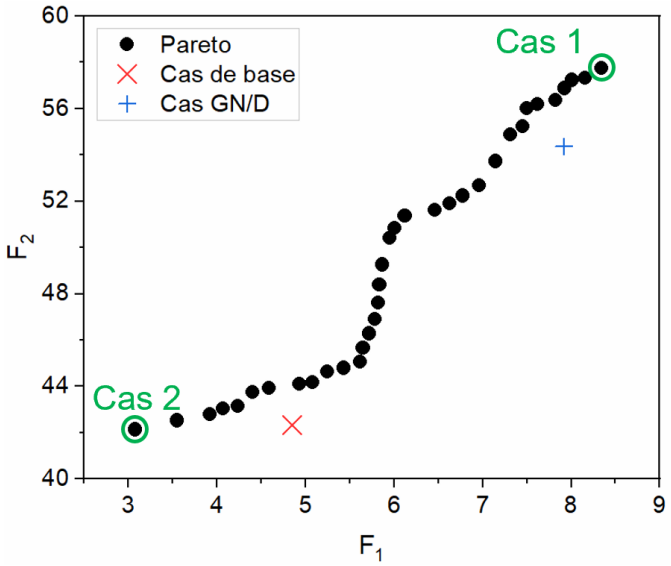


FIGURE 4.10 – Front de Pareto final.

Le Tableau 4.7 compare quatre cas de référence définis comme suit :

• Cas 1 et Cas 2 : Les deux cas extrêmes du front de Pareto, où l'optimiseur favorise une fonction objective par rapport à l'autre.
• Cas de base : Ce cas représente le fonctionnement avec la géométrie originale de la chambre de combustion (sans modification du bol).
• Cas GN/D : Ce cas représente le fonctionnement avec la géométrie de base, en utilisant le gaz naturel (GN) comme combustible primaire au lieu de l'ammoniac. Il convient de noter que le gaz naturel dans ce cas participe à 85% de l'énergie totale, similairement aux autres cas.

TABLE 4.7 – Comparaison des cas de fonctionnement de référence.

Cas	Variables de décision				Émissions et performances		
	P	b	d	S	NO_x (g/kWh)	η_{th} (%)	eff_{comb} (%)
Cas GN/D	-	-	-	4,5	7,92	34,8	93,4
Cas de base	-	-	-	4,5	4,85	29,8	67,3
Cas 1	9,857	11,208	3,319	7,842	8,34	38,7	95,8
Cas 2	8,466	8,317	6,758	2,951	3,08	30,6	65,3

D'après ces résultats, le Cas 1 représente une amélioration du rendement thermique de 30% et de 12% par rapport au cas de base et au cas GN/D, respectivement. Cette amélioration a eu un impact direct sur les niveaux de NO_x dans ce cas (Cas 1), qui ont augmenté de 65% et

5% par rapport au cas de base et au cas GN/D, respectivement. Ces résultats confirment que le choix d'un bon compromis entre les fonctions objectives est nécessaire pour que les performances soient conformes aux besoins.
Pour mieux analyser les résultats et l'effet de la forme du bol et du taux de Swirl sur le développement de la combustion dans le cylindre, le front de flamme est illustré dans la Figure 4.11 pour le cas de base et le Cas 1 en fonction de l'angle vilebrequin. Le taux de combustion (τ_{comb}), défini par l'équation 4.21, est également montré, ainsi que l'amélioration du taux de combustion pour le Cas 1 par rapport au cas de base pour différents angles vilebrequin.

$$\tau_{comb} = \frac{\text{Dégagement de chaleur cumulée}}{\text{Énergie du carburant}} \tag{4.21}$$

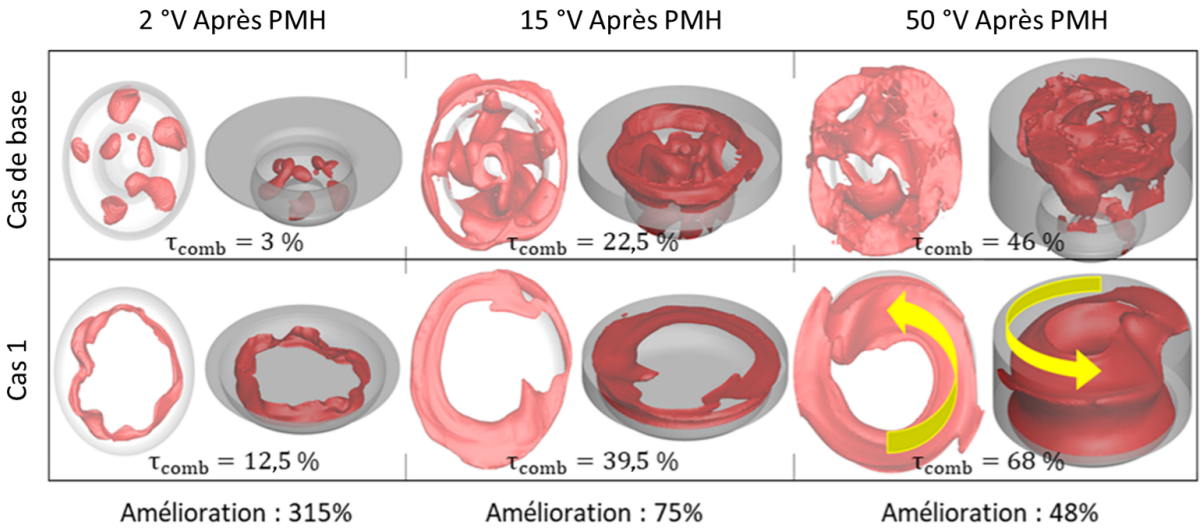


FIGURE 4.11 – Effet de la géométrie et du taux de Swirl sur le développement de la combustion.

D'après ces résultats, le Cas 1 se caractérise par une meilleure préparation du mélange, ce qui s'explique par l'amélioration considérable de la combustion au démarrage. Dans le Cas 1, la progression de la flamme est plus structurée, ce qui signifie que toutes les zones du cylindre sont balayées. Contrairement au cas de base, où la flamme reste piégée dans le bol en raison de sa forme. L'effet du Swirl est remarquable sur le front de flamme en fin de combustion, où la flamme se propage en s'éloignant de l'axe de révolution du cylindre dans le Cas 1.

La Figure 4.12 montre le champ de vitesse perpendiculaire à l'axe de révolution du cylindre (V_w) à 8 °V Avant PMH dans le Cas 1 et le cas de base, donnant une idée de l'intensité du Squish. D'après l'analyse des résultats, le Squish est plus important dans le Cas 1, ce qui implique une propagation plus rapide de la flamme. Le Squish est dirigé vers les parois latérales dans le Cas 1, ce qui explique la propagation uniforme de la flamme de combustion vers l'extérieur de l'axe de révolution.

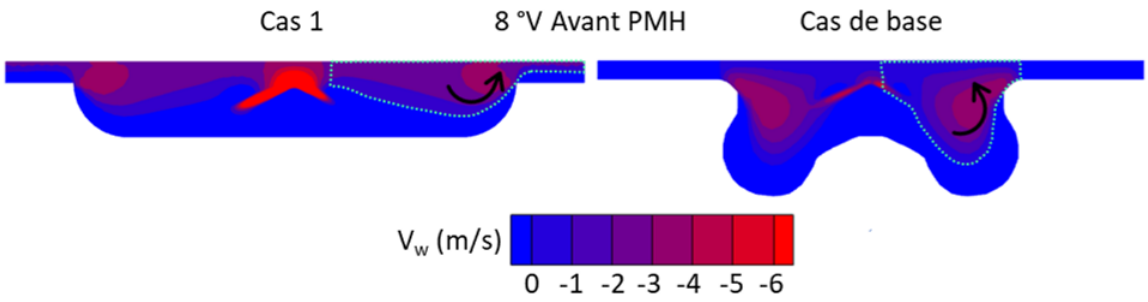


FIGURE 4.12 – Effet de la géométrie sur la vitesse perpendiculaire à l'axe de révolution du cylindre (V_w).

D'après les résultats obtenus, la forme du bol affecte le Squish dans le cylindre, ce qui améliore la combustion de l'ammoniac. Dans ce cas, l'optimiseur cherche à trouver une combinaison optimale entre le Swirl et le Squish via la forme du bol pour une meilleure efficacité de la combustion en poussant la flamme à l'extérieur de l'injecteur vers les parois latérales et en ramenant la quantité d'ammoniac imbrûlé à l'intérieur du bol.

Les résultats présentés dans la Figure 4.13 confirment l'aspect de décarbonation des moteurs à combustion interne fonctionnant en mode dual fuel via l'utilisation de l'ammoniac comme carburant primaire avec des taux de substitution élevés. Une réduction de 76% et 74% est captée en termes de CO et de CO_2, respectivement, pour le cas de base par rapport au cas GN/D. Tous les cas de fonctionnement présentent des taux de CO et de CO_2 largement inférieures par rapport aux cas GN/D vu que le gaz d'ammoniac ne contient pas la molécule de carbone dans ça composition contrairement au gaz naturel. Le Cas 1 présente une légère augmentations de ces émissions par rapport au cas de base et au Cas 2 à cause de son taux de Swirl supérieure par rapport aux autres ce qui a amélioré la combustion de la petite quantité du gazole injectée produisant plus de CO et de CO_2 avec des petites pourcentage vu la faible quantité du gazole brûlée.

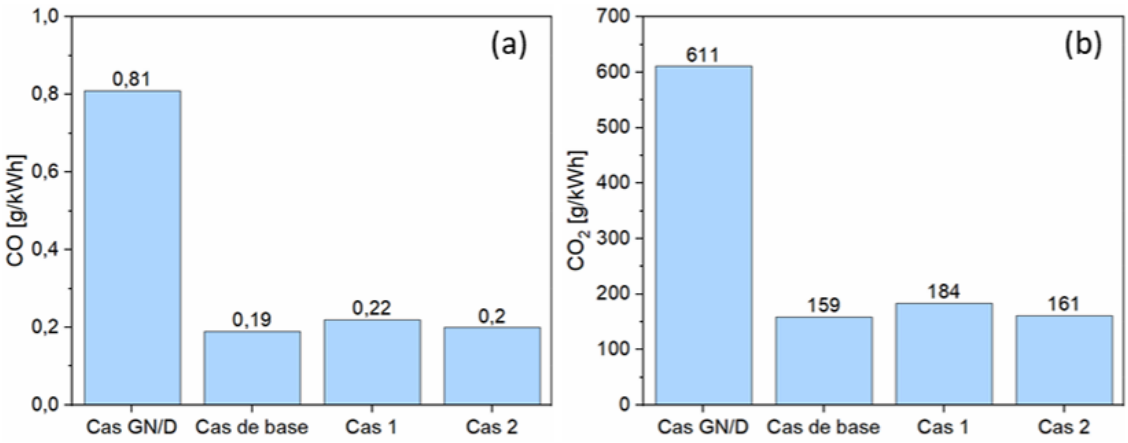


FIGURE 4.13 – Variations de : (a) CO, (b) CO_2 pour les cas de fonctionnement de référence.

2.5.2 Validation de la configuration optimale en termes de charge moteur

Pour vérifier l'efficacité du cas optimale en termes de combinaison entre la forme du bol et le taux de Swirl dans différentes conditions de charge moteur, des simulations ont été réalisées pour d'autres charges du moteur en l'occurrence celles du 20, 40, 60, 80% de la pleine charge. Les résultats obtenus sont présentés sur la Figure 4.14 qui présente une comparaison des rendements thermiques induits du cas de fonctionnement avec les conditions de base (forme du bol et taux de Swirl) et celui du cas optimal (Cas 1). Il est remarquable que la variation du rendement thermique pour les deux cas (cas de base et Cas 1) suit la même tendance en fonction de la charge. La diminution de la charge implique en général une diminution du rendement thermique à cause de la mauvaise gestion du carburant gazeux à faible charge pour le mode de combustion dual fuel. La configuration optimale présente une amélioration du rendement thermique pour toute la plage de charge, notamment aux plus faibles charges, pour lesquelles elle atteint plus de 47% à 20% de la pleine charge. Cette amélioration est justifiée principalement par l'objectif de cette étude qui vise l'élaboration d'un moteur dédié au fonctionnement dual fuel utilisant un gaz primaire de faible réactivité, notamment l'ammoniac.

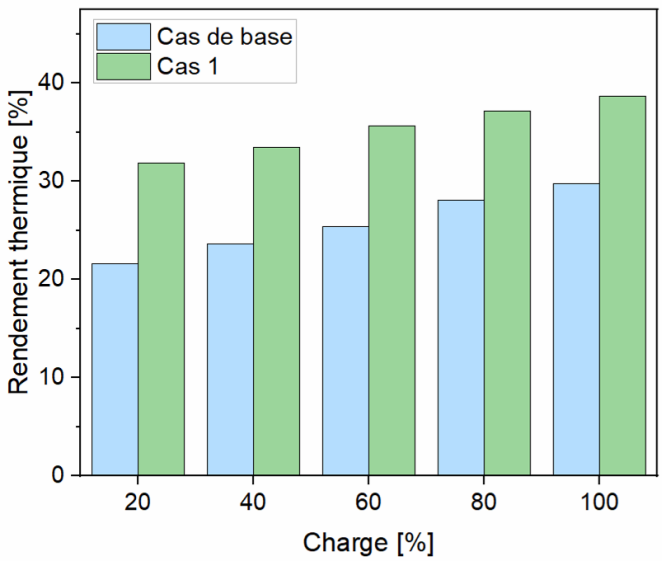


FIGURE 4.14 – Variation du rendement thermique pour les différentes charges.

Pour une validation plus large, les émissions polluantes ont été comparées entre les deux cas de fonctionnement. Les Figures 4.15-a, 4.15-b, 4.15-c représentent une comparaison en termes de NO_x, CO, et CO_2, respectivement. D'après les résultats de la Figure 4.15-a les émissions de NO_x augmente en fonction de l'augmentation de la charge pour les deux cas de fonctionnement à cause de l'amélioration du rendement du moteur ce qui implique des températures plus importantes favorisant la formation des NO_x. C'est pour la même raison Cas 1 présente un taux de NO_x supérieur pour toute la plage de charges à cause de la nature du gaz primaire (ammoniac) utilisé comme carburant. Selon les résultats présentés dans les Figures 4.15-b et 4.15-c, le niveau de CO et de CO_2 est légèrement supérieur dans le Cas 1 à cause de son taux de Swirl supérieure par rapport à celui du cas de base, ce qui améliore la combustion de la petite quantité du gazole

introduite comme carburant pilote impliquant des niveaux de CO et CO_2 légèrement supérieures.

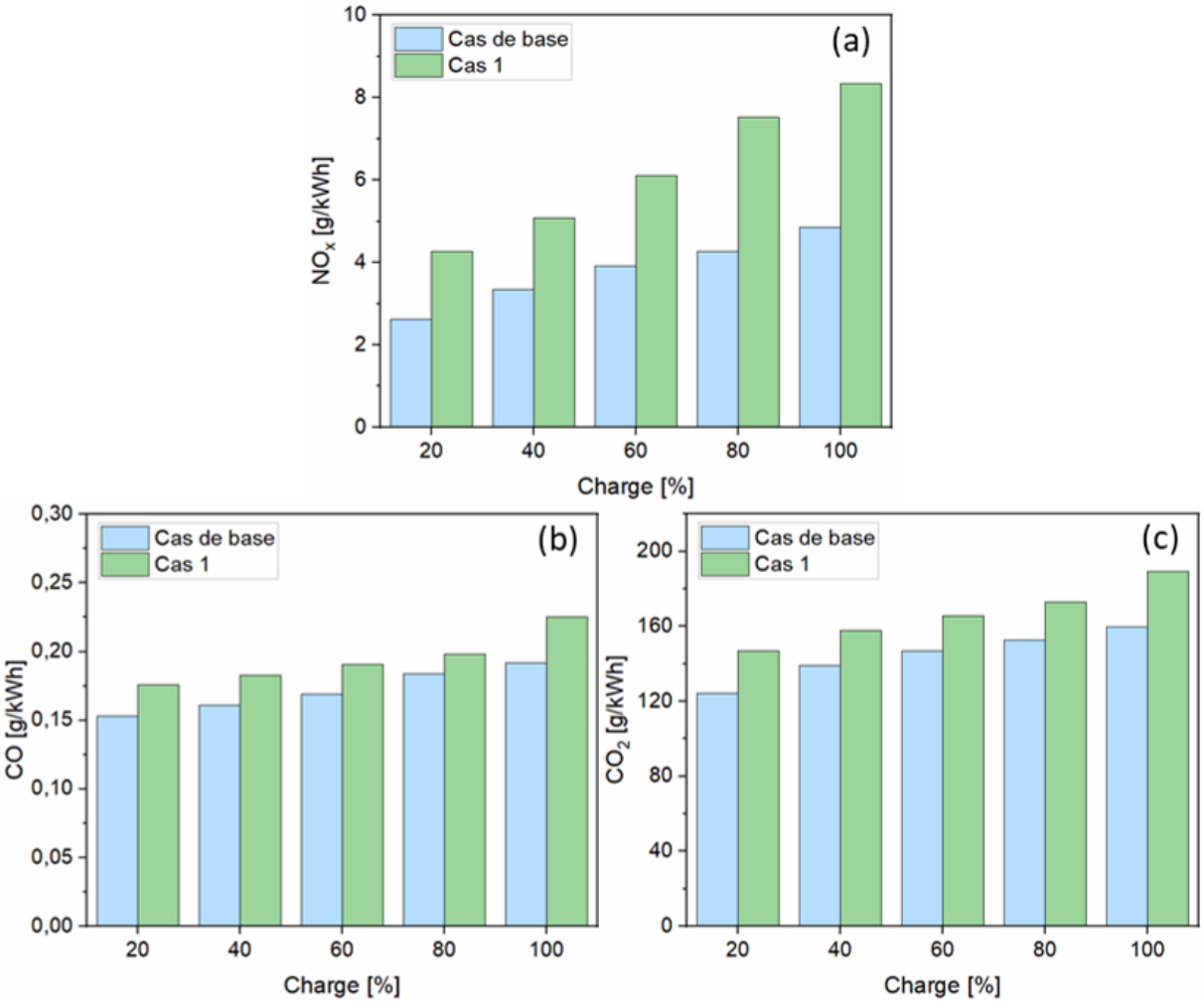


FIGURE 4.15 – Variation de : (a) NO_x, (b) CO, (c) CO_2 pour les différentes charges.

2.5.3 Effet de l'ajout d'hydrogène

L'objectif principal de cette partie est d'étudier l'effet de l'enrichissement de l'ammoniac en hydrogène sur l'amélioration de la qualité de la combustion. Dans cette approche, la compensation de la réactivité de l'ammoniac par celle de l'hydrogène est visée.
À cet effet, le Cas 2 est choisi pour tester cet enrichissement du fait que son rendement est faible, ce qui justifie son niveau de NO_x relativement faible par rapport aux autres cas de fonctionnement.
Différentes fractions d'enrichissement de l'hydrogène ont été testées, à savoir ; 5%, 10% et 15%. Cela implique un taux de contribution énergétique propre à chaque combustible par rapport à l'énergie globale développée par le moteur tel qu'il est montré dans le Tableau 4.8.

TABLE 4.8 – Taux de contribution énergétique des combustibles

Enrichissement (%)	E_{sh} (gazole) %	E_{sh} (NH_3) %	E_{sh} (H_2) %
0	15	85	0
5		80,75	4,25
10		76,5	8,5
15		72,25	12,75

La Figure 4.16-a illustre le bilan énergétique global du moteur exprimé par le travail indiqué, les pertes à l'échappement, les transferts de chaleur pariétaux et la combustion incomplète pour les différents cas étudiés. La Figure 4.16-b illustre l'influence de l'enrichissement en hydrogène sur les émissions de NO_x.

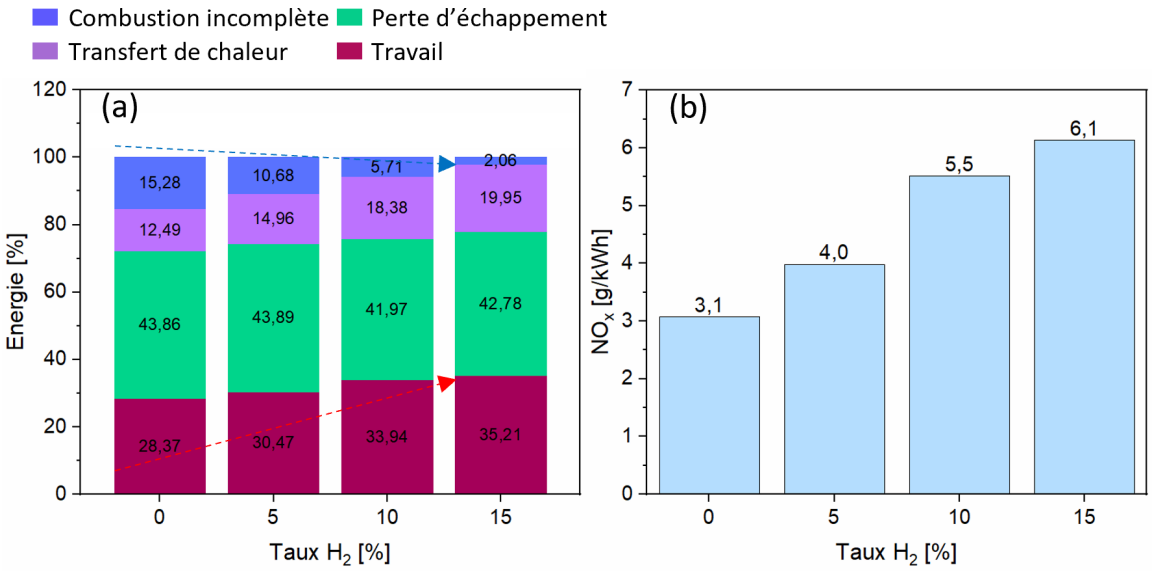


FIGURE 4.16 – Effet de l'enrichissement en hydrogène sur : (a) la distribution de l'énergie, (b) les émissions de NO_x.

D'après la Figure 4.16-b, l'augmentation de la teneur en hydrogène s'accompagne d'une augmentation du taux de NO_x en raison de l'amélioration de la combustion et des températures plus élevées.

Selon les résultats obtenus, l'ajout d'hydrogène offre des avantages majeurs en termes d'efficacité de la combustion en raison de l'augmentation de la pression (Figure 4.17-a) et de la température (Figure 4.17-b), ce qui s'explique par la diminution de l'énergie de combustion incomplète, comme le montre la Figure 4.16-a. Ces conditions affectent directement et positivement le rendement thermique, ce qui cause une augmentation du travail indiqué d'environ 25% entre le cas avec un enrichissement en hydrogène de 15% et le cas sans enrichissement.

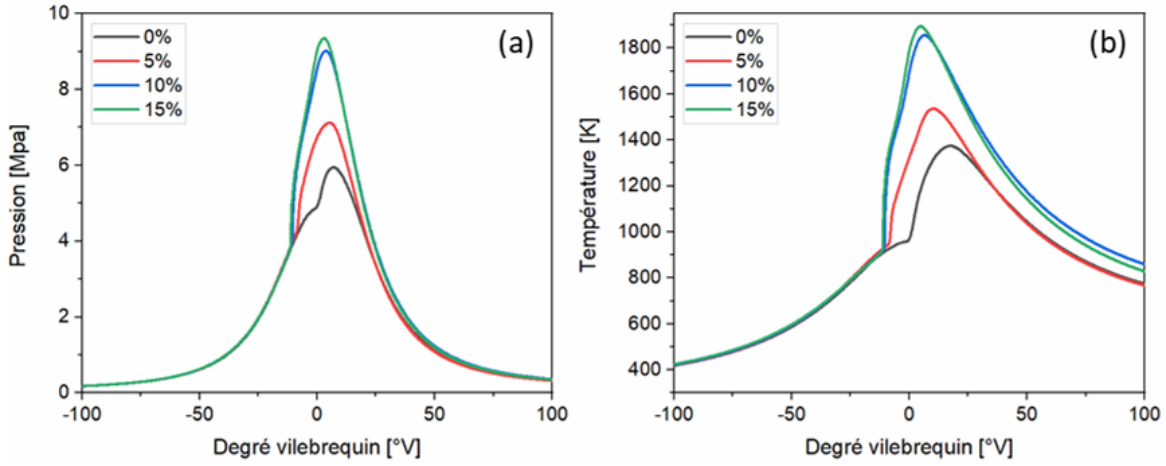


FIGURE 4.17 – Effet de l'enrichissement en hydrogène sur : (a) la pression, (b) la température dans le cylindre.

La Figure 4.18 montre le front de flamme pour le Cas 2 original (sans ajout d'hydrogène) et le Cas 2 avec un enrichissement en hydrogène de 15% (Cas 2/15% H_2) en fonction de l'angle vilebrequin.

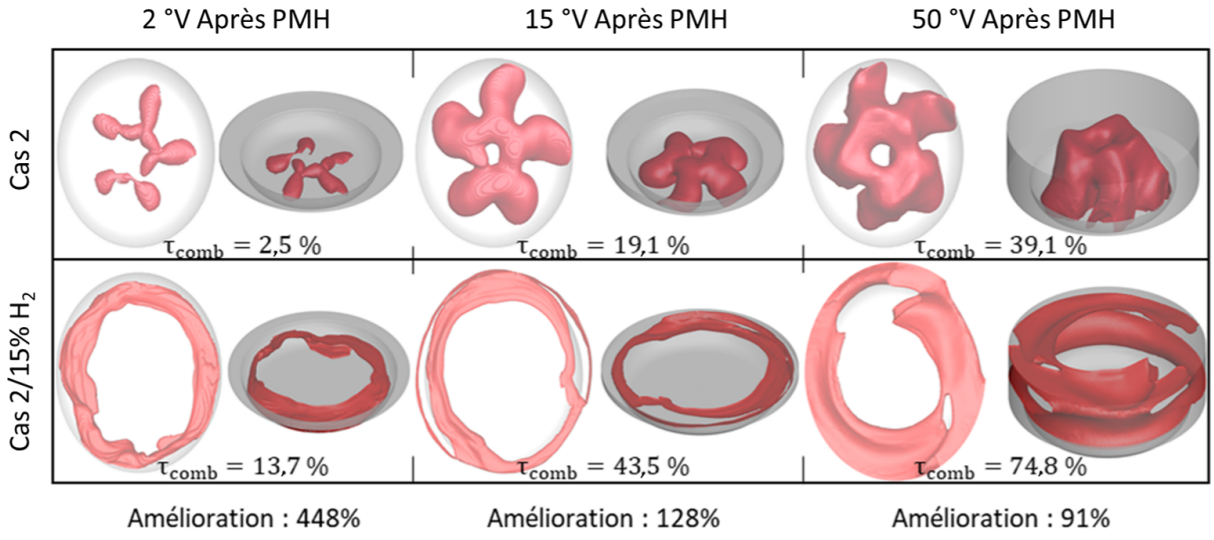


FIGURE 4.18 – Effet de l'enrichissement en hydrogène sur le développement de la combustion.

Sur la base de ces résultats, la vitesse de propagation de la flamme montre une augmentation au fur et à mesure que le pourcentage d'enrichissement en hydrogène augmente. Cette observation justifie l'évolution du front de flamme en fonction de l'angle vilebrequin dans la Figure 4.18. L'introduction d'hydrogène rend le mélange moins résistant à l'allumage, ce qui s'explique par la vitesse de propagation de la flamme distincte associée à l'hydrogène, comme le montre le Tableau 4.9. Ceci suggère qu'un mélange NH_3-H_2 est marqué par une vitesse de propagation de flamme relativement élevée.

TABLE 4.9 – Propriétés des carburants.

Carburant	Vitesse de flamme (m/s)	Énergie d'allumage (mJ)
Gazole	0,80	0,23
Essence	0,41	1,35
Ammoniac	0,67	680
Hydrogène	3,25	0,016

Le Tableau 4.10 présente les caractéristiques du Cas 2 avec un enrichissement en hydrogène de 15% (Cas 2/15% H_2). Une comparaison des résultats du Tableau 4.10 avec ceux du Tableau 4.7 révèle que le Cas 2/15% H_2 offre une amélioration du rendement thermique de 32% et 13% par rapport au cas de base et au cas GN/D, respectivement. Cette amélioration du rendement thermique s'accompagne toutefois d'une augmentation des NO_x d'environ 26% par rapport au cas de base et d'une réduction de plus de 22% par rapport au cas GN/D.
Les résultats montrent qu'avec l'enrichissement en hydrogène, le compromis entre l'amélioration des performances et de l'efficacité de la combustion et la réduction des NO_x est atteint.

TABLE 4.10 – Performances et émissions pour le Cas 2 avec enrichissement en hydrogène.

Cas	NO_x (g/kWh)	η_{th} (%)	eff_{comb} (%)
Cas 2/15% H_2	6,13	39,2	97,7

3 Moteur dual fuel méthanol/gazole pour véhicule poids lourd

Dans le contexte mondial de la transition énergétique et de la nécessité de réduire les émissions polluantes, la recherche de carburants alternatifs joue un rôle crucial dans la quête de solutions durables, notamment dans le secteur des transports. Parmi les alternatives en plein essor, le méthanol semble être un candidat prometteur en raison de ses caractéristiques polyvalentes, notamment son plus faible rapport C/H par rapport aux autres carburants existants. Cette section se focalise sur l'utilisation du méthanol en tant que carburant primaire pour un moteur diesel fonctionnant en mode dual fuel méthanol/gazole, pour l'exploration des opportunités offertes par cette solution innovante.

3.1 Contexte général

Aujourd'hui, l'identification des problèmes majeurs liés à un moteur réside dans la nécessité de satisfaire les exigences de performance du moteur avec les objectifs environnementaux. Le moteur dual fuel méthanol/gazole (DFMG) offre une perspective intéressante, mais son application efficace et durable nécessite une compréhension approfondie des défis techniques et des opportunités qu'il présente.

Certaines études ont exploré les effets de l'injection simultanée du gazole et du méthanol. L'étude de Lui et al. [205] sur un moteur diesel, équipé d'une rampe commune, en mode dual

fuel méthanol/gazole (DFMG) a enregistré une réduction des émissions de NO_x et de suies. En revanche, ils ont signalé que le niveau de suies diminue et les NO_x augmentent en fonction de la pression d'injection du gazole. Par rapport au mode diesel conventionnel, le mode DFMG génère moins de NO_x et de CO_2, mais avec plus de HC, de CO et de NO_2.

D'autres études ont examiné l'influence de la substitution du méthanol sur la combustion et les émissions. Li et al. [206] ont mis en œuvre trois stratégies d'injection pour un mode dual fuel à injection directe : G/M, M/G et M/G/M. Cette analyse a montré que le mode M/G/M, avec injection de méthanol avant et après le gazole, est le cas optimal, offrant une consommation de carburant réduite à faible charge et une résistance au cliquetis à forte charge.
Dans ce contexte, plusieurs études ont été portées sur l'injection directe du méthanol [207], soulignant son potentiel en mode non prémélangé. Dong et al. [208] ont étudié l'injection directe à haute pression du méthanol dans un moteur dual fuel. Les résultats ont montré l'amélioration de la qualité de la combustion, la fiabilité de l'allumage et la réduction des émissions de CO et de HC, soulignant l'amélioration du rendement thermique en fonction de la charge et du taux de substitution du méthanol. L'étude de Ning et al. [209] a étudié l'impact du temps d'injection du méthanol (TIM) et du pourcentage de substitution du méthanol (PSM) à pleine charge. Les résultats obtenus ont affirmé que l'ajout du méthanol avec un TIM retardé améliorent le rendement thermique, mais avec l'augmentation des variations cycliques de la pression moyenne indiquée et l'intensité du cliquetis en fonction du PSM, soulignant les compromis à satisfaire entre le rendement et les émissions dans le moteur dual fuel méthanol/gazole.

Aussi, un aspect important concernant les moteurs diesel fonctionnant en mode dual avec un taux élevé de substitution du méthanol est investigué dans la littérature. Wei al. [210] ont analysé les caractéristiques de la combustion et des émissions polluantes d'un moteur dual fuel avec un taux de substitution du méthanol (E_{sh_M}) élevé. Les résultats ont indiqué que l'augmentation de la pression dans le cylindre à des charges élevées, mène à la réduction du délai d'allumage et des émissions de NO_x et de suies. Afin de remédier aux inefficacités à faible charge et à la combustion cliquetante à forte charge, Yin et al. [211] ont étudié un moteur dual fuel à injection directe alimenté par du méthanol et du gazole. Les résultats indiquent que le moteur atteint un rendement thermique optimal de 43,4% avec un taux de substitution énergétique du méthanol de 52,4%, malgré des limitations à forte charge. Ce mode présente un potentiel d'optimisation global, en améliorant la stabilité de la combustion et en réduisant les émissions à charges moyennes et élevées.

En analysant les travaux de la littérature, le problème majeur limitant les moteurs DFMG se manifeste dans le taux de substitution du méthanol, qui reste relativement faible. Ceci est principalement dû au problème d'évaporation de l'alcool (chaleur latente d'évaporation élevée). Pour réduire le niveau des émissions, il est jugé important d'optimiser la stratégie d'injection à la fois pour le carburant primaire (méthanol) et le carburant pilote (gazole).

Dans cette section, une étude numérique de la stratégie d'injection de carburant est mise en œuvre pour un gros moteur DFMG équipé d'un système d'injection directe pour le carburant primaire et le carburant pilote. Différents cas ont été simulés où il est exploré différents instants d'injection pour le méthanol (M) et le gazole (G) avec une participation énergétique maximale du méthanol de 70%. Les résultats ont été comparés pour déterminer les cas favorables offrant des niveaux minimaux de NO_x et de CO avec des performances acceptables.

3.2 Approche numérique adoptée

Afin de valider l'outil numérique utilisé dans cette étude (Converge^{TM}), des résultats expérimentaux d'une étude de la littérature sont utilisés.

3.2.1 Cas référence : données expérimentales

Dans cette section, un gros moteur à six cylindres [212] est utilisé comme référence pour valider le modèle numérique adopté. Dans ce travail, Xu et al. [212] ont adapté un moteur diesel au fonctionnement dual fuel méthanol/gazole. Le Tableau 4.11 présente les spécifications et les principales caractéristiques de l'injection directe des deux carburants (gazole et méthanol).

TABLE 4.11 – Caractéristiques du moteur [212].

Type de moteur	Moteur six cylindres en ligne pour poids lourd
Cylindrée unitaire (L)	1,19
Alésage × Course (mm)	108 × 130
Taux de compression	18 :1
Squish (mm)	1,85
Swirl	1,15
Fermeture soupape admission (°V Avant PMH)	-124,5
Ouverture soupape admission (°V Avant PMH)	79,6
Nombre de buse d'injecteurs gazole	6
Diamètre de buse d'injection gazole (mm)	0,235
Nombre de buse d'injection méthanol	6
Diamètre de buse d'injection méthanol (mm)	0,2

3.2.2 Validation du modèle numérique

Dans cette étude le solveur Converge^{TM} [156] est utilisé. Tous les modèles et les sous-modèles utilisés pour le traitement de maillage, la mécanique des fluides, la turbulence, la combustion et la formation des émissions sont présentés précédemment dans ce chapitre. Les injections du gazole (C_7H_{16}) et du méthanol (CH_3OH) ont été assurées via une configuration coaxiale comme le montre la Figure 4.19.

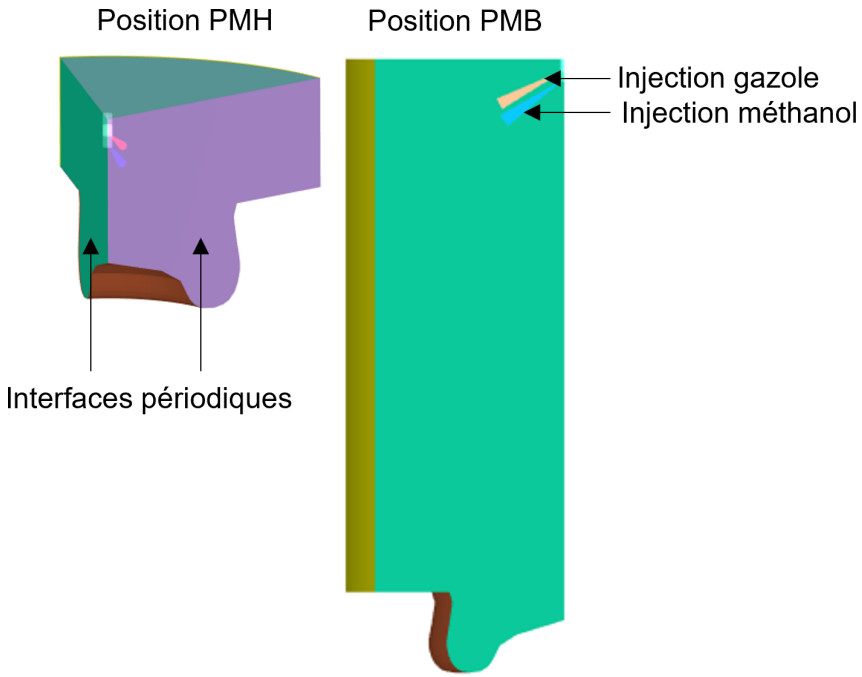


FIGURE 4.19 – Configuration géométrique de simulation 3D.

Dans le cadre de la validation, un cas de fonctionnement à 1100 tr/min est pris en considération. Le moteur fonctionne à 60% de la pleine charge en mode DFMG (50% gazole et 50% méthanol en termes d'apport énergétique).
La validation de la variation de pression en fonction de l'angle vilebrequin, pour le modèle 3D CFD est présentée dans la Figure 4.20-a, mettant en évidence la bonne concordance entre les résultats de la simulation et ceux des expérimentations, avec une erreur relative moyenne de 4,68%. La Figure 4.20-b illustre la validation du modèle CFD concernant les émissions (NO_x, CO, CO_2). Les erreurs relatives pour les émissions de NO_x, de CO et de CO_2 sont respectivement de 1,4%, 8,28% et 7,24%. L'accord entre les valeurs simulées et mesurées est considéré comme acceptable et suffisant pour atteindre l'objectif final de compréhension des aspects clés du développement de la combustion et de la production des émissions. Les faibles écarts notés sont dûs principalement des incertitudes dans les sous-modèles physico-chimiques utilisés (combustion, turbulence, émissions, transfert de chaleur, etc.).

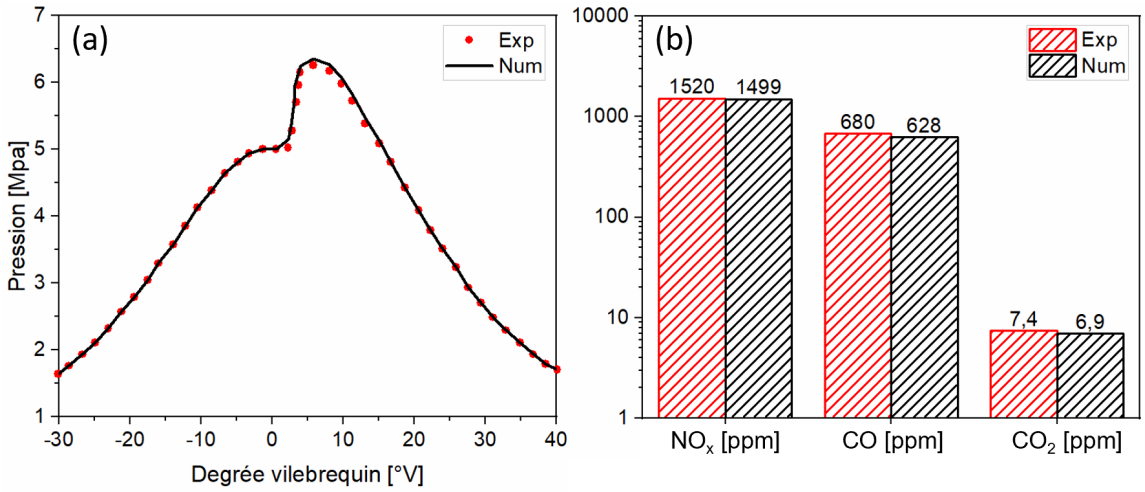


FIGURE 4.20 – Validation du modèle numérique en termes de : (a) pression cylindre, (b) émissions.

3.3 Adaptation des injections pilote et primaire

Afin d'améliorer les performances du moteur tout en minimisant les émissions polluantes, l'exploration de la loi d'injection pour le carburant pilote (gazole) et le carburant primaire (méthanol) est considérée comme une voie prometteuse en raison de son impact direct sur le déroulement de la combustion dans le cylindre. Le cas de fonctionnement à pleine charge avec une vitesse de rotation de 1100 tr/min est pris comme cas d'étude. L'énergie partagée (E_{sh}) par les deux carburants reste fixe pour tous les essais, avec $E_{sh_M} = 70\%$ (équation 4.22).

$$E_{sh_M} = \frac{m_M PCI_M}{m_M PCI_M + m_G PCI_G} \tag{4.22}$$

Avec m_M et m_G sont les masses introduites dans le cylindre pour le méthanol et le gazole, respectivement. PCI_M et PCI_G sont les pouvoirs calorifiques inférieurs du méthanol et du gazole, respectivement.

Cette campagne de simulation numérique vise l'exploration de différents instants d'injection pour le gazole et le méthanol, ainsi que la distribution de chaque carburant à différents pourcentages et instants d'injection. Le Tableau 4.12 résume les différents cas simulés en fonction de leurs caractéristiques d'injection (l'instant d'injection T_{inj} est en °V Avant PMH).

TABLE 4.12 – Paramètres d'injection (°V Avant PMH) considérés pour les simulations numériques.

Carburant		**Méthanol**		**Gazole**		**Gazole**		**Méthanol**	
Cas		E_{sh}	T_{inj}	E_{sh}	T_{inj}	E_{sh}	T_{inj}	E_{sh}	T_{inj}
Cas de référence 1		0,7	175	0,3	8	-			
Test 1	M-D	0,7	175	0,3	10	-		-	
					15				
			150		8				
					10				
					15				
			120		8				
					10				
					15				
			90		8				
Test 2	M-D-M	0,525	150	0,3	8			0,175	7
		0,455						0,245	
		0,525	120		15			0,175	10
		0,455						0,245	
		0,525			8			0,175	7
		0,35	90		8			0,35	7
Test 3	M-D-D	0,7	120	0,18	15	0,12	2	-	
					20		6		
Test 4	M-D-D-M	0,455	120	0,18	15	0,12	3	0,245	0
		0,21	150					0,49	

Dans le cadre de cette investigation, plusieurs simulations ont été réalisés afin d'étudier les différentes configurations possibles pour l'injection des deux carburants (gazole et méthanol) en mode dual fuel.

• Test 1 : Effet combinatoire de l'instant d'injection du méthanol avec celui du gazole, avec une énergie partagée constante pour chaque carburant.
• Test 2 : Effet de l'injection fractionnée du méthanol ainsi que la combinaison entre la première/seconde injection du méthanol et l'injection du gazole, en termes d'instant d'injection et d'énergie partagée.
• Test 3 : Effet de l'injection fractionnée du gazole dans deux cas en termes d'instant d'injection et d'énergie partagée pour chaque injection, avec des propriétés fixes pour l'injection du méthanol.
• Test 4 : Effet de l'injection fractionnée du méthanol et du gazole selon deux cas de figure en termes d'instant et d'énergie partagés pour chaque injection.

Pour garantir une analyse correcte et démontrer l'impact de l'utilisation du méthanol comme

combustible primaire dans un mode de combustion dual fuel, il est important de procéder à une comparaison avec d'autres cas de référence. Le premier cas de référence est défini dans le Tableau 4.12 comme étant le cas de de fonctionnement en mode DFMG avec des injections de carburant selon la configuration de base, tandis que les deux autres cas de référence (des cas simulés numériquement) sont définis dans le Tableau 4.13, représentant des cas de fonctionnement en mode dual fuel utilisant des carburants conventionnels comme carburant primaire (gaz naturel, biogaz). Ceci met en évidence l'importance de l'utilisation du méthanol pour minimiser les émissions polluantes. En notant que l'énergie partagée par le combustible primaire (méthanol) est de 70% même pour les cas de référence pour lesquels, le gazole est utilisé comme carburant pilote.

TABLE 4.13 – Caractéristiques des cas de référence.

Cas de référence	Carburant primaire	Injection pilote (°V Avant PMH)	Injection primaire
2	Gaz naturel	8	Indirecte
3	biogaz (60% CH_4+40% CO_2)		

3.4 Résultats et discussion

Les résultats numériques concernant les effets des stratégies d'injection pilote et primaire de carburant sur les caractéristiques de combustion dans un moteur DFMG sont présentés et discutés dans cette sous-section. Après la simulation des cas présentés dans le Tableau 4.12, ainsi que les deux cas de référence (Tableau 4.13), les performances et les émissions du moteur ont été déterminées.

La Figure 4.21 présente une comparaison de tous les cas considérés en termes de rendement thermique indiqué (RTI : η_{th}), de NO_x et de CO. Les résultats confirment qu'une amélioration du η_{th} peut être, dans certains cas, accompagnée d'une augmentation des émissions de NO_x et de CO, principalement en raison de l'augmentation de la température dans la chambre de combustion. En outre, une configuration d'injection appropriée peut remédier à ce problème en améliorant le rendement sans affecter les émissions polluantes.

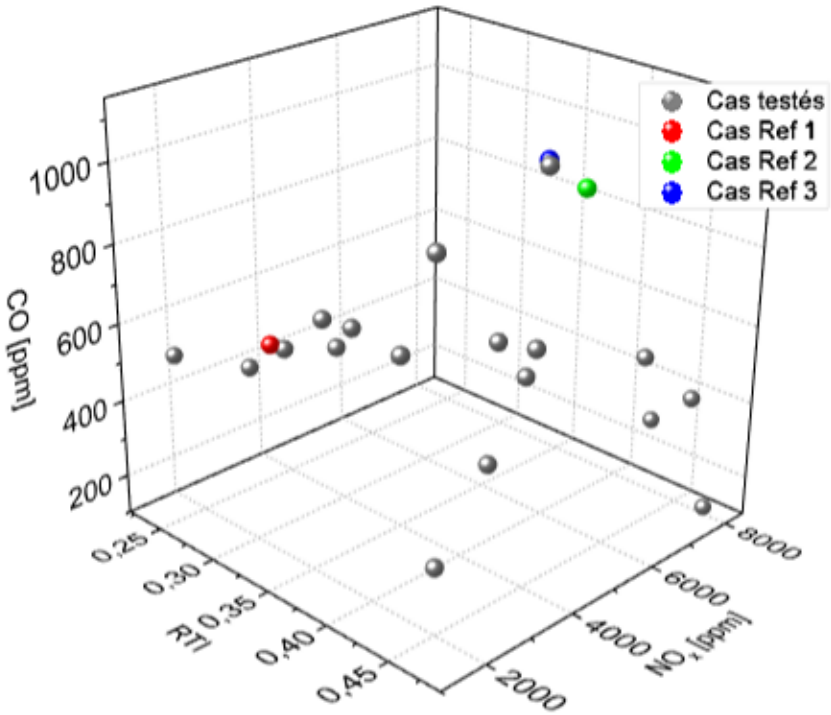


FIGURE 4.21 – Comparaison des cas selon η_{th}, NO_x, et CO.

Afin de mieux analyser l'influence des lois d'injection sur le comportement du moteur, l'évolution de chaque émission en fonction du η_{th} est présentée dans les Figures 4.22-a et 4.22-b pour les émissions de NO_x et de CO, respectivement.

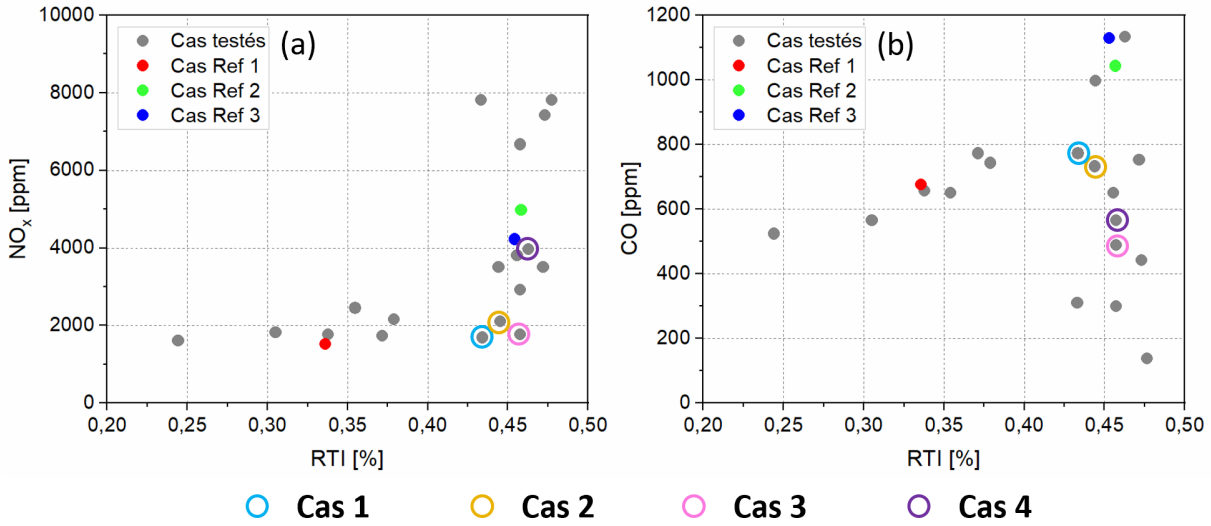


FIGURE 4.22 – Variations de : (a) NO_x, (b) CO en fonction du η_{th}.

Les résultats obtenus confirment l'importance de la stratégie d'injection selon le compromis entre le rendement thermique d'une part et les émissions polluantes (NO_x et CO) d'autre part. Les cas optimaux selectionnés parmi ceux qui ont été testés sont ceux qui se caractérisent par un rendement proche de celui du cas de référence 2 (dual fuel gaz naturel/gazole), afin de réduire

autant que possible les émissions de NO_x et de CO. Le Tableau 4.14 présente les performances des cas sélectionnés, qui sont illustrés dans la Figure 4.22, ainsi que leur stratégies d'injection.

TABLE 4.14 – Cas optimaux et leurs caractéristiques.

Cas	Caractéristiques			Stratégies d'injection							
	Cas i/Cas de Ref 2 (%)			Méthanol		Gazole		Méthanol		Gazole	
	NO_x	CO	η_{th}	E_{sh}	T_{inj}	E_{sh}	T_{inj}	E_{sh}	T_{inj}	E_{sh}	T_{inj}
1	-65,81	-26,11	-5,2	0,7	120	0,3	8	-			
2	-57,61	-29,65	-2,93	0,7	120	0,3	10	-			
3	-64,06	-52,94	même	0,7	90	0,8	8	-			
4	-18,01	-45,97	même	0,455	120	0,18	15	0,12	15	0,245	0

Les Figures 4.23 a-c montrent les effets de la stratégie d'injection du gazole et du méthanol, conformément au test 1 présenté dans le Tableau 4.12, sur CA10 [*], CA50 [‡] et CA10-90 [**] du mode de fonctionnement DFMG. D'après les résultats des Figures 4.23-a et 4.23-b, pour le même instant d'injection du méthanol, l'avance à l'injection du gazole avance le début de la combustion et la phase de combustion. En revanche, pour le même instant d'injection du gazole, le début de la combustion se rapproche du PMH avec l'avance de l'injection du méthanol. Ceci est principalement dû à l'impact de l'instant d'injection du méthanol sur la température. Plus le méthanol est injecté en avance, plus la quantité évaporée est importante, ce qui consomme plus d'énergie et provoque une baisse de température. Cela prolonge le délai d'auto-inflammation du gazole et retarde le début de la combustion. Les résultats de la Figure 4.23-c montrent que la durée de la combustion est d'autant plus longue que l'injection du méthanol est retardée. Cela est justifié par l'effet de l'instant d'injection du méthanol sur son processus d'évaporation. Plus le méthanol est injecté en avance, plus son évaporation est complète avant le début de la combustion. Cela contraste avec le cas où l'injection est retardée, ce qui implique une quantité restante du méthanol liquide qui sera évaporée après le début de la combustion, induisant un prolongement de la durée de combustion.

∗. Le début de la combustion.
‡. La phase de combustion au cours de laquelle 50% du carburant introduit est consommé.
∗∗. La durée de la combustion.

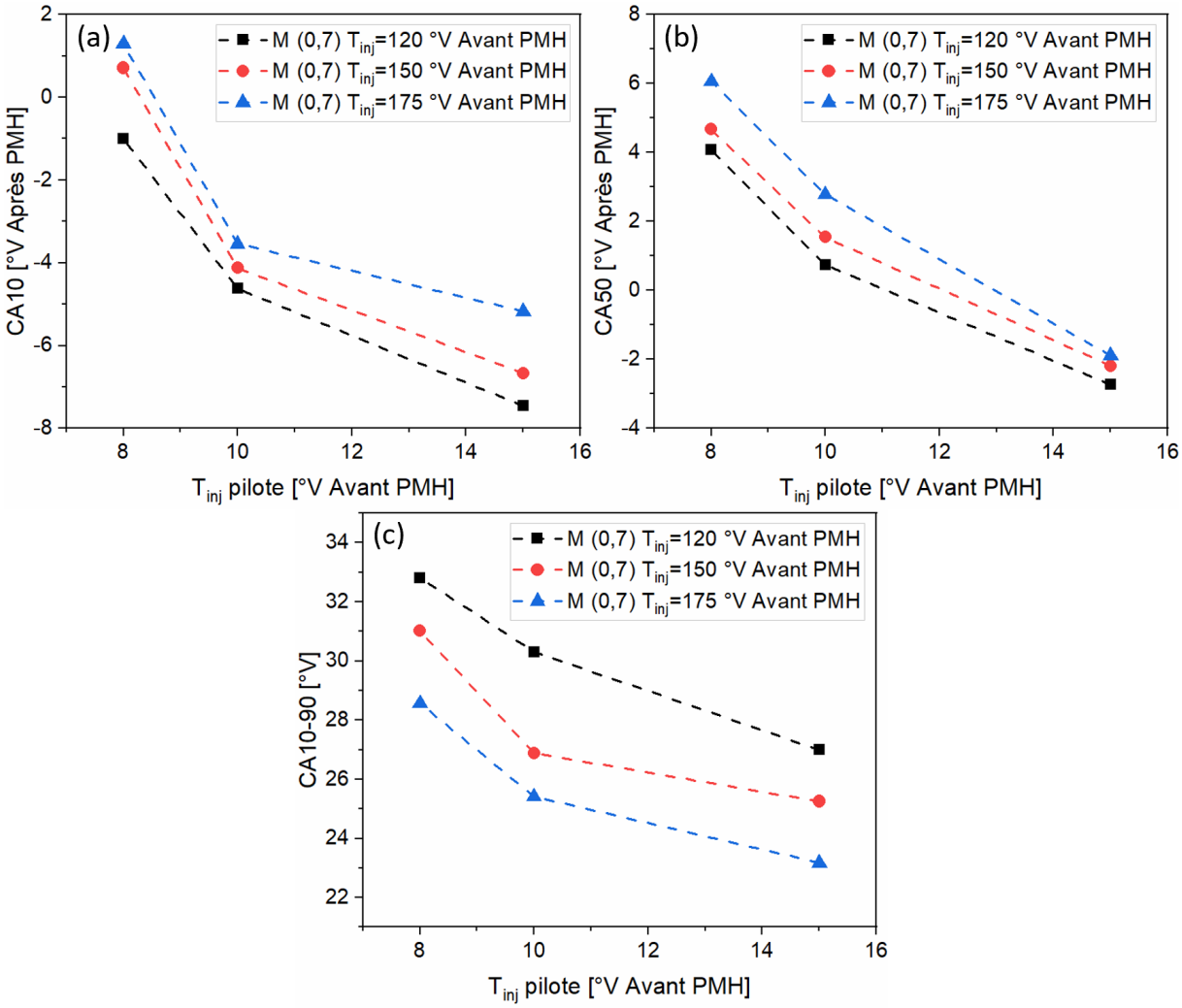


FIGURE 4.23 – Effets de la stratégie d'injection gazole et méthanol sur : (a) CA10, (b) CA50, (c) CA10-90.

L'influence de l'instant d'injection du méthanol est clairement illustrée dans la Figure 4.24 (E_{sh_M}=70%). L'introduction précoce du méthanol (T_{inj}=175°V Avant PMH) implique un démarrage précoce du processus d'évaporation qui consomme impérativement de la chaleur, ce qui est traduit par la chute de la température dans le cylindre. Dans ce cas, la combustion est presque terminée à 44 °V Après PMH, contrairement au cas d'une injection du méthanol à 120 °V Avant PMH. Cela s'explique par la durée de combustion plus courte dans le cas de l'injection avancée du méthanol.

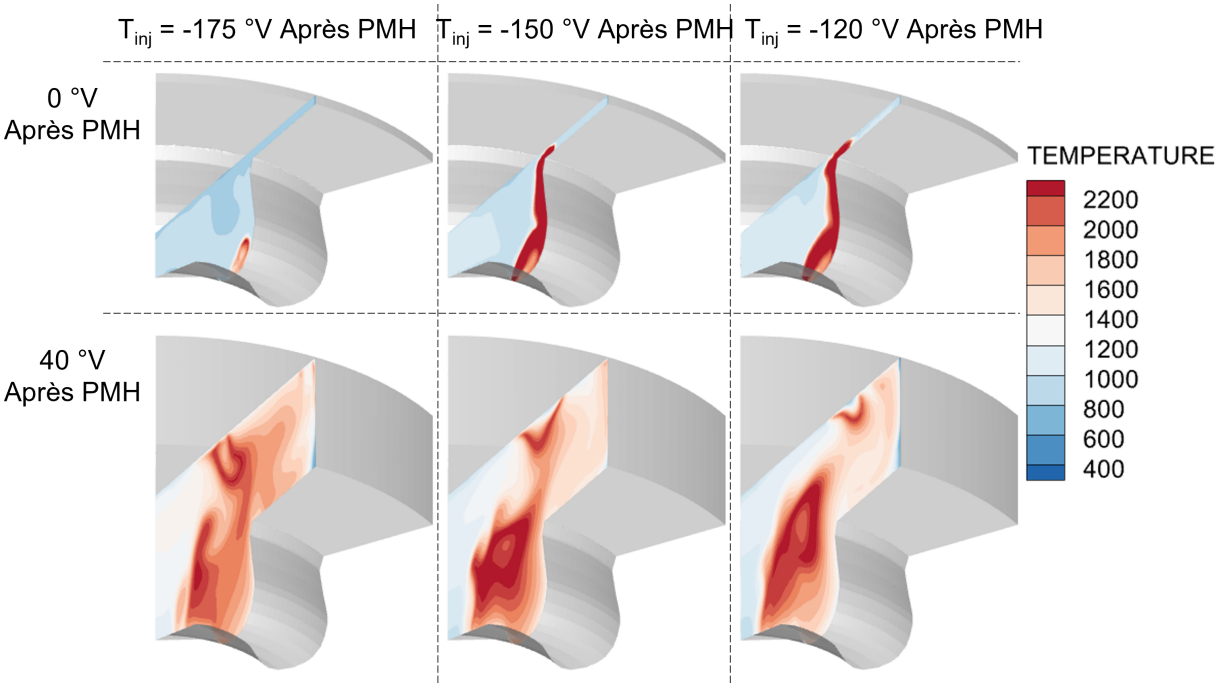


FIGURE 4.24 – Variations de la température dans le cylindre en fonction de l'instant d'injection du méthanol.

3.5 Conclusion

Dans le cadre de la décarbonation et le passage à des carburants alternatifs moins polluants plusieurs solutions se présentent. Afin de tester la fiabilité et la robustesse de ces solutions, l'utilisation des outils de modélisation est primordiale pour assurer l'évaluation de ces solutions.

Dans un premier temps, l'outil CFD Converge^{TM} utilisé pour la simulation des performances et des émissions du moteur est présenté en mettant l'accent sur les différents modèles utilisés. Ces modèles permettent de reproduire les phénomènes physiques ayant lieu dans le cylindre, notamment la turbulence, la combustion, la dynamique des fluides, les transferts de chaleur, la thermodynamique, la cinétique chimique et la production des émissions, etc.

Cet outil de modélisation a été utilisé par la suite selon deux approches dans le cadre de la décarbonation et l'optimisation d'un moteur dual fuel. La première approche présente une avancée qualitative dans le domaine des gros moteurs dual fuel fonctionnant à l'ammoniac comme carburant primaire. Dans ce contexte, une optimisation multi-objectifs couplée à une méta-modélisation parallèle est appliquée au moteur caractérisé par un taux de participation énergétique de 85% pour l'ammoniac. Cette approche vise le développement d'un moteur dédié au fonctionnement dual fuel ammoniac/gazole, où l'enrichissement avec de petite quantités d'hydrogène est envisageable afin d'améliorer les performances du moteur.
Selon cette approche, la configuration optimale a surpassé les autres en termes d'efficacité de combustion et de réduction des polluants émis, avec une réduction de plus de 43% du NH_3 imbrûlé et une amélioration significative du rendement thermique de plus de 31%.

La deuxième approche souligne les avancées significatives de la recherche visant l'optimisation de la substitution du méthanol dans les gros moteur dual fuel méthanol (M)/gazole (G). Grâce à des simulations numériques explorant diverses combinaisons d'injection, des stratégies telles que M-G, M-G-M, M-G-G et M-G-G-M ont été évaluées en termes d'émissions de NO_x et de CO, tout en gardant des performances élevées. Les résultats ont affirmé que le problème de l'évaporation du méthanol représente un défi majeur limitant la combustion en consommant une partie importante de la chaleur pendant la phase de compression. Cela affecte impérativement le déroulement de la combustion, à commencer par le délai d'auto-inflammation du carburant pilote. Une configuration optimale de la stratégie d'injection a permis la réduction de 64% et 52% des émissions de NO_x et de CO, respectivement, tout en maintenant des performances élevées du moteur.

Les résultats obtenus dans le cadre des deux approches présentées dans ce chapitre apportent une contribution précieuse à l'optimisation et la conception des moteurs dual fuel respectant l'environnement, en démontrant la faisabilité d'une substitution accrue d'ammoniac et du méthanol avec des réductions significatives des émissions polluantes. Ceci a mis en exergue la possibilité de combiner à la foi différents paramètres du moteur, notamment la forme de la chambre de combustion, les stratégies d'injection, les paramètres géométriques des injecteurs, le taux de compression, et les conditions d'air à l'entrée en termes de pression et de température, afin d'assurer une optimisation multi-objectifs traitant les performances et les émissions polluantes.

Chapitre 5

Méta-modèles et optimisation des moteurs à combustion interne

Objectifs

Ce chapitre se concentre sur le développement et la mise en œuvre des méta-modèles afin d'optimiser le fonctionnement des moteurs à combustion interne. Il porte principalement sur deux volets essentiels. Le premier repose sur une approche de modélisation combinée avec une optimisation multi-objectifs afin d'optimiser l'injection d'un carburant pilote émulsifié pour des performances supérieures et des émissions réduites d'un moteur dual fuel. Le deuxième volet repose sur le développement d'une nouvelle approche de modélisation multi-fidélité et son application pour l'optimisation d'un moteur dual fuel.

Introduction

L'utilisation des méta-modèles dans la modélisation des moteurs à combustion interne représente une approche prometteuse et essentielle pour comprendre, optimiser et concevoir le fonctionnement complexes des MCIs. Entre la modélisation 0D (Chapitre 2), caractérisée par un coût de calcul réduit et une précision relativement faible, et la modélisation 3D CFD (Chapitre 4), caractérisée par un coût de calcul important et une bonne précision, les méta-modèles, basés sur des techniques d'apprentissage automatique ou d'interpolation, permettent une estimation rapide et précise des performances du moteur, réduisant ainsi le temps de calcul et facilitant l'exploration fiable de l'espace de conception. En outre, ils offrent une flexibilité accrue pour l'analyse de sensibilité et l'optimisation, tout en pouvant être intégrés dans des workflows d'ingénierie automatisée, contribuant ainsi à une prise de décision rapide et éclairée tout au long du processus de développement.
Dans ce chapitre, une exploration approfondie des méta-modèles est mise en œuvre. Deux types de modélisation sont abordés : tout d'abord, une approche de modélisation parallèle est exploitée dans le contexte de l'optimisation du moteur dual fuel. Ensuite, une approche originale développée dans le cadre de cette thèse est présentée.

1 Modélisation-Optimisation ON-line (parallèle) de l'injection pilote émulsifié

Cette section se concentre particulièrement sur l'application d'une approche de modélisation développée pour l'exploration de l'injection pilote émulsifié lors d'un fonctionnement en mode dual fuel. Pour cette raison, une approche de modélisation combinée avec une optimisation multi-objectifs est présentée. Dans ce cadre, l'optimisation se déroule parallèlement au processus de modélisation afin de réduire le temps de calcul global. Pour commencer, le contexte général de l'étude est présenté ainsi que les principales recherches régissant cet aspect de modélisation. Par la suite, le modèle est détaillée selon plusieurs étapes en mettant l'accent sur l'optimisation de l'injection pilote émulsifié pour un fonctionnement dual fuel.

1.1 Contexte général

L'introduction d'eau dans les moteurs dual fuel est une technique prometteuse pour réduire davantage les émissions de NO_x et le risque de cliquetis [213] qui limitent fortement le fonctionnement du moteur dual fuel. Dans ce cadre l'optimisation de cette technique reste essentielle pour la maîtrise de ces différents paramètres afin de relever le défi : minimisation des NO_x et du cliquetis, maximisation des performances.

Plusieurs techniques d'introduction de l'eau dans le cylindre ont été mises en œuvre. Certains chercheurs ont concentré leurs travaux sur l'injection directe d'eau dans la chambre de combustion. Mingrui et al. [214] ont étudié numériquement l'effet de la quantité d'eau injectée sur les performances et les caractéristiques d'émission d'un moteur à injection directe d'essence.

Selon leurs résultats, la teneur en eau optimale est égale à 15% de la masse de carburant injectée. De plus, ils rapportent que la pression effective moyenne indiquée et le rendement thermique augmentent, et les émissions de NO_x et de suies diminuent.

D'autres chercheurs ont concentré leurs travaux sur l'injection indirecte d'eau dans le collecteur d'admission du moteur. Dans une étude numérique, Ghazal [215] a étudié l'effet du calage de l'injection directe du gazole et du régime moteur sur les performances et les émissions d'un moteur dual fuel (hydrogène-gazole) couplé à l'injection d'eau. L'hydrogène et l'eau ont été injectés dans le collecteur d'admission. Les résultats ont montré que l'injection d'eau entraîne une réduction des émissions de NO_x d'environ 50%.

La troisième technique repose sur l'introduction d'eau sous forme d'émulsion. Sudarshan et Anand [216] ont étudié l'efficacité des méthodes d'émulsification et d'injection d'eau pour réduire les émissions de NO_x avec le biodiesel. Dans leurs travaux, trois rapports eau/biodiesel ont été utilisés, à savoir 3, 6 et 9%. Les résultats de cette étude révèlent que le délai d'auto-inflammation a augmenté et que la pression maximale a été réduite avec l'émulsion biodiesel-eau. La durée de combustion a été réduite avec l'émulsion, ce qui indique des caractéristiques de combustion améliorées. Le rendement thermique du moteur a augmenté avec l'émulsion ce qui a été accompagné par une réduction de 10% de la consommation spécifique de carburant. Dans ce cas, l'émulsion et l'injection d'eau entraînent une diminution simultanée de NO_x et de suies.

Le Tableau 5.1 présente une analyse globale sur l'introduction d'eau dans les moteurs selon les trois volets susmentionnés. Alors que les deux premières méthodes d'introduction de l'eau ont entraîné un surcoût du système d'injection d'eau et des problèmes de corrosion du moteur, la troisième méthode s'est avérée être la solution la plus économique pouvant être implémentée dans un moteur à combustion interne sans modifications majeures. Malgré tous ces avantages, peu de travaux ont été réalisés dans ce domaine, en particulier pour les moteurs dual fuel. Alors qu'elle nécessite une optimisation approfondie pour contrôler simultanément les émissions et le cliquetis dans le moteur sans trop affecter ses performances.

TABLE 5.1 – Analyse d'introduction d'eau dans les moteurs.

Introduction d'eau	**Auteurs**	**Type de l'étude**	**Principaux résultats**
Directe	Rahimi et al. [217]	Numérique	L'avancement de l'injection d'eau entraîne une augmentation de la stratification thermique et une réduction de la pression maximale et du taux de dégagement de chaleur.
	Li et al. [218]	Expérimentale	L'intensité du cliquetis diminue avec l'augmentation de la quantité d'eau injectée. L'augmentation de la quantité d'eau injectée réduit les émissions de NO_x, de CO et de HC tout en augmentant les émissions de suies.
Indirecte	Morsy [219]	Expérimentale	Baisse des émissions de NO_x jusqu'à 56% en fonction de l'augmentation de la quantité d'eau injectée.
	Chintala et Subramanian [220]	Expérimentale	La pression et la température maximale, ainsi que le taux de dégagement de chaleur, diminuent à mesure que la quantité d'eau augmente, tandis que le délai d'auto-inflammation et la durée de combustion augmentent et les émissions de NO_x diminuent jusqu'à 37%.
Émulsion	Seungchul et Kihyung [221]	Expérimentale	L'augmentation de la teneur en eau et le retard d'injection causent une diminution de NO_x. L'augmentation de la teneur en eau et l'avance d'injection causent une diminution de suies, jusqu'à devenir pratiquement inexistantes pour des teneurs en eau supérieures à 20% en masse.
	Ithnin et al. [222]	Expérimentale	Les NO_x et les suies sont réduits simultanément avec l'émulsion eau/gazole (E/G). La vaporisation d'eau dans l'émulsion E/G permet de réduire les NO_x suite à la réduction de la température.

Cette section vise l'optimisation de cette technique d'introduction d'eau pour un moteur dual fuel fonctionnant au gaz naturel comme carburant principal avec un enrichissement élevé

en hydrogène (40% en termes d'énergie à l'entrée). Une méthode d'optimisation multi-objectifs basée sur un méta-modèle est mise en œuvre . Ce problème d'optimisation est contrôlé par la quantité d'eau portée par le jet de carburant pilote et par l'instant d'injection. L'approche proposée est basée sur une méthodologie d'optimisation parallèle (modélisation ON-line) pour laquelle la recherche de l'optimum aura lieu en même temps que la construction du méta-modèle.

1.2 Description de l'approche

L'approche présentée dans cette section se concentre sur l'amélioration des performances d'un moteur dual fuel hydrogène-gaz naturel/gazole (HGN-gazole) avec un taux élevé d'enrichissement en hydrogène, ce qui répond au triple enjeu : minimisation de cliquetis, réduction des émissions de NO_x et maximisation du rendement thermique. Pour atteindre ces objectifs, un méta-modèle est construit en utilisant la technique des fonctions de base radiales (RBF), qui permet une optimisation multi-objectifs. Le modèle RBF s'appuie sur un ensemble de fonctions Gaussiennes pour cartographier les intervalles de variation d'entrée et de sortie du moteur, puis utilise un noyau radial pour estimer les mesures de performance souhaitées du moteur. Les paramètres opératoires optimisés permettent au moteur dual fuel de fonctionner avec un haut degré de fiabilité, tout en minimisant les émissions et en maximisant le rendement thermique, ce qui est d'une importance capitale pour les systèmes énergétiques durables et respectueux de l'environnement.

L'organigramme présenté par la Figure 5.1 définit l'approche proposée dans cette section pour l'optimisation du fonctionnement du moteur dual fuel. L'optimisation et la construction du méta-modèle sont effectuées en parallèle sur la base d'une démarche d'optimisation ON-line.

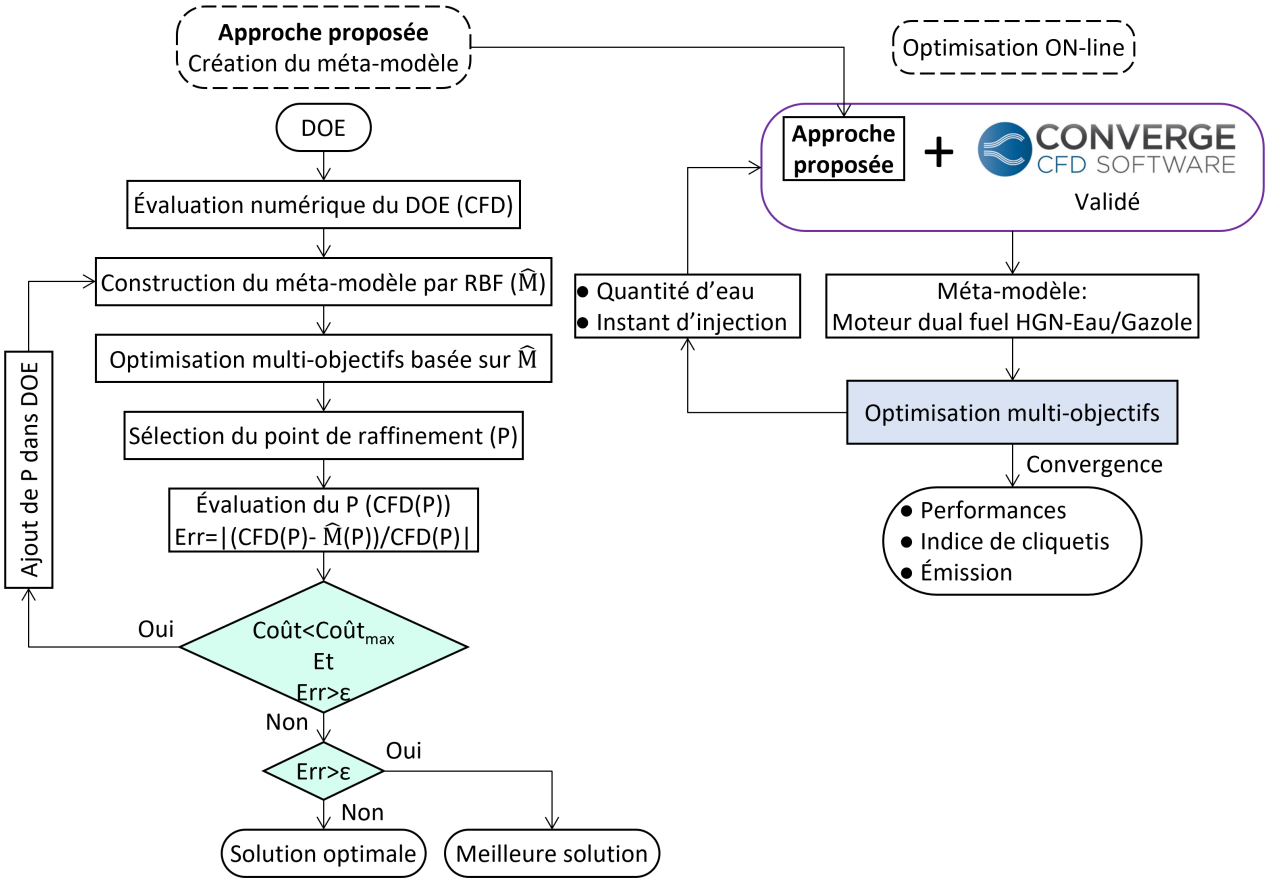


FIGURE 5.1 – Organigramme de l'approche proposée pour l'optimisation multi-objectifs basée sur un méta-modèle.

Les principales étapes de cette approche sont présentées comme suit :

• Génération du plan d'expérience (DOE) : La génération du plan d'expérience initial est une étape primaire et décisive dans l'approche proposée, afin de capturer le maximum d'informations en utilisant cette génération avec un coût réduit pour la construction du méta-modèle. Dans cette section, la méthode d'échantillonnage latins hypercubes (LHD) optimisée (présentée dans le Chapitre 4) est utilisée [223].

• Construction du méta-modèle par RBF : La technique RBF est employée dans cette étude pour construire un méta-modèle du comportement d'un moteur dual fuel en fonction de ses variables de contrôle. Les méta-modèles sont couramment utilisés pour simplifier la complexité d'un système et constituent une approche efficace à cette fin [224]. La technique RBF est une méthode d'approximation qui transforme les données d'entrée en une combinaison de fonctions radiales, comme l'exprime l'équation 5.1.

$$\hat{M}(x) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \phi(\epsilon_i |x - x_i|) \tag{5.1}$$

Où le vecteur $x_1, \ldots, x_n$ représente l'ensemble du plan d'expérience, ϕ la fonction radial définie

par l'utilisateur, λ le vecteur des coefficients d'interpolation, et ϵ le vecteur des facteurs de forme.

Chaque fonction radiale est centrée sur un point de données d'entrée, appelé "centre". La contribution de chaque centre à l'approximation de la sortie du système est déterminée en fonction de la distance entre les données d'entrée et ce centre. La fonction de distance euclidienne est utilisée pour mesurer la distance entre les données d'entrée et chaque centre. En utilisant l'outil RBF pour construire un méta-modèle du comportement du moteur dual fuel, il devient possible de prédire les performances du moteur sur la base d'un ensemble de variables de contrôle. Le modèle qui en résulte peut être utilisé pour optimiser le fonctionnement du moteur afin d'atteindre les niveaux de performance souhaités avec plus de précision et d'efficacité. La technique RBF est largement approuvée comme une approche efficace pour construire des méta-modèles de systèmes complexes, en particulier dans le domaine de l'ingénierie et pour les sciences appliquées.
La technique de validation croisée Leave-One-Out (LOOCV), largement reconnue pour son efficacité dans la littérature [225], est utilisée pour neutraliser l'effet du type du méta-modèle sur le résultat final.
Le vecteur ϵ, qui définit la forme des fonctions radiales, peut contrôler l'incertitude de l'approximation en dehors des points d'échantillonnage. L'approche proposée est basée sur la méthode de Rippa [226] pour l'estimation de l'incertitude e par un type de validation croisée. Cette incertitude e peut être estimée par validation croisée (LOOCV), comme le montre l'équation 5.2.

$$e = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} e_i^2}}{n} \tag{5.2}$$

Avec, e_i est défini par l'erreur de prédiction et n est la taille de l'ensemble concerné.

• Optimisation multi-objectifs : Lors de l'optimisation du fonctionnement du moteur dual fuel, il est important d'utiliser une méthode efficace pour trouver l'optimum du système. Dans ce travail, la méthode NSGA II (*Non-dominated Sorting Genetic Algorithm* II) est utilisée [203]. Cette méthode utilise un algorithme génétique pour générer une population de solutions potentielles, puis utilise un processus de tri non dominé pour sélectionner les solutions les plus performantes. Le processus de tri non dominé consiste à classer les solutions dans différentes catégories de domination en fonction de leurs performances par rapport aux autres solutions de la population. Les solutions qui ne sont pas dominées par d'autres solutions sont considérées comme "non dominées" et sont placées dans la première catégorie. Les solutions qui sont dominées par une ou plusieurs autres solutions sont placées dans des catégories inférieures. En utilisant ce processus de tri non dominé, la méthode NSGA II sera capable de générer un ensemble de solutions non dominées qui représentent un front de Pareto du problème.

• Sélection des points de raffinement : Afin de garantir une grande précision du modèle, une approche de raffinement du plan d'expérience est mise en œuvre pour prendre en compte les nouvelles zones du domaine non explorées. De ce points de vue, le choix du point de raffinement (P) s'effectue selon le critère de "min-max distance" [227] afin de garantir une meilleure explora-

tion du plan d'expérience, sur la base de la procédure présentée précédemment dans le Chapitre 4 via l'équation 4.20.

Après la sélection du point de raffinement, il sera évalué par le méta-modèle construit et le modèle réel pour calculer l'erreur relative (Err). Si l'erreur est supérieure au minimum fixé (ϵ), le point sera reconsidéré dans la construction du méta-modèle et la boucle de convergence restera active. D'autre part, si l'erreur minimale est atteinte ou si le coût maximal (Coût_{max}) est consommé, le calcul s'arrête pour fournir l'optimum.
Il faut noté que la validation du modèle numérique CFD (Converge^{TM}) a été effectuée précédemment (Chapitre 3). Cette validation reste valable pour cette partie vu que l'étude est réalisée sur le même moteur Lister-Petter TS1.

1.3 Résultats et discussions

Cette sous-section contient principalement deux parties. La première concerne la validation de l'approche proposée en termes de coût de calcul et de précision. Tandis que la deuxième traite une application de cette approche sur un cas d'ingénierie (optimisation de l'injection pilote d'un moteur fonctionnant en mode dual fuel) dans le but de montrer son utilité et de tester son efficacité.

1.3.1 Validation de l'approche

Dans ce travail, un cas de base est considéré, sur lequel la modélisation et l'optimisation ont été effectuées. Ce cas est défini par le fonctionnement d'un moteur dual fuel à pleine charge ("Lister-Petter TS1"), avec du gazole comme carburant pilote, participant à 10% de l'énergie totale, et un mélange de gaz naturel et d'hydrogène (HGN : 60% GN, 40% H_2) comme carburant primaire (90% de l'énergie totale). Dans ces conditions de fonctionnement, un très fort phénomène de cliquetis est capté avec un indice (IC), défini par l'équation 5.3, qui dépasse 24 bar (IC=24,61 bar). Ce cas de fonctionnement est pris comme un cas de base pour une étude d'optimisation afin de réduire le cliquetis tout en maintenant des performances élevées et de faibles émissions.

$$IC = \max_{\theta_i, \theta_i + W} |\tilde{P}| \tag{5.3}$$

Où θ_i représente l'angle vilebrequin correspondant au début de calcul, W la largeur de la fenêtre de calcul et $\tilde{P}$ la pression filtrée dans le cylindre .

Selon l'approche proposée dans cette section, la modélisation traite la variation du rendement thermique (η_{th}), de l'indice de cliquetis (IC) et des émissions de NO_x en fonction de la quantité d'eau mélangée au gazole $q_{\%}$ et du temps d'injection (T_{inj}) pour définir les caractéristiques de l'injection pilote. Les variables modélisées (η_{th}, IC, NO_x) et les variables de contrôle ($q_{\%}$, T_{inj}) définissent respectivement les fonctions objectives et les variables de décision pour le problème d'optimisation. Le Tableau 5.2 représente les intervalles de variation pour les deux variables de décision qui contrôlent la construction du plan d'expérience par la suite.

TABLE 5.2 – Plages de variation des variables de décision.

Quantité d'eau dans le pilote ($q_{\%}$)	Instant d'injection pilote (T_{inj})
[0-30%] en volume	[5-30] °V Avant PMH

En plus de la modélisation RBF, une optimisation multi-objectifs est appliquée en parallèle au modèle en cours de construction. La sélection des fonctions objectives est une étape cruciale dans cette étude, étant donné que divers paramètres concurrentiels interviennent lors du fonctionnement d'un moteur dual fuel. Ceci est particulièrement important lorsqu'il s'agit de variations dans le temps d'injection du carburant pilote, qui contient des quantités variables d'eau. Le processus d'optimisation consiste à trouver la combinaison optimale de variables de contrôle pour atteindre les niveaux souhaités de performance du moteur, un faible indice de cliquetis, et un faible niveau d'émission de NO_x.

Dans cette étude, l'optimisation est réalisée à l'aide d'une approche multi-objectifs (NSGA II), qui implique l'optimisation simultanée de plusieurs fonctions objectives. Le choix des fonctions objectives est une considération critique dans ce cas, car il affecte directement la qualité de l'optimisation. Pour résoudre ce problème, l'étude sélectionne soigneusement un ensemble de fonctions objectives qui reflètent avec précision le compromi entre les différentes mesures, telles que le rendement thermique et les émissions polluantes. En appliquant l'approche d'optimisation multi-objectifs au modèle RBF, il devient possible d'identifier les paramètres de contrôle optimaux qui permettent d'atteindre les niveaux souhaités de performances du moteur tout en tenant compte des paramètres concurrents qui affectent le fonctionnement du moteur dual fuel. Les résultats de cette étude fournissent des indications précieuses sur la conception et l'optimisation des moteurs dual fuel, en particulier en ce qui concerne l'impact de l'instant d'injection du carburant pilote et de la teneur en eau sur les performances du moteur, et ouvrent la voie au développement de systèmes énergétiques plus efficaces et plus respectueux de l'environnement. Les deux fonctions objectives choisies sont décrites par l'équation 5.4.

$$\begin{cases} \text{Min} : \mathrm{F}_1, \mathrm{F}_2 \\ \mathrm{F}_1 = -\eta_{th} \\ \mathrm{F}_2 = \frac{2}{3}\left[\mathrm{NO_x}\right] + \frac{1}{2}\left[IC\right] \end{cases} \tag{5.4}$$

Afin de confirmer l'importance du critère de convergence pour la précision des résultats finaux, deux scénarios sont mis en œuvre pour tester les deux critères d'arrêt possibles, comme le montre l'organigramme dans la Figure 5.1. Le Tableau 5.3 illustre les caractéristiques de ces deux scénarios.

TABLE 5.3 – Paramètres des deux scénarios définissant l'approche.

	ϵ	$Coût_{max}$	Err	$Coût$
Scénario 1	0,5%	150	4,27%	150
Scénario 2	0,5%	500	0,43%	258

Les résultats présentés dans le Tableau 5.3 montrent clairement l'influence du critère d'arrêt. L'optimisation dans le scénario 1 est limitée par le coût maximal, c'est pourquoi l'erreur dans ce cas est relativement élevée. D'autre part, l'optimisation dans le scénario 2 est plus libre en termes de plafond de coût, pour cette raison l'erreur requise est atteinte.
La Figure 5.2 présente une comparaison des fronts de Pareto pour les deux scénarios. L'influence de la convergence finale est clairement illustrée par ces résultats, pour lesquels le scénario 2 a un front de Pareto qui découvre plus de cas optimaux par rapport au cas de base, contrairement au premier scénario. Cela se justifie principalement par la convergence non complète dans le cas du scénario 1.

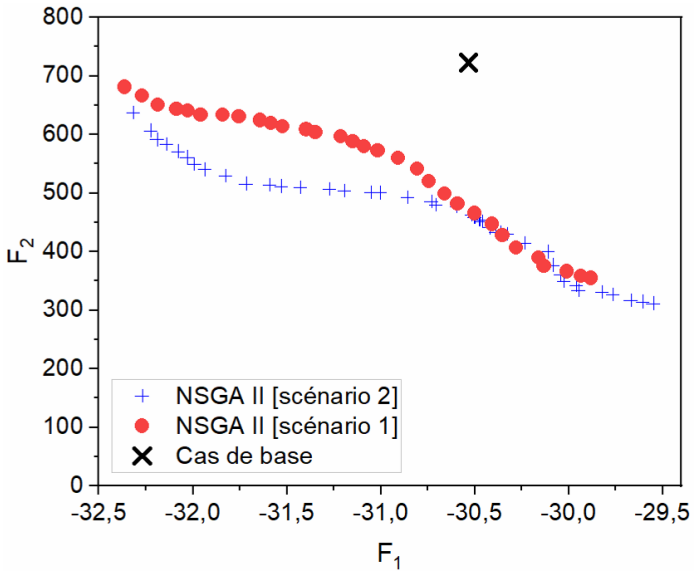


FIGURE 5.2 – Fronts de Pareto pour les deux scénarios.

1.3.2 Principaux résultats

La Figure 5.3 met en évidence l'évolution des fonctions objectives F_1 et F_2 au cours de l'optimisation. Cette figure permet également l'observation du compromis entre la maximisation du rendement thermique d'une part et la minimisation de l'indice de cliquetis et des NO_x d'autre part. Pour faciliter la comparaison, le cas de base est également présenté sur la figure. Les résultats de l'optimisation montrent une nette amélioration des fonctions objectives par rapport au cas de base, ce qui atteste de la fiabilité de l'algorithme utilisé. En outre, trois cas représentatifs avec des comportements différents ont été sélectionnés. Ces cas seront analysés plus en détails ci-dessous.

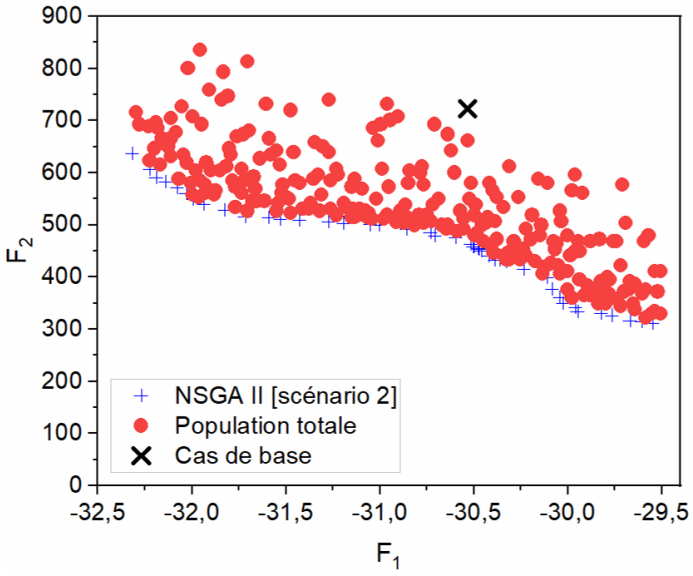


FIGURE 5.3 – Fronts de Pareto pour le deuxième scénario et population totale.

L'ensemble du front de Pareto domine le cas de base, comme le montre la Figure 5.3. En d'autre termes, l'optimisation dans ce cas implique des choix concurrents en termes de fonctions objectives, mais tous ces choix sont meilleurs par rapport au cas de base.
Le Tableau 5.4 résume les caractéristiques du cas de base ainsi que les deux cas limites du front de Pareto, pour lesquels l'une des deux fonctions objectives est entièrement tolérée (F_1 et F_2 dans les cas 2 et 1, respectivement).
Les résultats du Tableau 5.4 montrent clairement l'influence du choix des fonctions objectives sur les performances du moteur en fonction de son mode de fonctionnement.

TABLE 5.4 – Caractéristiques des cas de référence.

	Variables de décision		Performances et émissions		
	$q_{\%}$	T_{inj} (°V Avant PMH)	NO_x (ppm)	IC (bar)	η_{th} (%)
Cas de base	0	13	1072,14	24,61	30,53
Cas 1	6,82	14,59	944,87	21,57	32,31
Cas 2	24,17	10,68	492,45	3,31	29,50

Le cas de base, qui présente des performances avec un indice de cliquetis très élevé, est illustré dans le Tableau 5.4. Lorsque la deuxième fonction objective est tolérée (Cas 1), l'optimiseur se concentre entièrement sur la maximisation du rendement thermique, mais ce cas a une deuxième fonction objective (émissions de NO_x et indice de cliquetis) inférieure à celle du cas de base. En revanche, lorsque la première fonction objective est tolérée (Cas 2), l'optimiseur se concentre entièrement sur la minimisation des émissions de NO_x et de l'indice de cliquetis, mais le rendement thermique est plus faible de tous les cas, y compris le cas de base.

La Figure 5.4 présente l'évolution de la température dans le cylindre pour les trois cas de référence présentés dans le Tableau 5.4. L'influence de l'instant d'injection est clairement présentée à l'instant 10 °V Avant PMH, où une plus grande pénétration du jet pour le cas 1 et une plus petite pour le cas 2 par rapport au cas de base sont remarquées. Ceci est dû à une avance et à un retard de l'injection par rapport au cas de base pour les cas 1 et 2, respectivement. L'influence de la quantité d'eau dans le jet gazole affecte directement la température, comme le montrent les résultats. Pour cette raison, il est remarquable que le cas de base est caractérisé par la température la plus élevée, suivi du cas 1, puis du cas 2, pour tous les degrés vilebrequin présentés. Cet ordre correspond à l'ordre inverse de la quantité d'eau portée par le jet pilote. En d'autre termes, plus la quantité d'eau dans le jet pilote est importante, plus la température est basse, ce qui est principalement dû à l'absorption d'une partie de la chaleur interne du cylindre par la quantité d'eau injectée pour s'évaporer. Pour la même raison, un retard d'auto-inflammation est observé à 4 °V Avant PMH, car le délai d'auto-inflammation pour le carburant pilote est exponentiellement lié à la température interne de la chambre de combustion selon la loi d'Arrhenius [228]. En résumé, une plus grande quantité d'eau dans l'injection pilote entraîne une baisse de la température dans la chambre de combustion, ce qui retarde l'auto-inflammation de ce carburant pilote.

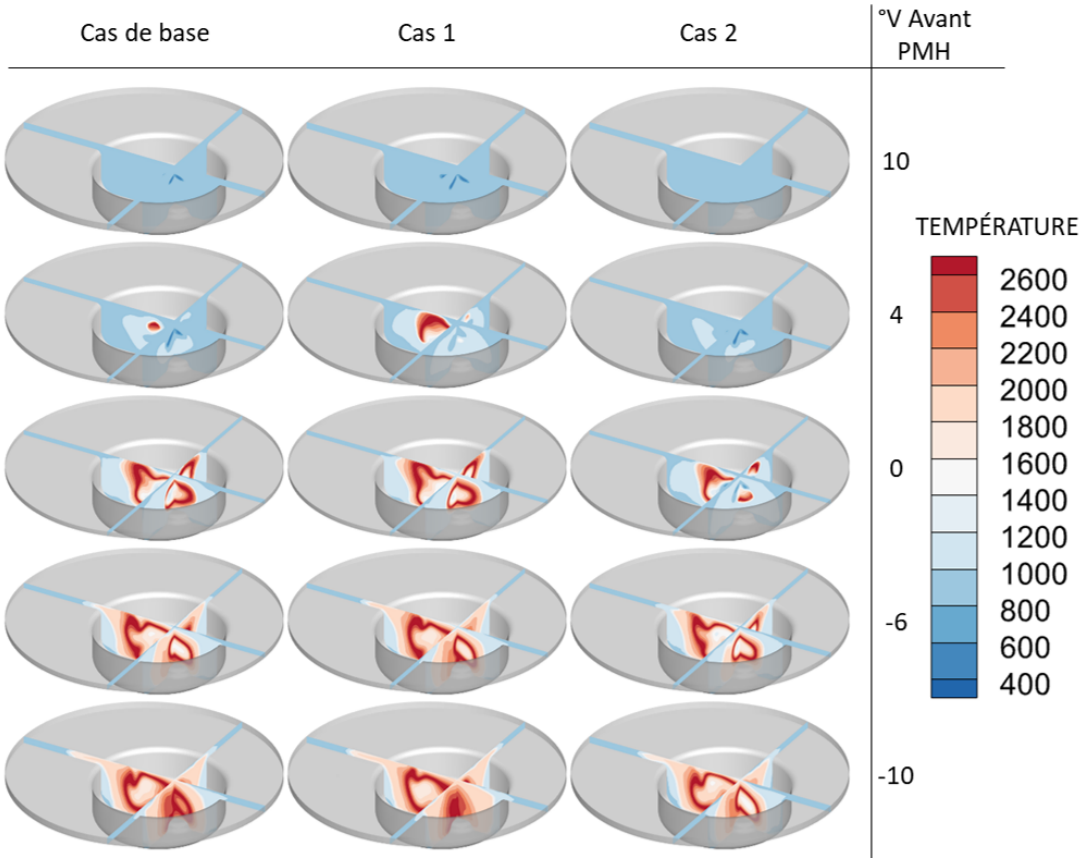


FIGURE 5.4 – Évolution de la température interne en fonction du degré vilebrequin pour les trois cas de référence.

La Figure 5.5 montre les différents cas de la population totale, illustrée dans la Figure 5.3,

présentés selon les variations de chaque variable des fonctions objectives (η_{th}, NO_x, IC) en fonction des variables de décision (T_{inj}, $q_{\%}$). Plusieurs remarques et commentaires vont être soulevés comme mentionné ci-dessous :

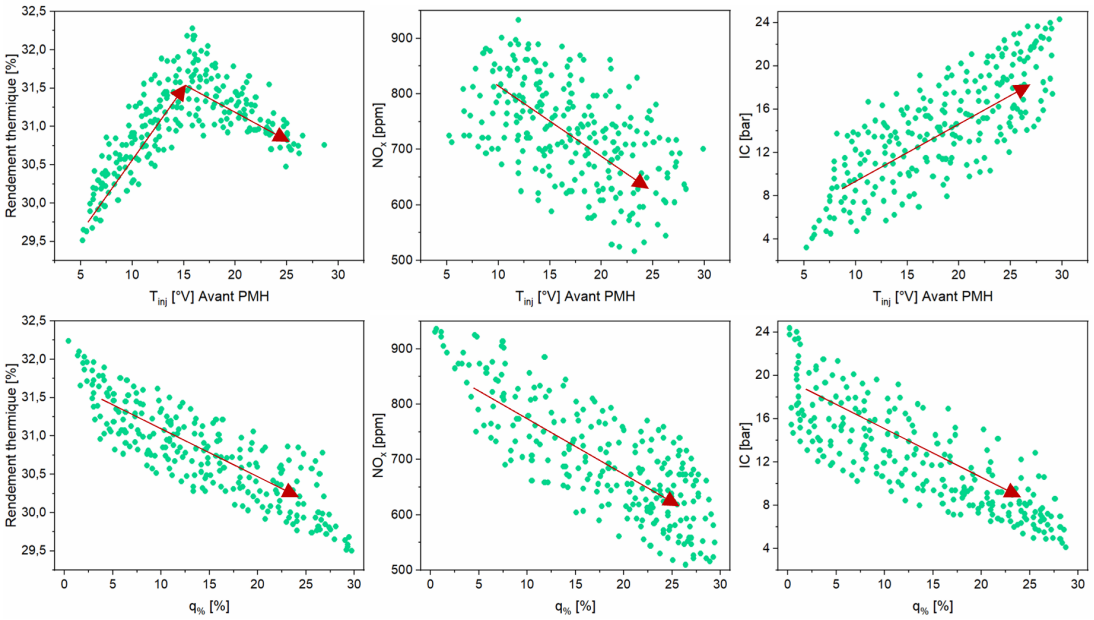


FIGURE 5.5 – Variation de η_{th}, NO_x, et IC en fonction de T_{inj} et $q_{\%}$.

• La variation du rendement thermique en fonction de l'avance à l'injection passe principalement par deux phases. Si l'instant d'injection du carburant pilote est trop proche ou trop éloigné du PMH (Point Mort Haut), le rendement thermique sera faible. Entre ces deux limites, une marge de rendement maximale est captée pour une marge d'instant d'injection optimale. Ceci s'explique par le fait que, si le temps d'injection est trop précoce, le temps d'auto-inflammation sera retardé car les conditions dans la chambre de combustion sont moins favorables à l'auto-inflammation, ce qui pénalise le rendement. D'autre part, si l'injection est très proche du PMH, une combustion non-adapté aura lieu ce qui entraîne une baisse des performances. Pour cette raison, une injection pilote trop proche du PMH provoque une baisse plus importante qu'une injection trop éloignée du PMH.

• L'avancement de l'instant d'injection dans un moteur dual fuel réduit les émissions de NO_x. Cette réduction est principalement due aux conditions régnantes dans la chambre de combustion lors de l'injection et de la combustion pilote, étant donné que les émissions de NO_x dans les moteurs dual fuel sont principalement causées par la combustion du carburant pilote. L'injection du carburant pilote loin du PMH entraîne une baisse considérable de la température de combustion, ce qui se traduit par une diminution considérable des émissions de NO_x. Cela suggère que le réglage de l'instant d'injection peut être une approche efficace pour réduire les émissions de NO_x dans les moteurs dual fuel.

Cependant, l'effet de cette avance à l'injection est inversé en ce qui concerne l'indice de cli-

quetis, qui augmente de manière significative en fonction de l'avance à l'injection. Cela s'explique par le fait que l'avance à l'injection conduit à un allumage précoce, entraînant une combustion plus en avance du mélange gazeux et des températures relativement plus élevées au niveau du PMH, où les niveaux de cliquetis élevés sont détectés. Ce phénomène met en évidence le compromis complexe nécessaires à l'optimisation des performances des moteurs dual fuel, notamment en ce qui concerne le choix de l'instant d'injection et son impact sur les paramètres concurrents, tels que les émissions de NO_x et l'indice de cliquetis. Ces résultats présentent un intérêt significatif pour le domaine de la conception et de l'optimisation des moteurs, notamment en ce qui concerne le développement de systèmes énergétiques plus efficaces et plus respectueux de l'environnement.

• L'étude a révélé que l'augmentation de la quantité d'eau injectée dans le moteur dual fuel a des effets significatifs sur les variables clés, à savoir le rendement thermique, les émissions de NO_x et le cliquetis. Lorsque la quantité d'eau injectée augmente, la quantité de chaleur nécessaire à son évaporation augmente également. Comme cette évaporation nécessite de l'énergie, il y a une perte d'énergie dans le processus de combustion qui réduit le rendement thermique du moteur. Cette diminution est le résultat direct de l'énergie prélevée dans le processus de combustion pour chauffer l'eau injectée. L'augmentation de la quantité d'eau a également un effet bénéfique sur les émissions de NO_x. En effet, la présence d'eau dans la chambre de combustion réduit la température maximale, ce qui diminue la formation de NO_x. En outre, l'injection d'eau favorise l'homogénéité du mélange, ce qui réduit la probabilité du cliquetis. Cependant, il est important de noter qu'un excès d'eau peut avoir des effets négatifs sur la combustion, tels qu'une combustion incomplète et une augmentation des émissions d'hydrocarbures imbrûlés. C'est pourquoi il est essentiel d'optimiser la quantité d'eau injectée et l'instant d'injection afin de maximiser les avantages et de minimiser les inconvénients liés à l'utilisation d'un moteur dual fuel.

D'autre part, il faut noter que la diminution de la chaleur globale dans le cylindre, qui est partiellement utilisée pour l'évaporation de l'eau, a un impact direct sur la température dans la chambre de combustion, comme le montre la Figure 5.4. En effet, cette baisse de température entraîne une réduction significative de la production de NO_x, qui est directement liée à la température. Cependant, il est également important de noter que la diminution de la température et du rendement thermique s'accompagne avec une diminution de la pression interne dans la chambre de combustion. La Figure 5.6 montre que cette diminution de la pression maximale est d'environ 3% et 8% lors de l'utilisation d'un combustible pilote contenant 7% et 15% d'eau, respectivement. Tous ces facteurs interagissent pour provoquer une diminution de l'indice de cliquetis. En effet, les conditions deviennent moins favorables à l'auto-inflammation, ce qui réduit la probabilité de cliquetis.

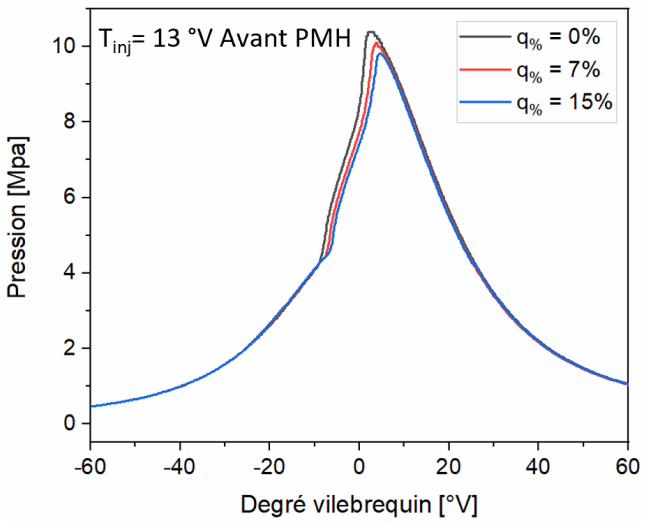


FIGURE 5.6 – Variations de la pression dans le cylindre en fonction de la fraction d'eau dans l'émulsion.

Afin de démontrer l'influence de la fraction d'eau dans l'émulsion sur les émissions d'un moteur dual fuel, l'analyse suivante est effectuée.
La Figure 5.7-a montre une légère augmentation des HC en fonction de l'augmentation de la quantité d'eau introduite dans la chambre de combustion par l'injection pilote. Au moment de l'auto-inflammation du carburant pilote, la quantité de carburant gazeux dans le cylindre est maximale. Au fur et à mesure que la flamme se propage vers l'extérieur à partir des zones initiales d'auto-inflammation, le combustible non brûlé commence à diminuer rapidement. Lorsque la quantité d'eau introduite augmente, le taux de dégagement de chaleur instantané diminue et la vitesse de combustion ralentit. Par conséquent, le taux de consommation du combustible gazeux devient plus lent, ce qui entraîne une légère augmentation des HC.

L'augmentation des HC peut être due à une réduction de la température de combustion résultant de l'évaporation de l'eau, ce qui peut entraîner une combustion incomplète des hydrocarbures. Elle peut également être due à une augmentation de l'espace libre entre les molécules de carburant, ce qui peut entraîner une réduction de l'efficacité de la combustion de la quantité de carburant pilote.

Les Figures 5.7-b et 5.7-c montrent une diminution de CO et de CO_2 en fonction de l'augmentation de la quantité d'eau introduite dans le cylindre. Le processus de formation du CO dans la chambre de combustion implique deux réactions principales : l'oxydation directe des hydrocarbures en CO et la réduction du CO_2 pour former du CO. L'injection d'eau dans la chambre de combustion a plusieurs effets sur ces réactions. Tout d'abord, l'eau vaporisée absorbe une partie de la chaleur de la combustion, ce qui abaisse la température dans la chambre de combustion et ralentit les réactions qui conduisent à la formation de CO. En outre, l'eau vaporisée peut réduire la concentration d'oxygène dans la chambre de combustion, ce qui réduit la réaction d'oxydation directe du combustible en CO.

L'ajout d'eau dans la chambre de combustion réduit la quantité de CO_2, bien que la relation entre la quantité d'eau et la quantité de CO_2 produite soit plus complexe que celle entre la quantité d'eau et la quantité de CO produite. L'ajout d'eau peut réduire la quantité de CO_2 pour plusieurs raisons :

• Dilution de l'air : Lorsque de l'eau est injectée dans la chambre de combustion, elle se vaporise instantanément en raison de la température élevée dans la chambre de combustion. Cela crée un mélange de vapeur d'eau et d'air dans la chambre de combustion, ce qui peut diluer l'air. Lorsque ce mélange "air-vapeur d'eau" est mélangé au carburant, la combustion peut être moins efficace, ce qui peut réduire la quantité de CO_2 produite.

• Refroidissement de la chambre de combustion : L'ajout d'eau dans la chambre de combustion peut réduire la température de cette dernière. Une température plus basse peut ralentir la réaction de combustion et donc réduire la quantité de CO_2.

• Réduction de l'oxydation des hydrocarbures : L'eau peut également réduire la quantité d'oxygène disponible pour l'oxydation des hydrocarbures, ce qui peut réduire la quantité de CO_2 produite.

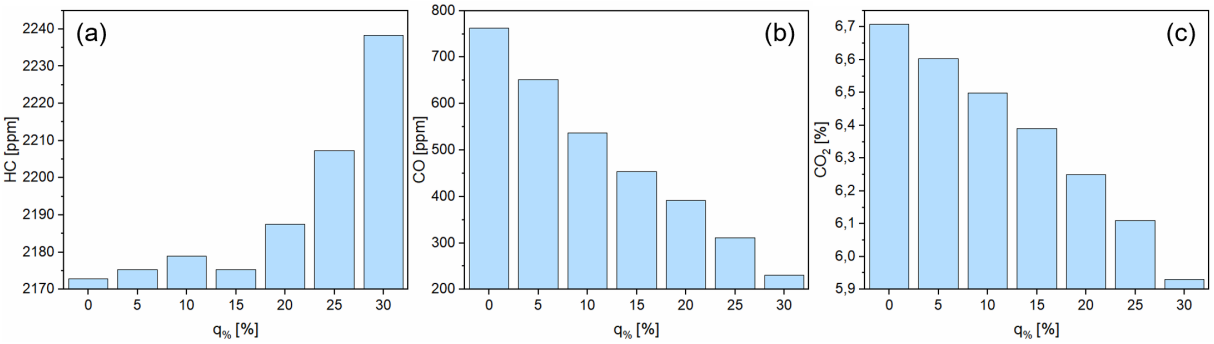


FIGURE 5.7 – Variations de : (a) HC, (b) CO, (c) CO_2 en fonction de $q_{\%}$.

2 Modélisation multi-fidélité

Dans une optimisation basée sur une modélisation typique, comme illustré dans la section précédente, le coût de calcul joue un rôle décisif dans la précision des résultats finaux, mettant en évidence un compromis clair entre coût et précision. Afin de contourner cette interdépendance entre le coût de calcul et la précision, il est nécessaire de développer des méthodologies innovantes de modélisation qui améliorent la précision sans augmenter de manière significative le coût de calcul. Cette section présente le développement d'une nouvelle approche de modélisation multi-fidélité, où deux modèles, caractérisés par des coûts de calcul et des précisions différents, sont combinés. Dans un premier temps, le contexte général de cette modélisation ainsi que les principales études existantes traitant ce volet sont détaillés. Par la suite, le développement de cette approche est mis en œuvre suivant plusieurs étapes.

2.1 Contexte général

Face aux exigences de précision des prédictions, les simulations haute-fidélité coûteuses doivent être réalisées, ce qui complique la modélisation malgré la puissance de traitement disponible actuellement. Devant cette réalité, la modélisation multi-fidélité (MF) apparaît comme une solution prometteuse qui prend en compte plusieurs sources de données et niveaux de fiabilité, en trouvant un compromis entre la haute précision et le coût élevé des modèles haute-fidélité (HF) d'une part, et la précision moindre et le faible coût des modèles basse-fidélité (BF) d'autre part.

Les modèles multi-fidélités sont classés selon trois méthodes principales. La première c'est la méthode basée sur la fonction d'échelle [229], qui utilise une fonction pour mettre en relation les sorties des modèles à basse et haute-fidélité. La fonction de mise à l'échelle peut être une fonction mathématique [230] ou une fonction établie à l'aide des techniques d'apprentissage automatique [231]. Cette fonction est utilisée pour corriger les prédictions du modèle basse-fidélité afin de mieux correspondre aux prédictions du modèle haute-fidélité. Elle est souvent utilisée lorsque les modèles basse et haute-fidélité ont des structures similaires mais des niveaux de détails ou de précision différents [232].

Cette mise à l'échelle est assurée principalement par trois types de fonction. La mise à l'échelle multiplicative, où la sortie du modèle basse-fidélité est multipliée par un facteur constant déterminé en fonction d'un ensemble de paires d'entrées-sorties obtenues à partir du modèle haute-fidélité [233]. La mise à l'échelle additive [234], pour laquelle une valeur constante est ajoutée à la sortie du modèle basse-fidélité. La mise à l'échelle hybride [235], où les deux types susmentionnés sont utilisés simultanément dans le but d'affiner la sortie du modèle basse-fidélité.

La deuxième méthode est basée sur la cartographie spatiale [236], utilisant une fonction de correspondance pour transformer l'espace d'entrée du modèle basse-fidélité en espace d'entrée du modèle haute-fidélité. Les entrées correspondantes sont ensuite utilisées comme entrées du modèle haute-fidélité pour obtenir une meilleure prédiction. Cette méthode est souvent utilisée lorsque les modèles basse et haute-fidélité ont des structures différentes et dans l'impossibilité de comparer directement leurs résultats [237].
La troisième méthode est le Cokrigeage [238], qui suppose que la relation entre les entrées et les sorties des modèles basse et haute-fidélité est un processus Gaussien. Dans le cadre de cette méthode, Le Gratiet et al. [239] ont prédit les résultats du modèle multi-fidélité avec une moyenne pondérée des prédictions faites par les modèles basse et haute-fidélité, où les poids de la pondération sont déterminés en fonction de la covariance entre les deux modèles.

Tous ces types de modélisation multi-fidélité ont donné la possibilité aux chercheurs pour développer des méthodologies innovantes contrôlées principalement par les techniques de construction des modèles basse et haute-fidélité ainsi que par la manière d'assurer la liaison entre ces deux modèles [240].

Dans cette section, une nouvelle approche pour la modélisation multi-fidélité est développée. L'objectif principal est de fournir une méthode de modélisation multi-fidélité largement applicable dans le domaine de l'ingénierie. Cette approche commence par la construction du modèle BF, qui est ensuite testé avec différentes méthodes de modélisation afin d'identifier les zones où- il ne parvient pas à modéliser avec précision. Une exploration du plan d'expérience basée sur le modèle BF est également réalisée pour détecter les positions des minimums et des maximums. Cette étape d'analyse de zone est cruciale selon l'approche proposée ; elle sert de base pour la génération du plan d'expérience initial propre au modèle HF. Une boucle itérative pour le raffinement du modèle MF est maintenue active pour assurer la convergence finale. Pour guider efficacement la construction du modèle MF, l'approche combine les informations issues de la correction du modèle BF avec l'apprentissage fourni par le modèle HF d'une part, et les informations délivrées par le méta-modèle HF d'autre part, selon une pondération minutieusement étudiée.

Ensuite, l'approche de modélisation multi-fidélité développée est mise en œuvre avec deux niveaux de fidélité définis par des simulations numériques totalement et partiellement convergentes pour les modèles HF et BF, respectivement. L'objectif final est de modéliser l'impact du taux de compression, de l'instant d'injection pilote et du taux de recirculation des gaz (EGR) sur les performances, le cliquetis et les émissions polluantes dans un moteur dual fuel caractérisé par un enrichissement élevé en hydrogène. Enfin, une optimisation multi-objectifs robuste est réalisée sur le modèle final pour sélectionner les conditions de fonctionnement optimales en fonction de certaines fonctions objectives visant à maximiser les performances et à minimiser les émissions polluantes tout en évitant le cliquetis.

2.2 Développement de l'approche

La méthodologie proposée dans ce travail repose sur la fonction d'échelle pour laquelle une correction additive entre les deux modèles HF et BF est utilisée (*additive scaling-function-based multi-fidelity surrogate modeling*), comme il sera expliqué par la suite.
Comme illustré dans l'organigramme de la Figure 5.8, la convergence sur le modèle basse-fidélité est nécessaire avant le passage à la suite de l'approche. Cette dernière consiste à la construction du modèle haute-fidélité qui sera la clé pour le modèle multi-fidélité global. Cette séquence est indispensable étant donné que le modèle haute-fidélité est généré initialement avec des échantillons en fonction des résultats du modèle basse-fidélité. Cette chronologie est résumée par les étapes suivantes :

• Étape 1 : Génération du plan d'expérience pour le modèle basse-fidélité ($\mathrm{DOE_{BF}}$) et construction de son méta-modèle final après raffinement du plan d'expérience.
• Étape 2 : Recherche des minimums, maximums, et zones de perturbations du modèle basse-fidélité.
• Étape 3 : Génération du plan d'expérience du modèle haute-fidélité, en fonction des résultats

de l'étape 2.

• Étape 4 : Construction du modèle multi-fidélité initial.

• Étape 5 : Raffinement du modèle multi-fidélité, considérant des nouveaux points dans le plan d'expérience du modèle haute-fidélité.

La partie suivante traite les principales étapes de la stratégie développée dans le cadre de ce travail, en expliquant les différentes parties originales qui donnent à cette approche sa spécificité par rapport aux autres approches existantes dans la littérature.

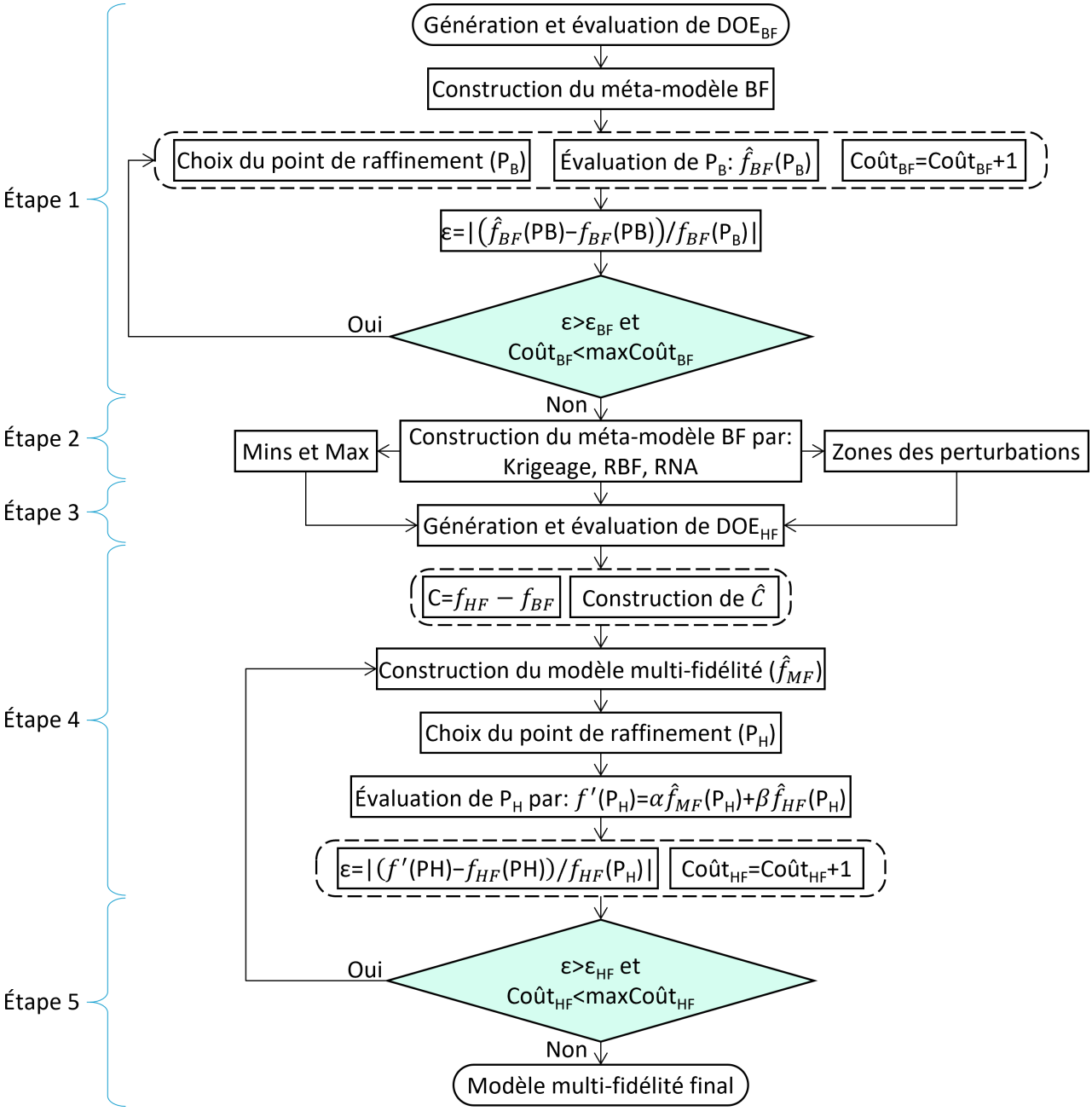


FIGURE 5.8 – Organigramme de la stratégie de la modélisation MF proposée.

A- Plan d'expérience BF initial

Dans un premier temps le plan d'expérience propre au modèle basse-fidélité est généré à l'aide de l'algorithme statistique optimal [223] (LHD-optimal : *Latin Hypercube Design optimal*), qui minimise la plus grande distance entre les points du plan d'expérience (critère min-max distance), dans le but de garantir une couverture uniforme des différentes régions de l'espace de décision. Après la création du plan d'expérience, la création du méta-modèle basse-fidélité initial aura lieu.
Une boucle itérative pour le raffinement de ce modèle est nécessaire comme indiqué sur le diagramme de la Figure 5.8. L'ajout d'un nouveau point (P_B) est contrôlé par le critère de maximisation de la distance minimale (max-min distance) dans le but d'améliorer la qualité du plan d'expérience en termes de couverture de l'espace des variables avec une bonne exploration [227]. La boucle itérative s'arrêteras si l'une des deux conditions est satisfaite ;

- La convergence du modèle basse-fidélité qui vise une erreur minimale entre le méta-modèle et le modèle réel.
- L'atteinte du coût maximal d'évaluation par le modèle basse-fidélité réel.

Après création du méta-modèle basse-fidélité, le passage à l'étape 2 susmentionnée aura lieu. Cette étape est subdivisée en deux parties :

• La recherche des minimums et maximums en utilisant l'algorithme PSO (*Particle Swarm Optimization*) afin de déterminer la position des différents minimums et maximums globaux et locaux [241].
• La caractérisation du modèle basse-fidélité déterminant les zones des perturbations. Cette tâche est assurée par une stratégie d'apprentissage inspirée du principe de la requête par comité [242]. Le but de cette partie est de sélectionner les échantillons les plus significatifs en termes d'information pour le méta-modèle. Ces échantillons sont généralement les plus susceptibles de causer un désaccord entre les modèles employés. Pour une analyse correcte, l'approche développée dans ce travail contrôle cette deuxième partie par plusieurs étapes, procédant comme suit :

- L'entraînement d'un comité de modèles multiple ; RBF [224], Krigeage [243], RNA [244], sur le plan d'expérience finale propre au modèle basse-fidélité résultant de l'étape 1 citée précédemment, comme l'indique la Figure 5.9-a.
- L'utilisation du comité pour faire la prédiction sur un autre ensemble de données (Figures 5.9-b,c,d).
- Le calcul du désaccord entre les prédictions des modèles, qui est illustré dans cette démarche par l'erreur absolue maximale relative ($RMAE$), comme l'indique l'équation 5.5.

$$RMAE_i = \frac{1}{STD} max|y_j - \hat{y}_j|, i = 1, ..., N, j = 1, 2, 3 \tag{5.5}$$

  Avec N la taille de l'ensemble prédis par le comité, j le compteur pour les modèles du comité.
- La sélection des échantillons les plus susceptibles de provoquer un désaccord entre les

modèles, qui sont définis par les échantillons pour lesquels les prédictions des modèles sont les plus différentes, comme l'illustre la Figure 5.9-e.

– Annoter les zones de perturbation sélectionnées et les considérées pendant la génération du plan d'expérience propre au modèle haute-fidélité.

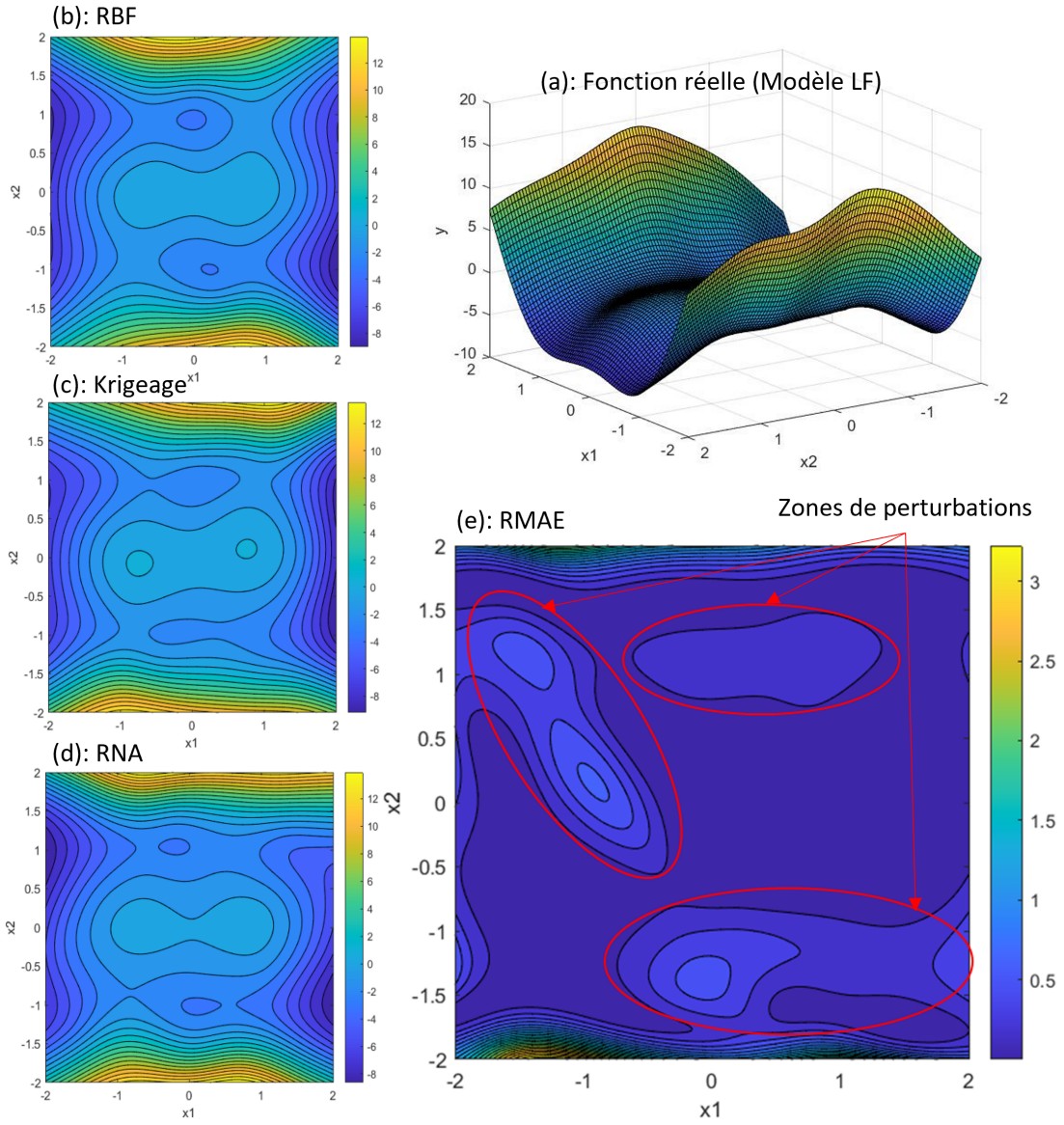


FIGURE 5.9 – Caractérisation des zones pour le modèle BF.

B- Plan d'expérience HF initial

Après la convergence du modèle basse-fidélité et la détermination des zones de perturbation ainsi que les positions des minimums et des maximums, la génération du plan d'expérience propre au modèle haute-fidélité aura lieu en fonction de ces conditions comme indiqué dans l'algorithme de la Figure 5.10. La génération du plan d'expérience propre au modèle haute-fidélité est basée principalement sur la minimisation d'une distance critique (D). Cette minimisation a pour but :

• La minimisation de la distance maximale entre les échantillons, comme exigé par le principe

du LHD-optimal, assurant le maximum d'exploration dans le plan d'expérience.
• La minimisation de la distance minimale entre les MINs – MAXs et les échantillons du plan d'expérience, dans le but de générer un plan d'expérience le plus proche aux minimums et aux maximums, vue qu'ils sont considérés comme des points critiques pour la méta-modélisation.
Une pénalité de la distance critique (D) est appliquée lorsque des échantillons générés ne se trouvent pas dans les zones de perturbation fixées précédemment. Ceci vise à inciter l'algorithme d'optimisation à explorer autant que possible les zones de perturbation où la méta-modélisation est relativement difficile.

Algorithme

Inputs: DOE_{LF}, nombre d'échantillons pour le DOE_{HF}, MINs et MAXs méta modèle LF, limites zones des perturbations
Output: DOE_{HF}
1: **while** $D > D_{min}$
2: Génération d'un DOE_{HF}
3: Calcul de la distance minimale entre les points (D_1)
4: Calcul de la distance maximale entre les points et les MINs et MAXs (D_2)
5: Calcul d'une distance critique $D = (1/D_1) + D_2$
6: **if** un point ∉ zone de perturbation
Pénalité de D
7: **end if**
8: **end**

FIGURE 5.10 – Algorithme de génération du plan d'expérience du modèle HF.

Après la génération du plan d'expérience propre au modèle haute-fidélité, la création du modèle multi-fidélité initial aura lieu. Dans cette étude, une technique basée sur une fonction d'échelle additive [245] est utilisée. Selon cette dernière, le facteur d'échelle δ est défini par la différence entre les résultats du modèle HF et BF pour les échantillons du plan d'expérience HF, comme le défini l'équation 5.6. Par la suite, un méta-modèle pour ce facteur d'échelle est créé ($\hat{\delta}$) pour tout le plan d'expérience utilisant l'outil RBF [246]. Le modèle multi-fidélité basé sur la fonction d'échelle additive est représenté par l'équation 5.7.

$$\delta = f_{HF} - f_{BF} \tag{5.6}$$

$$\hat{f}_{MF} = \hat{f}_{BF} + \hat{\delta} \tag{5.7}$$

C- Raffinement du modèle multi-fidélité

Dans le but d'éliminer l'effet du type de méta-modèle sur les résultats finaux, la technique de LOOCV (*Leave One Out Cross Validation*) [225] est utilisée. Avec cette technique, les paramètres du méta-modèle sont fixées de façon à éliminer les erreurs dues à son type.
Afin d'assurer une bonne précision du modèle, l'approche exige un raffinement du plan d'expérience pour prendre en considération des nouvelles zones non explorées. Pour cette raisons le choix du nouveau point de raffinement (P_H) est primordial utilisant le critère (max-min dis-

tance).
Après la fixation du point de raffinement, son évaluation est effectuée avant de le considérer dans la création du modèle multi-fidélité. Cette approche propose une stratégie d'évaluation basée sur une pondération entre le modèle multi-fidélité créé ($\hat{f}_{MF}$) et le méta-modèle haute-fidélité ($\hat{f}_{HF}$) en utilisant l'équation 5.8.

$$f'(\mathrm{P_H}) = \alpha \hat{f}_{MF}(\mathrm{P_H}) + \beta \hat{f}_{HF}(\mathrm{P_H}) \tag{5.8}$$

Le choix de α (Alpha) et β (Beta) est important pour le contrôle de la pondération entre les deux modèles d'évaluation. Pour cette raison, une formulation de ces deux paramètres en fonction de l'erreur du modèle multi-fidélité est proposée par l'équation 5.9 et qui est illustrée par la Figure 5.11.

Dans un premier temps l'erreur est importante, donc la convergence repose principalement sur le modèle basse-fidélité et la correction via le modèle multi-fidélité. Par la suite, l'erreur devient faible, dans ce cas la stratégie proposée fait plus de confiance au modèle haute-fidélité en gardant une faible pondération avec le modèle multi-fidélité.
Avec cette stratégie de pondération, la modélisation peut répondre à l'enjeu : convergence rapide, coût de calcul réduit, précision élevée.

$$\begin{cases} \alpha = \sum_1^2 a_i exp(b_i.erreur) \\ \beta = 1 - \alpha \end{cases} \tag{5.9}$$

Les paramètres a_1, b_1, a_2, b_2 sont choisis dans leurs intervalles [0,8 ;1,1], [-0,9 ;-0,5], [-0,01 ;-0,004], [-50 ;-200], respectivement.

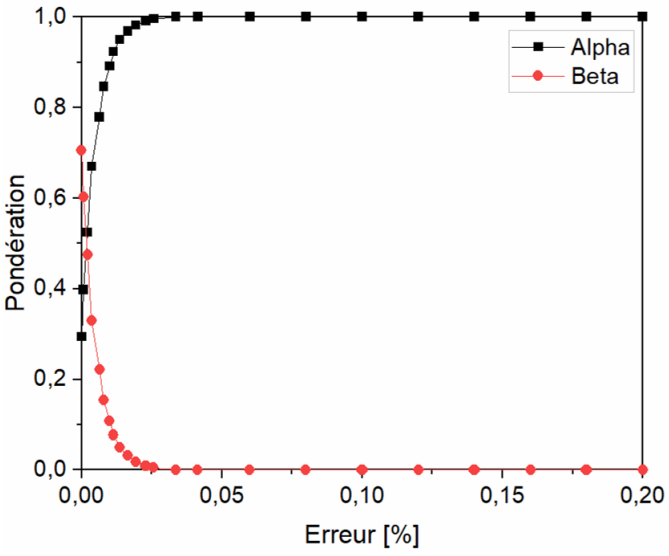


FIGURE 5.11 – Variations des valeurs de pondération α et β.

Le choix des paramètres de régression (a_i et b_i) est une étape clé pour augmenter la précision

et réduire le coût de calcul du modèle multi-fidélité. Comme ce processus de pondération entre les modèles BF et HF est évoqué pour la première fois dans ce travail, une technique ingénieuse est proposée dans le but de recommander des plages de variation pour ces paramètres de régression.
Pour définir les intervalles de variation de ces paramètres, 15 fonctions mathématiques (*Benchmarks*) ont été utilisées. Pour chaque fonction, un coût maximal (un nombre maximal d'évaluations pour les modèles BF et HF) et une erreur critique ont été fixés. Au départ, des intervalles étroits ont été utilisés, puis progressivement élargis en créant à chaque fois un modèle multi-fidélité. L'élargissement des intervalles s'arrête si le coût maximal est consommé sans atteindre l'erreur critique.

Pour sélectionner les valeurs exactes de ces paramètres à l'intérieur de leurs fourchettes, une optimisation globale est effectuée. Cette étude d'optimisation vise la minimisation d'une erreur critique calculée en additionnant les erreurs du modèle pour chaque *benchmark*. Au final, l'optimiseur donne les quatre paramètres (a_1, b_1, a_2, b_2) pour lesquels la somme des erreurs des 15 modèles est la plus faible. Une comparaison des erreurs est ensuite effectuée pour chaque *benchmark* en termes d'erreur commise avec les quatre paramètres choisis par l'optimisation globale (expliquée ci-dessus) et l'erreur commise avec les quatre paramètres choisis pour la minimisation de l'erreur de chaque *benchmark* séparément des autres. Les résultats trouvés, présentés dans la Figure 5.12, confirment que l'optimisation globale s'est avérée une combinaison des quatre paramètres (cas 2) assurant une erreur très proche de l'erreur spécifique à chaque fonction (cas 1). En d'autres termes, les quatre paramètres avec lesquels l'erreur est minimale sont pratiquement les même pour toutes les fonctions utilisées. Sur la base de cette constatation, cette combinaison recommandée de paramètres de régression est choisie pour la suite du travail.

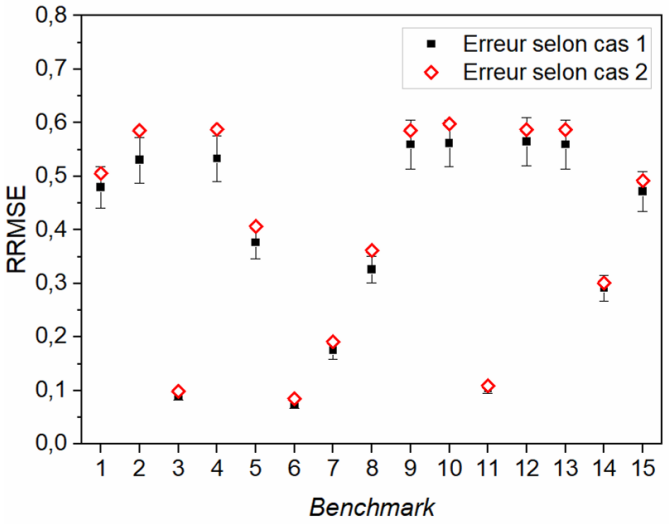


FIGURE 5.12 – Analyse de l'erreur de modélisation pour les deux méthodes d'optimisation pour la détermination de a_i et b_i.

2.3 Optimisation basée sur le modèle développé

L'optimisation basée sur un méta-modèle fait référence au processus d'optimisation d'un modèle basé sur les prédictions d'un autre modèle, généralement plus complexe ou plus coûteux en termes de temps de calcul. L'idée est d'utiliser les prédictions du méta-modèle comme substitut du modèle plus complexe, réduisant ainsi le coût de calcul de l'optimisation tout en fournissant des résultats précis.

Dans cette section, l'optimisation OFF-line est adoptée à cause de la nature du problème considéré par la suite dans l'application de la stratégie développée. Le but final du travail est de développer un modèle prédictif solide dans tous les points du plan d'expérience, par la suite l'optimisation assure la recherche d'un optimum selon certaines fonctions objectives. Dans l'application considérée dans ce travail, l'optimisation traite plusieurs fonctions objectives. Ce nombre élevé des fonctions objectives exige leur manipulation selon des pondérations glissantes en fonction du cas considéré. Une explication plus concrète aura lieu dans la partie résultats en traitant spécifiquement le cas d'application.
La procédure d'optimisation est traitée selon trois étapes principales :

• Construction du méta-modèle : Les données d'apprentissage sont utilisées pour construire un modèle multi-fidélité comme expliqué précédemment.
• Optimisation OFF-line à l'aide du méta-modèle : Le méta-modèle est utilisé pour guider le processus d'optimisation en l'utilisant comme substitut du modèle réel dans un algorithme d'optimisation.
• Validation de la solution : La solution finale obtenue par le processus d'optimisation est validée en évaluant le modèle réel au point optimal, afin de s'assurer que la solution est précise et fiable.

L'approche d'optimisation OFF-line basée sur la modélisation multi-fidélité développée dans le cadre de cette section est destinée principalement aux cas d'étude d'ingénieries pour lesquels les incertitudes des données sont incontournables. Un constat qui a exigé l'utilisation des techniques d'optimisation robuste capables de prendre en considération les différentes perturbations lors de la recherche de l'optimum.
L'algorithme d'optimisation multi-objectifs Robust-NSGA II [247] est utilisé dans ce travail afin de prendre en compte les incertitudes et les erreurs dans les données d'entrées pour produire des solutions qui sont à la fois performantes et robustes. L'objectif final est de produire des solutions qui peuvent faire face à des variations imprévues sans sacrifier trop les performances exigées. L'utilisation de cette approche d'optimisation recommande le choix d'un intervalle d'incertitude pour la fixation des perturbations permises pour l'optimiseur pendant la recherche de la solution.

2.4 Validation de l'approche

Dans le but de valider correctement l'approche proposée dans ce travail en termes de coût de calcul, de précision et de robustesse, plusieurs fonctions de validation sont utilisées avec des dimensions différentes comme montré dans le Tableau 5.5, afin de tester la robustesse de

l'approche proposée.

TABLE 5.5 – Fonctions de validation.

Fonctions	
Fonction [1] Six-hump camel-back (SC) d=2	$f(x_1,x_2) = 4x_1^2 2{,}1x_1^4 + x_1^6/3 + x_1x_2 - 4x_2^2 + 4x_2^4$ $y_h = f(x_1,x_2)$ $y_l = f(0{,}7x_1, 0{,}7x_2) + x_1x_2 + sin(x_1) + 2x_2 + sin(x_2) + x_1$ $x_1 \in [-2;2], x_2 \in [-2;2]$
Fonction [2] 3D Rosenbrock d=3	$f(x_1,x_2,x_3) = \sum_{i=1}^{2} [100(x_i^2 - x_{i+1})^2 + (x_i - 1)^2]$ $y_h = f(x_1,x_2,x_3)$ $y_l = 90(x_1^2 - x_2)^2 + 1,1(x_3 - 1)^2 + 100(x_2^2 - x_3)^2 + 1,1(x_2 - 1)^2$ $x_i \in [-2{,}048; 2{,}048], i = 1,2,3$
Fonction [3] Dixon et Price d=4	$f(x_1,x_2,x_3,x_4) = (x_1 - 1)^2 + \sum_{i=2}^{n} i(2x_i^2 - x_{i-1})^2$ $y_h = f(x_1,x_2,x_3,x_4)$ $y_l = (x_1 - 1)^2 + \sum_{i=2}^{n} i(2x_i^2 - 0{,}75x_{i-1})^2$ $x_i \in [-10;10], i = 1,2,3,4$
Fonction [4] Borehole d=8	$f(x_1,...,x_8) = \frac{2\pi x_3(x_4 - x_6)}{ln(x_2/x_1)\left[1 + \frac{2x_7x_4}{ln(x_2/x_1)x_1^2x_8} + x_3/x_5\right]}$ $y_h = f(x_1,...,x_8)$ $y_l = 0{,}4f(x_1,...,x_8) + 0{,}07x_1^2x_8 + x_1x_7/x_3 + x_1x_6/x_2 + x_1^2x_4$ $x_1 \in [0{,}05; 0{,}15], x_2 \in [100; 50000], x_3 \in [63070; 115600],$ $x_4 \in [990; 1110], x_5 \in [63{,}1; 116], x_6 \in [700; 820], x_7 \in [1120; 1680],$ $x_8 \in [9855; 12045]$

Afin de valider l'approche proposée, une étude comparative avec d'autre approches existantes dans la littérature est nécessaire. Cette comparaison permettra de mettre en avant la valeur ajoutée de cette approche. Pour montrer les points forts de cette approche, illustrés par la génération du DOE_{HF} en fonction des zones de perturbation et l'évaluation du point de raffinement par pondération, le choix des approches de comparaison est important pour montrer l'utilité et l'importance de la méthodologie présentée dans cette section.
Les approches concernées par cette étude comparative sont définies comme suit :

• Approche 1 : La nouvelle approche développée.
• Approche 2 : Cette approche ne tient pas compte des zones de perturbations. Le DOE_{HF} est généré utilisant le même principe utilisé par Le Gratiet et al. [248]. Après la convergence du méta-modèle basse-fidélité, la création du modèle multi-fidélité aura lieu et le raffinement est assuré par la suite sans relation de pondération.
• Approche 3 : Approche développée par Zhou et al. [249]. Elle est basée sur la technique de Cokrigeage hiérarchique (*Hierarchical Cokriging*) proposée par Kennedy et al. [250].
• Approche 4 : Dans cette stratégie, Gano et al. [235] font les générations des deux plans d'expérience basse et haute-fidélité simultanément en utilisant l'algorithme LHD. Après construction du modèle multi-fidélité, le raffinement est contrôlé par le critère max-min distance.

Dans le cadre de cette étude d'analyse visant la validation de l'approche développée, le Tableau 5.6 résume les principales conditions initiales pour la modélisation.

TABLE 5.6 – Paramètres de réglage de modèle multi-fidélité.

Nombre d'échantillons		Erreur maximale		Coût maximal	
DOE_{BF}	DOE_{HF}	ϵ_{BF}	ϵ_{MF}	$maxCoût_{BF}$	$maxCoût_{HF}$
35	15	0,5%	0,5%	80	80

Pour avoir une étude comparative crédible et fiable entre les approches, la prise en considération de la relativité entre les coûts d'évaluation pour chaque modèle est nécessaire. Dans ce cadre et d'après la littérature, deux catégories qui reflètent la nature de cette relativité peuvent être soulevées. La première est due à la difficulté causée principalement par les moyens (expérimentation vs simulation numérique), tandis que la deuxième est due aux temps (simulation 2D vs simulation 1D).
Selon cette relativité entre les coûts des fidélités, l'étude comparative considère trois cas de comparaison différents et qui sont définis comme suit :

• Cas 1 : Le coût d'évaluation n'est pas pris en termes de temps. La comparaison est faite entre les sommes des nombres d'évaluation ($Coût_{BF}$ + $Coût_{HF}$).
• Cas 2 : Le temps d'évaluation basse-fidélité est négligeable devons celui de la haute-fidélité. La comparaison est faite entre les temps consommés par l'évaluation haute-fidélité ($Coût_{HF} \times t_{HF}$)
• Cas 3 : Le temps d'évaluation basse-fidélité est comparable avec celui de la haute-fidélité. La comparaison est faite entre les temps consommés par l'évaluation des deux fidélités ($Coût_{BF} \times t_{BF}$ + $Coût_{HF} \times t_{HF}$). Ce cas considère qualitativement que l'évaluation basse-fidélité nécessite un cinquième du temps nécessaire pour l'évaluation haute-fidélité ($t_{BF} = (1/5).t_{HF}$). Ce qui exige la comparaison de ($Coût_{HF} \times (6/5).t_{HF}$).
t_{BF} et t_{HF}, sont les temps nécessaires pour l'évaluation basse-fidélité et haute-fidélité, respectivement.

Le Tableau 5.7 résume les principaux résultats trouvés illustrés par le nombre d'évaluation de chaque fidélité selon l'approche adoptée et la fonction de validation utilisée. Les résultats montrent un nombre d'appel au modèle haute-fidélité par l'approche 1 beaucoup plus inférieur par rapport aux autres approches.

TABLE 5.7 – Coût du basse et haute-fidélité pour les fonctions de validation selon les différentes approches.

Fonctions	Approche 1		Approche 2		Approche 3		Approche 4	
	$Coût_{BF}$	$Coût_{HF}$	$Coût_{BF}$	$Coût_{HF}$	$Coût_{BF}$	$Coût_{HF}$	$Coût_{BF}$	$Coût_{HF}$
[1]	48	26	38	38	50	28	50	29
[2]	50	25	39	40	54	30	56	32
[3]	56	31	45	57	59	35	60	49
[4]	61	36	50	80	64	54	68	80

Les cartes représentées dans la Figure 5.13 représentent l'analyse comparative entre les coûts des différentes approches pour les quatre fonctions de validation selon le cas d'étude.

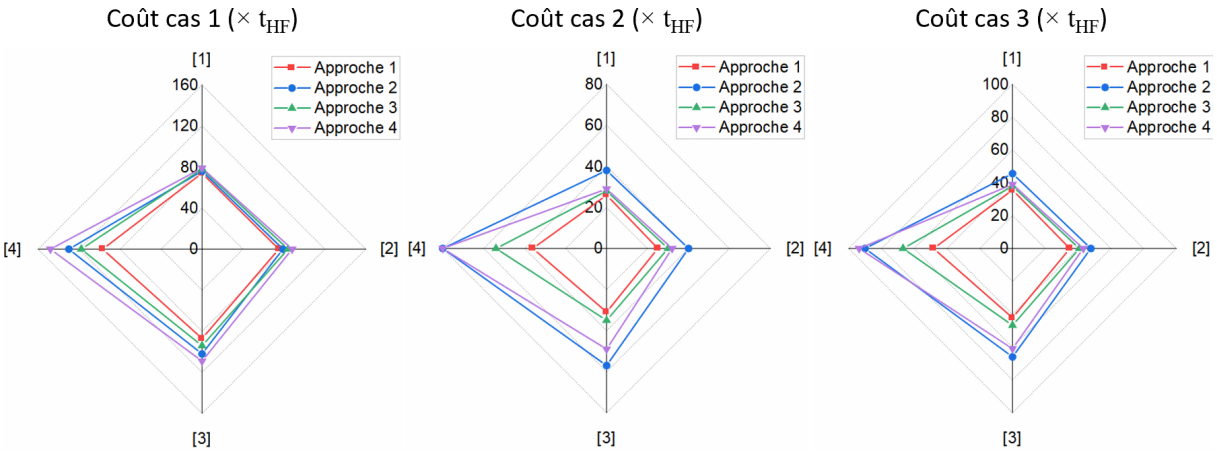


FIGURE 5.13 – Comparaison de coûts des approches pour les fonctions de validation pour chaque cas d'étude.

Les résultats présentés par la Figure 5.13 valident largement la nouvelle approche développée. Cela est confirmé par les trois cas de comparaison pour les quatre fonctions de validation, où la nouvelle approche atteint la précision requise avec un coût minimal par rapport aux trois autres approches. Cette efficacité est clairement apparente pour le cas 2, pour lequel le coût de l'approche 1 est largement inférieur par rapport aux autres notamment pour les dimensions élevées. Cela est justifié par la stratégie de modélisation expliquée précédemment qui repose sur l'investigation sur un modèle basse-fidélité totalement convergé pour déterminer les zones les plus susceptibles de causer des difficultés lors de la convergence du modèle haute-fidélité et aussi sur la stratégie de pondération qui améliore la convergence globale du modèle multi-fidélité. Ceci économise les ressources utilisées pour atteindre la précision requise.
Cette économie dans l'utilisation des ressources est garantie pour les trois cas d'étude selon les résultats trouvés. En effet, la Figure 5.14 résume le gain de l'approche 1 par rapport aux autres en termes de coût pour les trois cas d'étude selon les fonctions de validation.

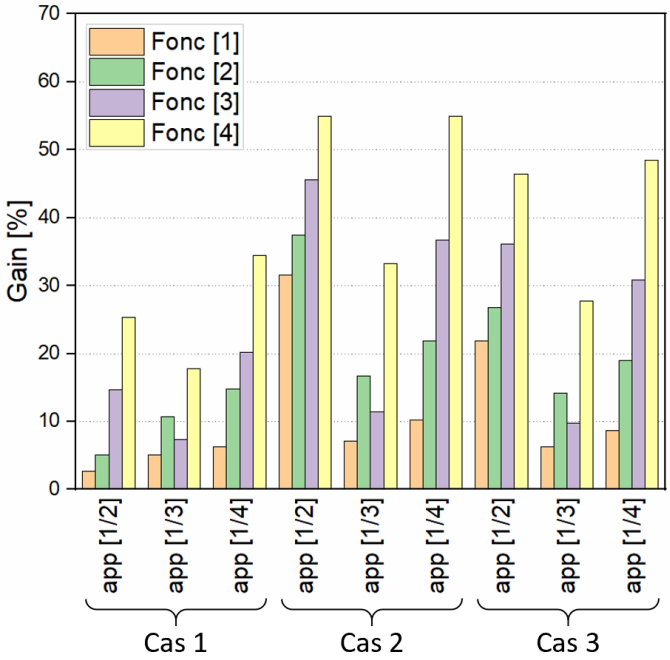


FIGURE 5.14 – Variation de gain de l'approche développée par rapport aux autres approches.

D'après la Figure 5.14, l'approche développée a pu économiser plus de 50% de ressources selon le cas d'analyse 2. En plus, son gain selon le cas 3 atteint 48,5% pour la fonction avec la plus grande dimension. Ces résultats affirment l'utilité de cette nouvelle approche spécialement pour les dimensions élevées. En plus, elle a prouvé une grande robustesse en termes de cas d'utilisation comme illustré par les résultats des cas 2 et 3. Cela permet l'utilisation de cette approche avec une grande fiabilité indépendamment de la relativité entre les fiabilités en termes de coût d'évaluation.
Dans le but de valider l'approche proposée de la façon la plus correcte, une analyse complémentaire est adoptée dans ce travail. Cette analyse vise la comparaison de plusieurs types d'erreur selon les approches définies précédemment. Le Tableau 5.8 défini les différentes erreurs utilisées dans cette partie de validation.

TABLE 5.8 – Définitions des erreurs de validation.

Erreur	**Définition**
Erreur quadratique moyenne relative ($RRMSE$)	$RRMSE = \frac{1}{STD}\sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \hat{y}_i)^2}$
Coefficient de détermination multiple (R^2)	$R^2 = \frac{(N\sum_{i=1}^{N} y_i\hat{y}_i - \sum_{i=1}^{N} y_i \sum_{i=1}^{N} \hat{y}_i)^2}{(N\sum_{i=1}^{N} \hat{y}_i^2 - (\sum_{i=1}^{N} \hat{y}_i)^2)(N\sum_{i=1}^{N} y_i^2 - (\sum_{i=1}^{N} y_i)^2)}$
Erreur absolue maximale relative ($RMAE$)	$RMAE = \frac{1}{STD}\max_{i=1,\dots,N} \lvert y_i - \hat{y}_i \rvert$
Écart-type (STD)	$STD = \sqrt{\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \bar{y}_i)^2}$

Notant que le $RRMSE$ et le R^2 indiquent la précision globale du modèle, et le $RMAE$ reflète la précision locale du modèle. Des valeurs basses de $RRMSE$ ou $RMAE$ ou des valeurs élevées

de R^2 correspondent à un modèle plus précis.
Le Tableau 5.9 résume les différents résultats des erreurs pour chaque approche selon les fonctions de validation.

TABLE 5.9 – Variations des erreurs pour chaque fonction de validation selon les approches.

Fonction	Type d'évaluation	Approches			
		1	2	3	4
[1]	$RMAE$	0,0621	0,0628	0,0638	**0,0561**
	$RRMSE$	**0,0116**	0,0177	0,0199	0,0185
	R^2	**0,9999**	0,9901	0,9930	0,9918
[2]	$RMAE$	0,1044	**0,0891**	0,1752	0,1966
	$RRMSE$	**0,0467**	0,1195	0,1492	0,1318
	R^2	0,9962	0,9915	**0,9999**	0,9903
[3]	$RMAE$	**0,0971**	0,2475	0,2029	0,2257
	$RRMSE$	**0,1193**	0,1778	0,2029	0,1878
	R^2	**0,9893**	0,9838	0,9815	0,9828
[4]	$RMAE$	**0,4326**	1,2015	0,8131	1,3411
	$RRMSE$	**0,1954**	0,6582	0,3027	0,5850
	R^2	**0,9868**	0,8684	0,9772	0,9433

• Les valeurs en noir gras représentent les meilleurs résultats.

En analysant les résultats présentés dans le Tableau 5.9 il est remarquable que, la nouvelle approche se caractérise par une précision globale et locale meilleur par rapport aux autres approches. Cette différence est plus apparente pour des problèmes de modélisation caractérisés par des dimensions élevées (fonction de validation 3 et 4), pour lesquelles les trois autres approches définies précédemment perdent leurs précisions.
Pour une analyse plus significative, une comparaison entre les moyennes et les écarts types des différentes erreurs des quatre fonctions de validation est faite, comme indiqué dans les Figures 5.15-a et 5.15-b, respectivement.

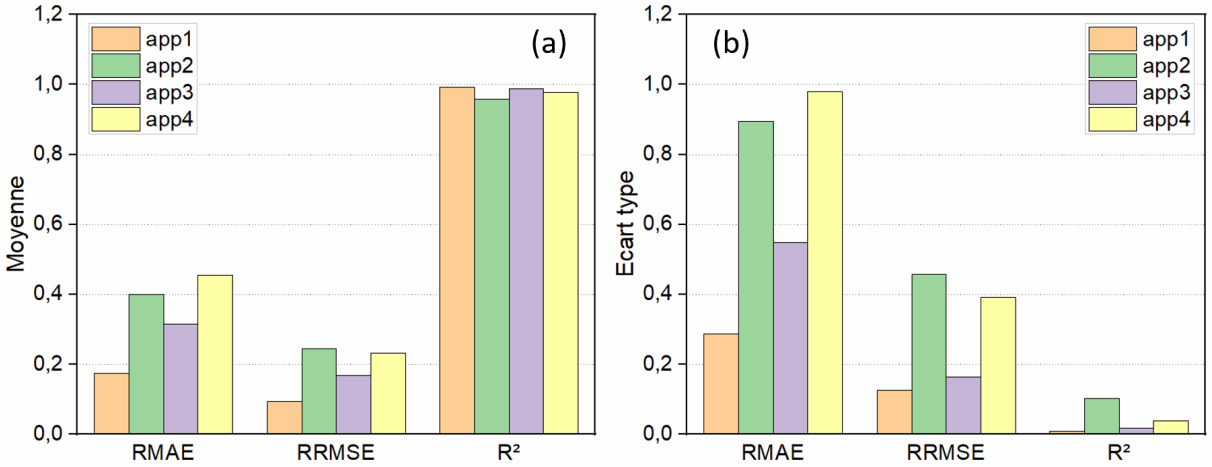


FIGURE 5.15 – Variation de : (a) la moyenne, (b) l'écart type des erreurs pour chaque approche.

La Figure 5.15-a confirme que les résultats de l'approche 1 sont les meilleurs par rapport aux autres en termes de précision globale et locale. Les plus mauvais résultats sont partagés entre les trois autres approches (2, 3, 4). D'après la Figure 5.15-b, l'approche 1 est caractérisée par l'écart type le plus faible pour les trois types d'erreur. Pour cette raison, elle est décrite par l'approche la moins influencée par le changement du type de problème modélisé.
En résumé, l'approche développée dans ce travail atteint les performances les plus élevées en termes de précision global et local et la plus grande robustesse pour tous les cas de test.

2.5 Application à l'optimisation d'un moteur dual fuel

Dans cette section, le cas d'étude est défini par le fonctionnement d'un moteur à combustion interne en mode dual fuel, avec le gazole comme carburant pilote et un mélange de gaz naturel et d'hydrogène (50% GN, 50% H_2 en termes d'énergie à l'entrée) comme carburant primaire. Le moteur utilisé est un moteur mono-cylindre AVL 5402 installé sur un banc d'essai au sein du laboratoire du DSEE d'IMT Atlantique. Il est conçu pour fonctionner à des vitesses élevées, allant de 0 à 4500 tr/min, ce qui lui permet de développer une puissance de 6 kW à 4500 tr/min. Ce banc d'essai comporte également une baie d'analyse pour mesurer les émissions polluantes, ainsi qu'un frein dynamométrique pour charger le moteur. Il est également équipé d'un système d'alimentation en gaz pour alimenter le moteur en mode dual fuel, et d'un analyseur pour mesurer la quantité de particules à l'échappement.
Le moteur AVL, dans ça configuration d'origine, est alimenté principalement par du gazole et refroidi par une circulation d'eau. Les caractéristiques techniques et géométriques clés du moteur sont résumées dans le Tableau 5.10.

TABLE 5.10 – Spécifications du moteur diesel AVL 5402.

Modèle	AVL 5402
Vitesse de rotation du moteur	1500 tr/min
Nombre de cylindre	1
Alésage	85,01 mm
Course	90 mm
Longueur de bielle	137 mm
Nombre de soupapes	4 (2 admissions, 2 échappements)
Taux de compression	17 :1
Cylindrée	511 cm^3
Ouverture soupape d'admission	360 °V
Fermeture soupape d'admission	554 °V
Ouverture soupape d'échappement	156 °V
Fermeture soupape d'échappement	357 °V

Pour une charge moteur de 90% de la pleine charge, le fonctionnement du moteur souffre d'un phénomène de cliquetis très fort avec un indice de cliquetis (équation 5.3) dépassant les 27 bar (IC=27,73 bar).

Ce point de fonctionnement est choisi pour effectuer une optimisation de fonctionnement dans le but d'amortir le cliquetis en gardant des performances élevées et des émissions faibles. En se basant sur la littérature des moteurs dual fuel, trois paramètres clés peuvent jouer un rôle important dans l'élimination du cliquetis et l'optimisation des performances et des émissions à savoir : le taux de compression, l'instant d'injection du carburant pilote, et la recirculation des gaz d'échappement (EGR). Comme expliqué précédemment, la modélisation des performances et des émissions est effectuée dans un premier temps à l'aide de l'approche de modélisation multi-fidélité développée et validée. Les intervalles de variation pour les trois paramètres d'entrée du modèle sont résumés dans le Tableau 5.11.

TABLE 5.11 – Intervalles de variations des variables de décisions.

Taux de compression (π_c)	Instant d'injection pilote (T_{inj})	Pourcentage d'EGR (EGR)
[16-18]	[5-30] °V Avant PMH	[0-40] %

Un calcul numérique sous Converge^{TM} est utilisé pour le modèle multi-fidélité. Dans ce cas, le niveau de convergence est pris comme critère de fidélité, où des simulations partiellement et totalement convergentes sont utilisées comme modèles basse et haute-fidélité, respectivement. Ces simulations sont caractérisées par un coût de calcul de 4h dans le cas basse-fidélité et 24h dans le cas haute-fidélité, ce qui induit un rapport de coût de (1/6) entre les deux.

Le code Converge^{TM} est conçu pour simuler avec précision la combustion de carburants tels que le gaz naturel et l'hydrogène. Les caractéristiques liées au maillage et aux sous modèles de

calcul (combustion, émissions, aérothermodynamique) ont été présentées précédemment dans le Chapitre 4. Les propriétés physiques du gazole sont représentées par le n-heptane (C_7H_{16}), et un mécanisme composé de 76 espèces et 464 réactions est utilisé pour les simulations afin de prendre en considération la combustion du mélange gazeux (GN-H_2) introduit comme carburant primaire [251].
Le Tableau 5.12 résume les différents modèles et paramètres utilisés pour les simulations HF et BF de la combustion en mode dual fuel.

TABLE 5.12 – Paramètres et modèles de simulation.

Type de simulation	Haute-fidélité (HF)	Basse-fidélité (BF)
Pas de temps initial	1e-07	5e-05
Pas de temps minimal	1e-08	1e-05
Pas de temps maximal	2,5e-05	2,5e-04
Limite maximale de CFL convection	1,0	3,0
Limite maximale de CFL diffusion	5,0	15,0
Limite maximale de CFL mach	50,0	80,0
Modèle d'injection	KH-RT	
Modèle de combustion	SAGE	
Mécanisme réactionnel	CHEMKIN-II	
Modèle de turbulence	RNG k-epsilon	
Modèle d'évaporation	Frossling	
Modèle de collision	NTC collision	
Modèle des émissions polluantes	Extended Zeldovitch NO_x, modèle Hiroyasu	

Le calcul se fait sur une portion d'un cylindre, qui est prise comme un cinquième de son volume total. Des interfaces périodiques ont été intégrées pour minimiser le temps nécessaire pour les calculs. Ce domaine comprend l'une des cinq buses d'injection du gazole.

Avant de commencer la création du modèle multi-fidélité, il est essentiel de valider l'outil numérique CFD (Converge^{TM}). La Figure 5.16-a présente une comparaison entre les résultats expérimentaux et numériques en termes de signaux de pression interne dans la chambre de combustion, où la concordance entre les deux est considérée comme acceptable avec une erreur de 3,69%. La Figure 5.16-b fournit une validation du modèle CFD en ce qui concerne les performances et les émissions du moteur. Les résultats de la simulation montrent un haut niveau de reproductibilité des résultats expérimentaux, avec seulement de légères différences principalement attribuées aux incertitudes des modèles physico-chimiques utilisés.

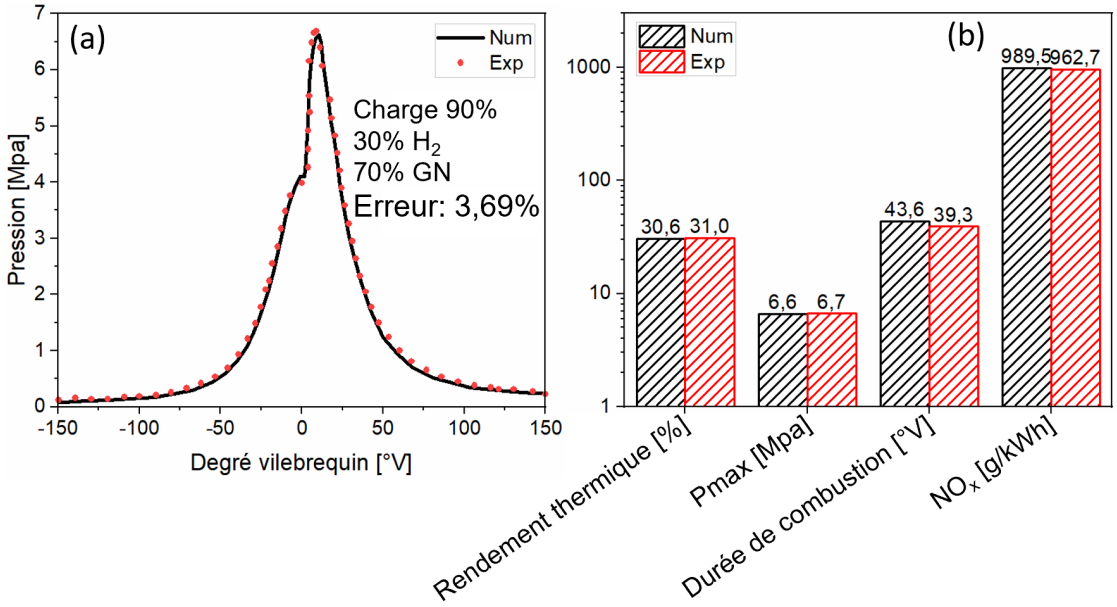


FIGURE 5.16 – Validation du modèle CFD en termes de : (a) signal de pression, (b) performances et émissions.

Le coût de calcul maximal est fixé à 60 et 100 pour les modèles haute et basse-fidélité, respectivement. Pour tester l'influence de la convergence totale du méta-modèle BF avant le passage à la construction du modèle MF, deux scénarios sont considérés en se basant sur l'erreur maximale du modèle BF. Le Tableau 5.13 définis les deux scénarios avec le coût de calcul final pour chaque modèle.

TABLE 5.13 – Paramètres de réglage du modèle multi-fidélité selon les scénarios adoptés.

	ϵ_{BF}	ϵ_{MF}	Coût_{BF}	Coût_{HF}	$\text{EQ_Coût}_{\text{HF}}$
Scénario 1	4%	0,5%	41	60	66,83
Scénario 2	0,5%	0,5%	73	49	61,16

L'influence de la convergence totale du modèle basse-fidélité est clairement démontrée à travers les résultats du Tableau 5.13. Dans le premier scénario l'erreur maximale sur le modèle basse-fidélité est tolérée à 4%, ce qui induit une augmentation de l'équivalant de coût de calcul haute-fidélité ($\text{EQ_Coût}_{\text{HF}}$ *) et une convergence finale du modèle multi-fidélité non satisfaites, vu que le modèle haute-fidélité a consommé sont coût maximal. Contrairement au deuxième scénario, où l'équivalant de coût de calcul haute-fidélité a diminué à cause de la diminution du coût de calcul du modèle haute-fidélité. Pour cette raison, le choix des erreurs maximales dans cette approche est très important afin d'assurer une précision maximale avec un coût de calcul faible.

∗. $\text{EQ_Coût}_{\text{HF}}$ est calculé en fonction de nombre d'évaluation des modèles BF et HF prenant en compte la relativité entre les coûts de calcul des deux modèles ($\text{EQ_Coût}_{\text{HF}} = \text{Coût}_{\text{HF}} + \text{Coût}_{\text{HF}} = \text{Coût}_{\text{HF}} + \frac{1}{6}\ \text{Coût}_{\text{HF}}$).

Après la modélisation, une optimisation robuste avec NSGA II-Robuste est appliquée sur le modèle construit en prenant une incertitude de 0,03 ($\zeta = 0,03$). Le choix des fonctions objectives est une étape principale dans cette étude, vu que plusieurs paramètres compétitifs ont lieu lors d'un fonctionnement moteur en mode dual fuel avec des variations de : taux de compression, instant d'injection pilote, et taux d'EGR. L'équation 5.10 décris les deux fonctions objectives choisies dans cette étude.

$$\begin{cases} \text{Minimisation} : \mathrm{F}_1, \mathrm{F}_2 \\ \mathrm{F}_1 = -\eta_{th} \\ \mathrm{F}_2 = \frac{1}{6}[\mathrm{NO_x}] + \frac{1}{6}[\mathrm{HC}] + \frac{2}{3}[IC] \end{cases} \tag{5.10}$$

Avec [NO_x], [HC] les quantités d'oxydes d'azote et les hydrocarbures imbrûlés, respectivement. IC est l'indice de cliquetis, et η_{th} le rendement thermique.

La Figure 5.17 représente les deux fronts de Pareto pour les scénarios définis précédemment. L'influence de la convergence finale est nettement illustrée par ces résultats, pour lesquelles l'optimisation appliquée sur le modèle résultant du deuxième scénario présente un front de Pareto qui contient plus de cas optimaux par rapport au cas de base, contrairement au cas d'optimisation appliquée sur le modèle propre au premier scénario. Cela est principalement justifié par la convergence non complète du modèle multi-fidélité dans le cas du premier scénario.

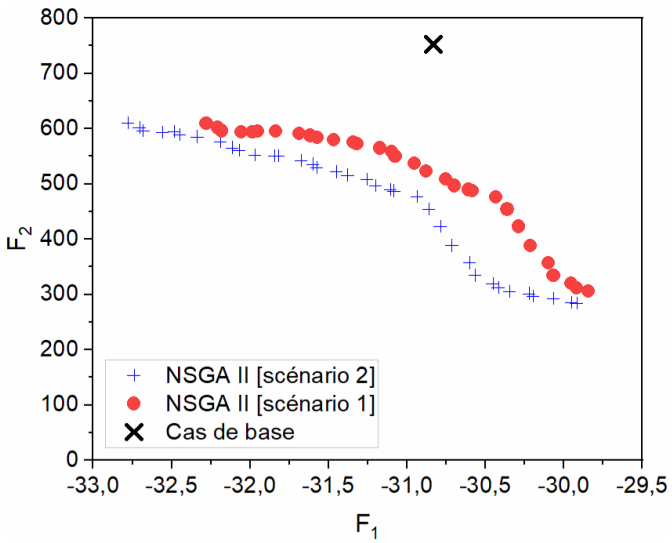


FIGURE 5.17 – Fronts de Pareto des cas optimaux pour chaque scénario.

La Figure 5.18 représente les fronts de Pareto selon les cas d'optimisation avec NSGA II et NSGA II-Robust. D'après ces résultats l'optimisation robuste présente des résultats légèrement moins efficaces que les résultats propres au cas d'optimisation ordinaire. Ce constat s'explique par le principe de l'optimisation robuste qui recommande la recherche des optimums efficaces et robustes qui résistent aux perturbations du méta-modèle et aux fluctuations des entrées pendant le fonctionnement du moteur qui est exposé à plusieurs perturbations (taux de compression, instant d'injection, taux d'EGR, température d'air ambiant, la composition de carburant, etc).

Pour ces raisons, l'optimisation robuste délivre un front de Pareto qui englobe les cas de fonctionnement optimaux non dominés selon les variables de décisions fixés (taux de compression, instant d'injection pilote, et taux d'EGR) et les fonctions objectives requises (F_1 et F_2) et qui résiste aux différentes perturbations citées précédemment.

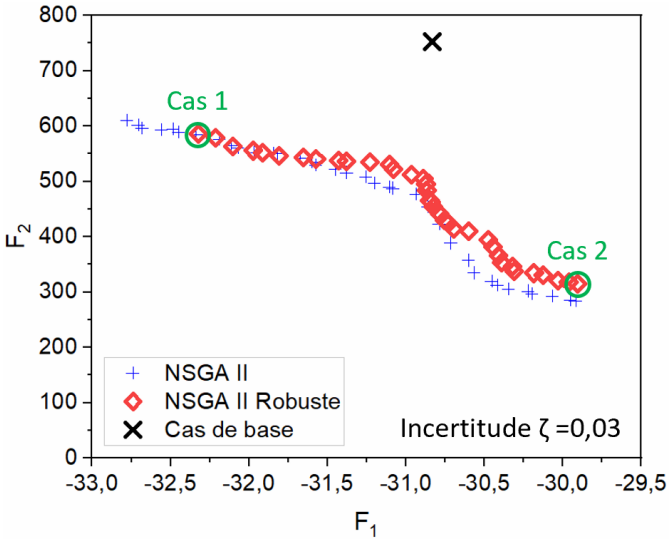


FIGURE 5.18 – Fronts de Pareto des cas optimaux pour le scénario 2 selon une optimisation robuste et non-robuste.

Le front de Pareto domine le cas de base présenté sur la Figure 5.18 selon deux fonctions objectives en compétition. Le choix du cas de fonctionnement optimal sera fait dans le front robuste en fixant une pondération entre les deux fonctions objectives.
Le Tableau 5.14 présente les caractéristiques du cas de base et des deux cas limites sur le front du Pareto où l'une des deux fonctions objectives est tolérée ; F_2 et F_1 dans le cas 1 et le cas 2, respectivement.

TABLE 5.14 – Caractéristiques des cas de référence.

	Variables de décision			Performances et émissions			
	π_c	T_{inj}	EGR	HC (ppm)	NO_x (ppm)	IC (bar)	η_{th} (%)
Cas de base	18	14	0	2786,61	1407,58	27,73	30,83
Cas 1	18	11,84	0,08	2446,41	1112,25	26,53	32,32
Cas 2	16,83	19,78	35,87	1508,98	451,05	1,03	29,91

D'après les résultats du Tableau 5.14, le choix des fonctions objectives joue un rôle important dans le déroulement de la combustion, ce qui impacte directement les résultats finaux. Le cas de base présenté avec ces performances est un cas caractérisé par un indice de cliquetis très élevé. Lorsque la deuxième fonction objective est tolérée (Cas 1), l'optimiseur donne la priorité totale à la maximisation du rendement thermique. Malgré cette pondération, ce cas est caractérisé par une deuxième fonction objective (émissions et indice de cliquetis) inférieure par rapport au

cas de base. En revanche, lorsque la première fonction objective est tolérée (Cas 2) l'optimiseur donne la priorité totale à la minimisation des émissions (HC et NO_x) et la minimisation de l'indice de cliquetis (IC) au détriment du rendement thermique qui est le plus faible même par rapport aux cas de base.
Ces deux cas limites dans le front de Pareto donnent une vision du compromis entre les fonctions objectives afin de les gérer selon le cas de fonctionnement du moteur.

■ Validation globale

Dans le but de valider la démarche globale présentée précédemment, le Cas 1, défini ci-dessus, est présenté comme un cas de comparaison avec des résultats expérimentaux. La reconstruction de ce cas sur le banc d'essai moteur "AVL 5402", permet de présenter les résultats comparatifs du Tableau 5.15.

TABLE 5.15 – Validation d'un cas optimal avec des résultats expérimentaux.

	HC (ppm)	NO_x (ppm)	IC (bar)	η_{th} (%)
Cas 1	2786,61	1407,58	27,73	30,83
Expérimental	2700,73	1377,7	28,20	31,41
Erreur (%)	3,18	2,17	3,29	2,68

Les résultats représentés valident fortement la démarche globale en termes de modélisation et d'optimisation, avec une erreur maximale de 3,29% marquée pour l'indice de cliquetis. Cette erreur est justifiée principalement par la difficulté de capter le phénomène de cliquetis avec précision spécialement dans le cadre des simulations numériques.
Cette validation de l'approche globale de modélisation avec optimisation robuste confère une crédibilité particulière à ce travail, dont le but final est de gérer certaines variables de décision (taux de compression, instant d'injection pilote, taux d'EGR) et certaines fonctions objectives (performances, émissions, indice de cliquetis) pour avoir un fonctionnement optimal du moteur en mode dual fuel à forte charge avec un fort taux d'enrichissement avec l'hydrogène.

3 Conclusion

Ce chapitre représente une avancée considérable dans le domaine de la modélisation du fonctionnement des moteurs à combustion interne en termes de performances et des émissions polluantes. Cette avancé de modélisation a été valorisée via l'utilisation des modèles élaborés dans des buts d'optimisation du fonctionnement moteur sous différentes conditions. Le présent chapitre a porté sur deux points essentiels traitant le moteur dual fuel selon deux sections.

La première section a exploré les caractéristiques de l'injection pilote pour réduire l'intensité du cliquetis et les émissions de NO_x dans les moteurs dual fuel utilisant un carburant pilote émulsifié. Une optimisation multi-objectifs basée sur une approche de méta-modèle (Modélisation-Optimisation ON-line) est mise en œuvre pour minimiser les émissions de NO_x et l'indice de

cliquetis d'une part, et pour maximiser le rendement thermique d'autre part. Ces fonctions objectives sont contrôlées dans cette approche en utilisant la quantité d'eau contenue dans le jet pilote et l'instant d'injection.
Les résultats montrent que l'augmentation de la quantité d'eau dans le carburant et le retardement de l'injection pilote réduisent l'intensité du cliquetis et les émissions de NO_x, mais pénalisent le rendement thermique du moteur.
Cependant, en utilisant une approche de Modélisation-Optimisation ON-line, il est possible de parvenir à un compromis entre la précision et le coût de calcul. Dans l'ensemble, cette étude contribue à l'amélioration des performances du moteur dual fuel en identifiant des stratégies efficaces pour réduire le cliquetis et les émissions de NO_x, tout en maintenant un rendement thermique optimal.

La deuxième section apporte une contribution considérable à la progression de la modélisation multi-fidélité, qui est une méthode en constante évolution capable de capturer la complexité des phénomènes physiques en prenant en compte des modèles à basse et à haute-fiabilité. Cette nouvelle approche vise à surmonter les défis liés à la complexité et à l'applicabilité des approches actuelles.
L'approche proposée a été testée dans un cadre d'optimisation multi-objectifs robuste pour optimiser les performances et les émissions d'un moteur dual fuel. Les résultats ont montré que l'approche proposée est largement applicable et peut atteindre une précision maximale avec un gain considérable en termes de temps de calcul. Les différentes validations ont également confirmé que cette approche peut être utilisée dans de nombreux secteurs en prenant en compte la relativité de la fiabilité de différentes sources.

Les nouvelles approches pour la modélisation du fonctionnement moteur présentées dans ce chapitre présentent un pas significatif en avant dans le développement de méthodes plus fiables et plus précises pour décrire les phénomènes complexes dans de nombreux secteurs. Ces approches peuvent non seulement améliorer la précision des modèles, mais également fournir des gains considérables en termes de temps de calcul et d'applicabilité dans de nombreux secteurs différents.
Ce chapitre a permis aussi de mieux comprendre et contrôler les relations entre les performances, les émissions, et les différents types de combustion anormale via des techniques d'optimisation poussées visant l'amélioration du fonctionnement des moteurs à combustion interne fonctionnent en mode dual fuel. Ces améliorations ont des implications importantes pour l'industrie des transports, vu que les réglementations environnementales deviennent de plus en plus strictes et les ressources des carburants conventionnels deviennent plus limitées.

Conclusion et perspectives

1 Conclusions de l'étude

Dans cette thèse, les défis critiques et les opportunités associés aux moteurs à allumage par compression fonctionnant en mode dual fuel ont été abordés, en particulier dans le contexte de la transition énergétique et de la décarbonation. L'objectif principal est de développer des méthodes de modélisation et d'optimisation avancées pour comprendre et maîtriser les aspects physiques des moteurs, améliorer les performances en termes de rendement et de durabilité, et réduire les émissions polluantes. Les principales conclusions de cette thèse sont présentées ci-dessous selon les chapitres.

• Modélisation 0D des moteurs dual fuel (Chapitre 2)

◇ Contribution significative

Le modèle proposé se distingue par sa description détaillée et sa grande capacité prédictive, couvrant une large gamme d'opérations moteur, allant de 20% à 80% de la pleine charge, et des variations de composition du mélange air-gaz dans la chambre de combustion. Il prend en compte le cas spécifique du mélange hydrogène-gaz naturel avec une concentration volumique d'hydrogène comprise entre 35% et 50% du volume total.
Ce modèle divise le taux de dégagement de chaleur en deux phases distinctes : la combustion du carburant pilote et la combustion du mélange air-gaz. Chacune de ces phases est modélisée séparément, la première par un modèle de jet, basé sur les propriétés du jet formé dans la chambre de combustion après l'injection, et la deuxième par un modèle mathématique original reposant sur une discrétisation en fonctions Gaussiennes.

◇ Principaux résultats

Le modèle met l'accent sur la prévision précise du délai d'auto-inflammation du carburant pilote au sein d'un mélange gazeux diversifié. Les résultats de modélisation du délai d'auto-inflammation concordent de manière remarquable avec les données expérimentales, présentant une erreur maximale inférieure à 5% dans tous les scénarios opérationnels. La validation du modèle de combustion global pour diverses conditions opérationnelles, incluant la charge et la composition du mélange air-gaz, a démontré sa grande fiabilité et capacité prédictive. Comparé au modèle conventionnel de Wiebe moins précis pour les modes dual fuel à forte charge, en

particulier avec un mélange air-gaz riche en hydrogène, ce nouveau modèle conserve une précision élevée avec une erreur maximale d'environ 2%.

• Modélisation des problèmes majeurs dans le moteur dual fuel (Chapitre 3)

◇ Contribution significative

La première section de ce chapitre vise le développement d'un modèle de prédiction du cliquetis spécifiquement pour les moteurs dual fuel, où le risque d'auto-inflammation indésirable est fréquent, en particulier avec un faible indice d'octane du gaz primaire dans la chambre de combustion. Un modèle thermodynamique à deux zones est utilisé pour modéliser la pression et la température dans le cylindre afin de contrôler le phénomène de cliquetis. L'équation d'Arrhenius est employée pour prédire l'instant où le cliquetis peut survenir en fonction des conditions de fonctionnement du moteur. L'analyse des variables a réduit les besoins d'étalonnage expérimental et les surfaces de réponse ont amélioré la précision des prévisions dans diverses conditions de fonctionnement.
La deuxième section se concentre sur le phénomène de transfert de chaleur dans les injecteurs, visant l'identification des principaux facteurs influençant ce processus pour établir une cartographie de la température des injecteurs au cours des cycles moteur. Une approche novatrice divise le corps de l'injecteur en sous-zones pour une analyse détaillée du transfert de chaleur dans des conditions variées, y compris en situation d'opération réelle. En prenant soigneusement en compte les conditions limites de chaque sous-zone, le scénario réel d'un cycle moteur est reproduit. En utilisant le code Ansys-FLUENT, les équations de conduction thermique sont résolues pour générer des cartographies détaillées de température.

◇ Principaux résultats

Le modèle de prédiction du cliquetis développé a démontré une excellente concordance avec les résultats expérimentaux, même dans des situations complexes des moteurs dual fuel, couvrant une gamme étendue de conditions de charge et de compositions gazeuses variables. Malgré cette complexité, l'erreur maximale du modèle n'a pas dépassé 5% concernant l'apparition du cliquetis. Ce modèle est combiné avec une simulation CFD pour atténuer le cliquetis en utilisant une injection directe d'eau. Une combinaison optimale de 20% d'eau par rapport au diesel, injectée à 15 °V avant le phénomène de cliquetis, atténue complètement le cliquetis sans trop affecter les performances du moteur.
Dans la deuxième section, la nouvelle approche de cartographie de la température des injecteurs a permis d'étudier divers modes de combustion, notamment diesel conventionnel et dual fuel, en tenant compte de l'effet de la quantité de carburant injectée sur la température dans l'injecteur. Des différences significatives ont été observées, notamment des augmentations de température allant jusqu'à 215 K en fonction de la charge et des modes de combustion. Les moteurs dual fuel ont montré des températures d'injecteur plus élevées, soulignant l'importance de considérer divers modes de fonctionnement dans la conception des injecteurs, notamment en termes de choix des matériaux.

• Étude des carburants alternatifs (Chapitre 4)

◇ **Contribution significative**

La première section de ce chapitre représente une avancée qualitative dans le domaine des gros moteurs dual fuel fonctionnant avec l'ammoniac comme carburant primaire. Une optimisation multi-objectifs couplée avec une méta-modélisation parallèle (ON-line) est appliquée pour développer un moteur dédié au fonctionnement dual fuel ammoniac/diesel. Les points clés de cette section reposent sur l'optimisation de la forme du bol de piston et du taux de Swirl pour améliorer le rendement thermique, l'efficacité de combustion et la réduction des émissions de NO_x.
La deuxième section focalise sur les avancées de la recherche pour optimiser l'utilisation du méthanol comme carburant primaire dans les gros moteurs dual fuel, en réponse à la transition vers des carburants à faible teneur en carbone. Les simulations numériques dans cette étude se focalisent sur l'injection de méthanol comme carburant primaire et de diesel comme carburant pilote, explorant diverses stratégies d'injection pour réduire les émissions de NO_x et de CO sans compromettre les performances du moteur.

◇ **Principaux résultats**

Dans la première section, l'optimisation de la forme du piston et du taux de Swirl a démontré une amélioration significative de l'efficacité de combustion et une réduction des émissions polluantes pour le moteur dual fuel ammoniac/diesel. La configuration optimale a permis une réduction de plus de 43% des émissions de NH_3 non brûlé et une augmentation de plus de 31% du rendement thermique. L'introduction d'hydrogène en petite quantité, utilisée pour améliorer la réactivité du mélange gazeux, a été essentielle pour améliorer l'efficacité de combustion et le rendement du moteur dual fuel ammoniac/diesel, en particulier à des charges élevées et avec un pourcentage important de participation d'ammoniac dans l'énergie totale à l'entrée. Un enrichissement de 15% d'hydrogène a permis d'augmenter le rendement thermique de 28% et l'efficacité de combustion de 50%. La deuxième section a abouti à des configurations optimales réduisant de manière significative les émissions de NO_x (64%) et de CO (52%) tout en maintenant de bonnes performances du moteur, ce qui a reflété l'influence de la stratégie d'injection sur les différents phénomènes ayant lieu dans le cylindre notamment la combustion, la turbulence et le transfert de chaleur.

• **Optimisation basée sur la méta-modélisation (Chapitre 5)**

◇ **Contribution significative**

La première section de ce chapitre explore l'utilisation de l'injection pilote pour réduire le cliquetis et les émissions de NO_x dans les moteurs dual fuel utilisant un carburant pilote émulsifié. Une optimisation multi-objectifs, basée sur un méta-modèle, est mise en œuvre pour minimiser les émissions de NO_x et le cliquetis, tout en maximisant le rendement thermique en manipulant le pourcentage d'émulsion (la quantité d'eau mélangée avec le gazole) et l'instant d'injection.

La deuxième partie de ce chapitre explore la modélisation multi-fidélité, où une approche évolutive a été développée, capable de capturer la complexité des phénomènes physiques en

combinant des modèles de basse et haute-fidélité. Trois étapes clés définissent cette approche : la création d'un modèle de base (basse fidélité), la conception d'un plan d'expérience basé sur des perturbations pour construire un modèle haute-fidélité, et l'utilisation d'une boucle itérative pour affiner la précision du modèle multi-fidélité.

◇ **Principaux résultats**

L'étude, explorant la stratégie d'injection du carburant pilote émulsifié, a identifié des stratégies efficaces pour réduire le cliquetis et les émissions de NO_x, tout en maintenant un rendement optimal du moteur. Cette approche a permis de trouver un compromis entre le rendement thermique, les émissions polluantes et le cliquetis, illustré par une réduction de 54% et 86% pour les émissions de NO_x et le cliquetis, respectivement, offrant des solutions précises et applicables pour les moteurs dual fuel fonctionnant avec divers carburants alternatifs.
Une évaluation approfondie de la modélisation multi-fidélité confirme son excellente précision et robustesse. Comparée à d'autres méthodes, cette approche innovante a démontré plus de 50% d'amélioration du temps de calcul, validée à travers plusieurs cas de test. L'optimisation robuste, basée sur le modèle développé, appliquée sur un moteur dual fuel montre une réduction de plus de 90% pour les émissions polluantes, gardant un rendement proche à celui du moteur diesel conventionnel.

Ces résultats offrent des pistes prometteuses pour l'industrie des moteurs à combustion interne dans un contexte de réglementations environnementales plus strictes et de ressources en carburants limitées. Les résultats trouvés dans cette thèse répondent aux questions de recherche initialement évoquées dans l'introduction générale, comme expliqué ci-dessous :

QR1 : Les limites de la modélisation des moteurs à combustion interne dual fuel résident souvent dans la complexité des phénomènes de combustion et la variabilité des conditions de fonctionnement. Les modèles 0D et les méta-modèles offrent une approche puissante pour évaluer le comportement global du moteur tout en minimisant le coût de calcul. Ces modèles peuvent répondre au compromis entre le coût de calcul et la précision en se concentrant sur les aspects les plus critiques de la combustion, tout en fournissant des résultats fiables pour une gamme variée de conditions opérationnelles.

QR2 : Les limitations du fonctionnement dual fuel peuvent inclure des défis liés à l'auto-inflammation, au cliquetis, à la variabilité de combustion et à l'influence de la température sur les éléments du moteur. Pour les surmonter, il est crucial de comprendre en profondeur les mécanismes sous-jacents et de décrire précisément la relation entre ces mécanismes, qui illustrent l'aspect physique dans le moteur, et les conditions de fonctionnement. Cette maîtrise permet l'optimisation de plusieurs paramètres influant l'efficacité du moteur notamment la stratégie d'injection de carburant et le choix des matériaux utilisés pour la conception des éléments clés dans le fonctionnement du moteur.

QR3 : Les pistes d'amélioration des moteurs dual fuel incluent l'exploration de nouveaux types de carburants, l'optimisation de la composition des mélanges air-carburant, l'adaptation des ca-

ractéristiques géométriques de la chambre de combustion pour favoriser une combustion efficace, et le contrôle des paramètres opérationnels du moteur à l'aide de modèles innovants intégrant des approches de pointe telles que la modélisation multi-fidélité et l'optimisation multi-objectifs. L'utilisation de stratégies d'injection précises, de techniques de combustion avancées et de mesures de contrôle sophistiquées peut également contribuer à améliorer les performances et à réduire les émissions des moteurs dual fuel.

2 Ouverture et perspectives

Les avancées significatives réalisées dans cette thèse ouvrent la voie à de nouvelles perspectives passionnantes et prometteuses dans le domaine de la modélisation et de l'optimisation des moteurs à combustion interne. Ci-dessous, quelques pistes à explorer pour des travaux futurs :

◇ Optimisation avancée des carburants alternatifs : Une investigation approfondie sur les possibilités d'utilisation de carburants alternatifs, tels que l'ammoniac et le méthanol, avec une approche d'optimisation multi-objectifs globale considérant plusieurs paramètres du moteur.

◇ Développement de modèles multi-combustibles innovants : La création de modèles plus sophistiqués et complets prenant en compte une variété de carburants et de conditions opérationnelles pour améliorer la prédiction des phénomènes de combustion et la fiabilité des résultats. Ce modèle fera l'objectif d'un outil de conception préliminaire et d'analyse de fonctionnement du moteur.

◇ Intégration de techniques avancées : L'intégration de l'intelligence artificielle, l'apprentissage automatique dans le cadre d'améliorer l'approche de la modélisation multi-fidélité en termes de précision et de coût de calcul.

◇ L'élargissement de l'étude d'optimisation du moteur dual fuel à une analyse structurale afin d'évaluer l'influence des conditions de fonctionnement sur les contraintes mécaniques et thermiques subies par les différents composant dans le moteur, notamment les injecteurs, pour une analyse de durabilité du moteur.

En conclusion, cette thèse établit une base solide pour des recherches ultérieures visant à affiner les modèles développés et à explorer de nouvelles stratégies de décarbonation et d'optimisation pour les moteurs dual fuel, contribuant ainsi de manière significative à la transition vers une mobilité plus durable et respectueuse de l'environnement.

Bibliographie

[1] Jeongwoo Lee, Sunyoup Lee, Changgi Kim et Seokhwan Lee. « Characteristic of energy fractions and emissions under natural gas/diesel dual-fuel heavy-duty engine in terms of the combustion parameters ». *International Journal of Automotive Technology* 21 (2020), p. 103-113 (cf. p. 9).

[2] John B Heywood. « Internal combustion engine fundamentals ». *(No Title)* (1988) (cf. p. 10).

[3] OMI Nwafor. « Knock characteristics of dual-fuel combustion in diesel engines using natural gas as primary fuel ». *Sadhana* 27 (2002), p. 375-382 (cf. p. 10).

[4] VN Grinev, AV Kozlov et NS Zuev. « Applying detailed chemistry for the dual-fuel engine combustion process simulation using CFD approach ». *Journal of Physics : Conference Series*. T. 2061. 1. IOP Publishing. 2021, p. 012063 (cf. p. 11).

[5] Venkateswarlu Chintala et KA Subramanian. « A CFD (computational fluid dynamics) study for optimization of gas injector orientation for performance improvement of a dual-fuel diesel engine ». *Energy* 57 (2013), p. 709-721 (cf. p. 11).

[6] Mateos Kassa et Carrie Hall. « Dual-fuel combustion ». *The Future of Internal Combustion Engines* (2018) (cf. p. 11).

[7] Ghazi A Karim. *Dual-fuel diesel engines*. CRC press, 2015 (cf. p. 12, 44, 70, 74).

[8] RG Papagiannakis et DT Hountalas. « Experimental investigation concerning the effect of natural gas percentage on performance and emissions of a DI dual fuel diesel engine ». *Applied Thermal Engineering* 23.3 (2003), p. 353-365 (cf. p. 12, 14).

[9] Fredrik Königsson. « Advancing the limits of dual fuel combustion ». Thèse de doct. KTH Royal Institute of Technology, 2012 (cf. p. 12).

[10] U Azimov, Eiji Tomita, N Kawahara et Y Harada. « Premixed mixture ignition in the end-gas region (PREMIER) combustion in a natural gas dual-fuel engine : operating range and exhaust emissions ». *International Journal of Engine Research* 12.5 (2011), p. 484-497 (cf. p. 13).

[11] Fatma Zohra Aklouche. « Etude caractéristique et développement de la combustion des moteurs Diesel en mode Dual-Fuel : optimisation de l'injection du combustible pilote ». Thèse de doct. Ecole nationale supérieure Mines-Télécom Atlantique, 2018 (cf. p. 14).

[12] Salim Sayssouk. « Contrôle du phasage de la combustion dans un moteur HCCI par ajout d'ozone : Modélisation et Contrôle ». Thèse de doct. Université d'Orléans, 2017 (cf. p. 14).

[13] Yuwei Zhao, Ying Wang, Dongchang Li, Xiong Lei et Shenghua Liu. « Combustion and emission characteristics of a DME (dimethyl ether)-diesel dual fuel premixed charge compression ignition engine with EGR (exhaust gas recirculation) ». *Energy* 72 (2014), p. 608-617 (cf. p. 14).

[14] Vinicius B Pedrozo, Xinyan Wang, Wei Guan et Hua Zhao. « The effects of natural gas composition on conventional dual-fuel and reactivity-controlled compression ignition combustion in a heavy-duty diesel engine ». *International Journal of Engine Research* 23.3 (2022), p. 397-415 (cf. p. 14).

[15] Jeongwoo Lee, Sanghyun Chu, Jaegu Kang et Kyoungdoug Min. « Effects of Varying Equivalence Ratios on the Combustion Efficiency Characteristic of a Dual-Fuel Compression Ignition Engine by Changing Intake Pressures and Exhaust Gas Recirculation Rates ». *International Journal of Automotive Technology* (2024), p. 1-10 (cf. p. 14).

[16] Maxime Tarot. « Modélisation de la combustion dans des configurations Dual-Fuel ». Thèse de doct. Université Paris-Saclay, 2021 (cf. p. 14).

[17] Lijiang Wei et Peng Geng. « A review on natural gas/diesel dual fuel combustion, emissions and performance ». *Fuel Processing Technology* 142 (2016), p. 264-278 (cf. p. 14).

[18] Michael Trzesniowski. « Combustion Engines ». *Powertrain*. Springer, 2023, p. 1-177 (cf. p. 15).

[19] Jianbin Luo, Zhonghang Liu, Jie Wang, Heyang Chen, Zhiqing Zhang, Boying Qin et al. « Effects of different injection strategies on combustion and emission characteristics of diesel engine fueled with dual fuel ». *Processes* 9.8 (2021), p. 1300 (cf. p. 16).

[20] Marcus Grochowina, Michael Schiffner, Simon Tartsch et Thomas Sattelmayer. « Influence of injection parameters and operating conditions on ignition and combustion in dual-fuel engines ». *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 140.10 (2018), p. 102809 (cf. p. 16).

[21] GA Karim, Z Liu et W Jones. *Exhaust emissions from dual fuel engines at light load*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 1993 (cf. p. 16).

[22] Gaurav Tripathi et Atul Dhar. « Performance, emissions, and combustion characteristics of methane-diesel dual-fuel engines : A review ». *Frontiers in Thermal Engineering* 2 (2022), p. 870077 (cf. p. 16).

[23] AMLM Wagemakers et CAJ Leermakers. « Review on the effects of dual-fuel operation, using diesel and gaseous fuels, on emissions and performance ». *SAE International Journal of Engines* 2012010869.2012-01-0869 (2012), p. 1-18 (cf. p. 16, 17).

[24] Junheng Liu, Ping Sun et Buyun Zhang. « Effects of diesel/ethanol dual fuel on emission characteristics in a heavy-duty diesel engine ». *IOP Conference Series : Materials Science and Engineering*. T. 231. 1. IOP Publishing. 2017, p. 012190 (cf. p. 17).

[25] Taku Tsujimura et Yasumasa Suzuki. « The utilization of hydrogen in hydrogen/diesel dual fuel engine ». *International journal of hydrogen energy* 42.19 (2017), p. 14019-14029 (cf. p. 17).

[26] DM Muralidhara, NR Banapurmath, M Udayaravi, C Prabhakar Reddy, PA Harari et T Karthik. « Effect of hydrogen flow rates on the performance of two biodiesels fuelled dual fuel engine ». *Materials Today : Proceedings* 49 (2022), p. 2189-2196 (cf. p. 17).

[27] Ivan Dario Bedoya, Andres Amell Arrieta et Francisco Javier Cadavid. « Effects of mixing system and pilot fuel quality on diesel–biogas dual fuel engine performance ». *Bioresource technology* 100.24 (2009), p. 6624-6629 (cf. p. 17).

[28] Saket Verma, LM Das, SS Bhatti et SC Kaushik. « A comparative exergetic performance and emission analysis of pilot diesel dual-fuel engine with biogas, CNG and hydrogen as main fuels ». *Energy Conversion and Management* 151 (2017), p. 764-777 (cf. p. 17).

[29] Ebrahim Nadimi, Grzegorz Przybyła, Michał T Lewandowski et Wojciech Adamczyk. « Effects of ammonia on combustion, emissions, and performance of the ammonia/diesel dual-fuel compression ignition engine ». *Journal of the Energy Institute* 107 (2023), p. 101158 (cf. p. 17).

[30] Jatinderpal Singh, Sandeep Singh et Saroj Kumar Mohapatra. « Production of syngas from agricultural residue as a renewable fuel and its sustainable use in dual-fuel compression ignition engine to investigate performance, emission, and noise characteristics ». *Energy Sources, Part A : Recovery, Utilization, and Environmental Effects* 42.1 (2020), p. 41-55 (cf. p. 18).

[31] Machindra S Gaikwad, Avinash H Kolekar, Keshav M Jadhav, Mona S Yadav et Parashuram R Chitragar. « Performance and emission characteristics of biomethane-diesel dual-fuelled CI engine in the presence of exhaust gas recirculation ». *International Journal of Ambient Energy* 43.1 (2022), p. 2165-2172 (cf. p. 18).

[32] Nirendra N Mustafi, Robert R Raine et Sebastian Verhelst. « Combustion and emissions characteristics of a dual fuel engine operated on alternative gaseous fuels ». *Fuel* 109 (2013), p. 669-678 (cf. p. 18).

[33] Darko Kozarac, Mario Sremec, Mladen Bozic et Ante Vucetic. *The performance and emissions of a conventional natural gas/diesel dual fuel engine at various operating conditions*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2019 (cf. p. 19).

[34] Pavlos Dimitriou, Taku Tsujimura et Yasumasa Suzuki. « Low-load hydrogen-diesel dual-fuel engine operation–A combustion efficiency improvement approach ». *International Journal of Hydrogen Energy* 44.31 (2019), p. 17048-17060 (cf. p. 19).

[35] Alberto Boretti. « Advantages and disadvantages of diesel single and dual-fuel engines ». *Frontiers in Mechanical Engineering* 5 (2019), p. 64 (cf. p. 19, 48).

[36] Mohamed YE Selim. « Sensitivity of dual fuel engine combustion and knocking limits to gaseous fuel composition ». *Energy Conversion and Management* 45.3 (2004), p. 411-425 (cf. p. 19).

[37] A Douaud et P Eyzat. *DIGITAP-An on-line acquisition and processing system for instantaneous engine data-applications*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 1977 (cf. p. 20).

[38] MG Galal, MM Abdel Aal et MA El Kady. « A comparative study between diesel and dual-fuel engines : Performance and emissions ». *Combustion science and technology* 174.11-12 (2002), p. 241-256 (cf. p. 20).

[39] BB Sahoo, N Sahoo et UK Saha. « Effect of engine parameters and type of gaseous fuel on the performance of dual-fuel gas diesel engines—A critical review ». *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 13.6-7 (2009), p. 1151-1184 (cf. p. 20).

[40] Carrie Hall et Mateos Kassa. « Advances in combustion control for natural gas–diesel dual fuel compression ignition engines in automotive applications : A review ». *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 148 (2021), p. 111291 (cf. p. 20).

[41] Changchun Xu, Yuan Zhuang, Yejian Qian et Haengmuk Cho. « Effect on the performance and emissions of methanol/diesel dual-fuel engine with different methanol injection positions ». *Fuel* 307 (2022), p. 121868 (cf. p. 21).

[42] Hyunwook Park, Euijoon Shim et Choongsik Bae. « Improvement of combustion and emissions with exhaust gas recirculation in a natural gas-diesel dual-fuel premixed charge compression ignition engine at low load operations ». *Fuel* 235 (2019), p. 763-774 (cf. p. 21).

[43] Mohamad Issa, Hussein Ibrahim, Adrian Ilinca, M Yasser Hayyani et al. « A review and economic analysis of different emission reduction techniques for marine diesel engines ». *Open Journal of Marine Science* 9.03 (2019), p. 148 (cf. p. 21).

[44] Halil Erdi Gulcan et Murat Ciniviz. « Experimental study on the effect of piston bowl geometry on the combustion performance and pollutant emissions of methane-diesel common rail dual-fuel engine ». *Fuel* 345 (2023), p. 128175 (cf. p. 21).

[45] II Vibe. *Combustion process and cycle of internal combustion engines*. 1970 (cf. p. 23, 60).

[46] Noboru Miyamoto, Takemi Chikahisa, Tadashi Murayama et Robert Sawyer. « Description and analysis of diesel engine rate of combustion and performance using Wiebe's functions ». *SAE transactions* (1985), p. 622-633 (cf. p. 24, 25, 62).

[47] Neil Watson et Marian Stefan Janota. « Turbocharging the internal combustion engine » (1982) (cf. p. 25).

[48] N Watson, AD Pilley et Mohamed Marzouk. *A combustion correlation for diesel engine simulation*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 1980 (cf. p. 25, 62, 77).

[49] Lyes Tarabet, Mohand Said Lounici, Khaled Loubar et Mohand Tazerout. *Dual Wiebe Function Prediction of Eucalyptus Biodiesel/Diesel Fuel Blends Combustion in Diesel Engine Applying Artificial Neural Network*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2014 (cf. p. 26).

[50] Christian Barba, Christine Burkhardt, Konstantinos Boulouchos et Michael Bargende. *A phenomenological combustion model for heat release rate prediction in high-speed DI Diesel engines with common rail injection*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2000 (cf. p. 27, 28).

[51] Franz G Chmela et Gerhard C Orthaber. « Rate of heat release prediction for direct injection diesel engines based on purely mixing controlled combustion ». *SAE transactions* (1999), p. 152-160 (cf. p. 28).

[52] Gerhard Pirker, Franz Chmela et Andreas Wimmer. *ROHR simulation for DI diesel engines based on sequential combustion mechanisms*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2006 (cf. p. 29).

[53] Claude Valery Ngayihi Abbe, Robert Nzengwa et Raidandi Danwe. « Comparing in cylinder pressure modelling of a DI diesel engine fuelled on alternative fuel using two tabulated chemistry approaches ». *International Scholarly Research Notices* 2014 (2014) (cf. p. 30).

[54] Elizabeth M Fisher, William J Pitz, Henry J Curran et Charles K Westbrook. « Detailed chemical kinetic mechanisms for combustion of oxygenated fuels ». *Proceedings of the combustion institute* 28.2 (2000), p. 1579-1586 (cf. p. 30).

[55] CD Rakopoulos, DC Rakopoulos, EG Giakoumis et DC Kyritsis. « Validation and sensitivity analysis of a two zone Diesel engine model for combustion and emissions prediction ». *Energy conversion and management* 45.9-10 (2004), p. 1471-1495 (cf. p. 31).

[56] Alain Maiboom, Xavier Tauzia, Samiur Rahman Shah et Jean-Francois Hetet. « New phenomenological six-zone combustion model for direct-injection diesel engines ». *Energy & Fuels* 23.2 (2009), p. 690-703 (cf. p. 32, 33).

[57] John E Dec. « A conceptual model of DL diesel combustion based on laser-sheet imaging ». *SAE transactions* (1997), p. 1319-1348 (cf. p. 32).

[58] Patrick F Flynn, Russell P Durrett, Gary L Hunter, Axel O zur Loye, Omowoleola C Akinyemi, John E Dec et al. « Diesel combustion : an integrated view combining laser diagnostics, chemical kinetics, and empirical validation ». *SAE transactions* (1999), p. 587-600 (cf. p. 32).

[59] Dennis L Siebers. « Liquid-phase fuel penetration in diesel sprays ». *SAE transactions* (1998), p. 1205-1227 (cf. p. 32).

[60] Dennis Siebers et Brian Higgins. « Flame lift-off on direct-injection diesel sprays under quiescent conditions ». *SAE Transactions* (2001), p. 400-421 (cf. p. 32).

[61] AS Kuleshov. « Use of multi-zone DI diesel spray combustion model for simulation and optimization of performance and emissions of engines with multiple injection ». *SAE paper* 2006-01 (2006), p. 1385 (cf. p. 33).

[62] Hiroyuki Hiroyasu, Toshikazu Kadota et Masataka Arai. « Development and use of a spray combustion modeling to predict diesel engine efficiency and pollutant emissions : Part 1 combustion modeling ». *Bulletin of JSME* 26.214 (1983), p. 569-575 (cf. p. 34-36, 45).

[63] Veniamin Grigorevich Levich et Charles W Tobias. « Physicochemical hydrodynamics ». *Journal of The Electrochemical Society* 110.11 (1963), p. 251C (cf. p. 34).

[64] S Rajkumar, Shamit Bakshi et Pramod S Mehta. « Multizone phenomenological modeling of combustion and emissions for multiple-injection common rail direct injection diesel engines ». *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 138.12 (2016) (cf. p. 35, 44).

[65] Tarcisio Cerri, Angelo Onorati et Enrico Mattarelli. « 1D engine simulation of a small HSDI diesel engine applying a predictive combustion model ». *Journal of engineering for gas turbines and power* 130.1 (2008) (cf. p. 36).

[66] José V Pastor, J Javier López, José M García et José M Pastor. « A 1D model for the description of mixing-controlled inert diesel sprays ». *Fuel* 87.13-14 (2008), p. 2871-2885 (cf. p. 36, 37).

[67] Mark PB Musculus et Kyle Kattke. « Entrainment waves in diesel jets ». *SAE International Journal of Engines* 2.1 (2009), p. 1170-1193 (cf. p. 37, 45).

[68] Nicolas Bordet. « Modélisation 0D/1D de la combustion diesel : du mode conventionnel au mode homogène ». Thèse de doct. Université d'Orléans, 2011 (cf. p. 37, 60).

[69] Lionel Martinez, Adlène Benkenida et Bénédicte Cuenot. « A model for the injection boundary conditions in the context of 3D simulation of diesel spray : methodology and validation ». *Fuel* 89.1 (2010), p. 219-228 (cf. p. 37, 38).

[70] B Dolan, B Fuchs, SA Rutledge, EA Barnes et EJ Thompson. « Primary modes of global drop size distributions ». *Journal of the Atmospheric Sciences* 75.5 (2018), p. 1453-1476 (cf. p. 38).

[71] Zhenlong Wu, Benyin Lv et Yihua Cao. « Improved Taylor analogy breakup and Clark models for droplet deformation prediction ». *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G : Journal of Aerospace Engineering* 233.2 (2019), p. 767-775 (cf. p. 38).

[72] Vaidyanathan Sankaran et Suresh Menon. « LES of spray combustion in swirling flows ». *Journal of Turbulence* 3.1 (2002), p. 011 (cf. p. 38).

[73] Karen E Rowe, Karen R Rowe et KE Rowe. *Saint and singer : Edward Taylor's typology and the poetics of meditation*. T. 18. Cambridge University Press, 1986 (cf. p. 39).

[74] JC Livengood, Wu PC et al. « Correlation of autoignition phenomena in internal combustion engines and rapid compression machines » (1955) (cf. p. 40, 50).

[75] Eran Sher. *Handbook of air pollution from internal combustion engines : pollutant formation and control*. Academic Press, 1998 (cf. p. 41).

[76] John B Heywood. *Internal combustion engine fundamentals*. McGraw-Hill Education, 2018 (cf. p. 41, 129, 153, 156, 157).

[77] George A Lavoie, John B Heywood et James C Keck. « Experimental and theoretical study of nitric oxide formation in internal combustion engines ». *Combustion science and technology* 1.4 (1970), p. 313-326 (cf. p. 41).

[78] George A Lavoie. « Correlations of combustion data for SI Engine calculations–laminar flame speed, quench distance and global reaction rates ». *SAE Transactions* (1978), p. 1015-1033 (cf. p. 43).

[79] RG Papagiannakis, DT Hountalas et CD Rakopoulos. « Theoretical study of the effects of pilot fuel quantity and its injection timing on the performance and emissions of a dual fuel diesel engine ». *Energy Conversion and Management* 48.11 (2007), p. 2951-2961 (cf. p. 44, 71).

[80] Jelto Frerichs et Peter Eilts. « A New Combustion Model for Medium Speed Dual-Fuel Engines in the Course of 0D/1D Simulation ». *Methane* 1.3 (2022), p. 158-176 (cf. p. 44, 49, 109).

[81] Shuonan Xu et Zoran Filipi. « Quasi-dimensional multi-zone modeling of methane-diesel dual-fuel combustion ». *Frontiers in Mechanical Engineering* 6 (2020), p. 46 (cf. p. 45, 46).

[82] SL Johnson, A Clarke, T Fletcher et D Hylands. « A phenomenological approach to dual fuel combustion modelling ». *Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference*. T. 55096. American Society of Mechanical Engineers. 2012, p. 781-791 (cf. p. 47).

[83] James F Sinnamon, David R Lancaster et John C Steiner. « An experimental and analytical study of engine fuel spray trajectories ». *SAE Transactions* (1980), p. 765-785 (cf. p. 47).

[84] GL Borman et John H Johnson. *Unsteady vaporization histories and trajectories of fuel drops injected into swirling air*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 1962 (cf. p. 48).

[85] Fathul Hakim Zulkifli, Mas Fawzi et Shahrul Azmir Osman. « A review on knock phenomena in CNG-diesel dual fuel system ». *Applied Mechanics and Materials* 773 (2015), p. 550-554 (cf. p. 48).

[86] Messaoud Abdelalli Benbellil, Mohand Said Lounici, Khaled Loubar et Mohand Tazerout. « Investigation of natural gas enrichment with high hydrogen participation in dual fuel diesel engine ». *Energy* 243 (2022), p. 122746 (cf. p. 48).

[87] Jiankun Shao et Christopher J Rutland. « Modeling investigation of different methods to suppress engine knock on a small spark ignition engine ». *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 137.6 (2015) (cf. p. 49).

[88] Zhi Wang, Jian-Xin Wang, Shi-Jin Shuai, Guo-Hong Tian et Xin Liang An. « Experimental and computational studies on gasoline HCCI combustion control using injection strategies » (2007) (cf. p. 49).

[89] Xuejiao Dai, Zhaolei Zheng et Yukun Song. « Effect of port water injection on suppressing knock in gasoline direct injection engines ». *Energy Science & Engineering* 10.10 (2022), p. 3928-3945 (cf. p. 49).

[90] Ahmed Al-Sened, Hesameddin Safari, Mojtaba Keshavarz et Ghasem Javadirad. « Knock Prediction in Industrial Dual Fuel Engines Using a Two-Zone Combustion Model With Consideration of Chemical Kinetics ». *Internal Combustion Engine Division Spring Technical Conference*. T. 48132. 2008, p. 215-223 (cf. p. 49, 109).

[91] Shui-Chi Li, Forman Arthur Williams et Kresimir Gebert. « A reduced reaction mechanism for predicting knock in dual-fuel engines ». *SAE transactions* (2000), p. 1112-1125 (cf. p. 49, 109).

[92] Jelto Frerichs et Peter Eilts. *Development of a Physically/Chemically Based Approach for 2-Stage Ignition Delay Calculation in Medium Speed Dual-Fuel Engines*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2019 (cf. p. 49, 109).

[93] La Xiang, Gerasimos Theotokatos, Haining Cui, Keda Xu, Hongkai Ben et Yu Ding. « Parametric knocking performance investigation of spark ignition natural gas engines and dual fuel engines ». *Journal of Marine Science and Engineering* 8.6 (2020), p. 459 (cf. p. 49, 109).

[94] Ivan I Vibe et Franz Meissner. *Brennverlauf und kreisprozess von verbrennungsmotoren*. Verlag Technik, 1970 (cf. p. 49).

[95] Alexandre Menage, Anthony Gruand, Pierre Berg et Rainer Golloch. « The new dual fuel engine 35/44 DF from MAN diesel & turbo SE ». *CIMAC congress, Shanghai*. 2013 (cf. p. 50).

[96] Mikael Troberg, Kaj Portin et Artio Jarvi. « Update on Wärtsilä 4-stroke gas product development ». *CIMAC Congress, Shanghai, China, May*. 2013, p. 13-16 (cf. p. 50).

[97] Günter P Merker, Christian Schwarz et Rüdiger Teichmann. *Combustion engines development : mixture formation, combustion, emissions and simulation*. Springer Science & Business Media, 2011 (cf. p. 50).

[98] Marlene Wentsch. *Analysis of injection processes in an innovative 3D-CFD tool for the simulation of internal combustion engines*. Springer, 2019 (cf. p. 50).

[99] F Payri, J Benajes, X Margot et A Gil. « CFD modeling of the in-cylinder flow in direct-injection Diesel engines ». *Computers & fluids* 33.8 (2004), p. 995-1021 (cf. p. 51).

[100] Amin Yousefi, Hongsheng Guo, Shouvik Dev, Simon Lafrance et Brian Liko. « A study on split diesel injection on thermal efficiency and emissions of an ammonia/diesel dual-fuel engine ». *Fuel* 316 (2022), p. 123412 (cf. p. 52).

[101] Bahram Bahri, Mahdi Shahbakhti et Azhar Abdul Aziz. « Real-time modeling of ringing in HCCI engines using artificial neural networks ». *Energy* 125 (2017), p. 509-518 (cf. p. 53).

[102] Masoud Aliramezani, Armin Norouzi et Charles Robert Koch. « Support vector machine for a diesel engine performance and NOx emission control-oriented model ». *IFAC-PapersOnLine* 53.2 (2020), p. 13976-13981 (cf. p. 53).

[103] Behrouz Khoshbakht Irdmousa, Jeffrey Donald Naber, Javad Mohammadpour Velni, Hoseinali Borhan et Mahdi Shahbakhti. « Input-output Data-driven Modeling and MIMO Predictive Control of an RCCI Engine Combustion ». *IFAC-PapersOnLine* 54.20 (2021), p. 406-411 (cf. p. 54).

[104] Armin Norouzi, David Gordon, Masoud Aliramezani et Charles Robert Koch. « Machine learning-based diesel engine-Out NOx reduction using a plug-in PD-type iterative learning control ». *2020 IEEE Conference on Control Technology and Applications (CCTA)*. IEEE. 2020, p. 450-455 (cf. p. 54).

[105] Bin Wu, Zoran Filipi, Dennis Assanis, Denise M Kramer, Gregory L Ohl, Michael J Prucka et al. « Using artificial neural networks for representing the air flow rate through a 2.4 liter VVT engine ». *SAE transactions* (2004), p. 1676-1686 (cf. p. 55).

[106] Franz Chmela, Dimitar Dimitrov, Gerhard Pirker et Andreas Wimmer. « Konsistente Methodik zur Vorausrechnung der Verbrennung in Kolbenkraftmaschinen ». *MTZ-Motortechnische Zeitschrift* 67.6 (2006), p. 468-474 (cf. p. 61).

[107] N Kh Dyechenko, L Ye Magidovich et BP Pugachiuv. « Approximation of heat release characteristics in the cylinders of Diesel engines ». *Energomashinostroyeniye* 310 (1969), p. 73 (cf. p. 61).

[108] JI Ghojel. « Review of the development and applications of the Wiebe function : a tribute to the contribution of Ivan Wiebe to engine research ». *International Journal of Engine Research* 11.4 (2010), p. 297-312 (cf. p. 62).

[109] Gerhard Woschni. *A universally applicable equation for the instantaneous heat transfer coefficient in the internal combustion engine*. Rapp. tech. SAE Technical paper, 1967 (cf. p. 63, 73, 129).

[110] Günter F Hohenberg. « Advanced approaches for heat transfer calculations ». *SAE Transactions* (1979), p. 2788-2806 (cf. p. 64).

[111] F Dos Santos et L Le Moyne. « Spray atomization models in engine applications, from correlations to direct numerical simulations ». *Oil & Gas Science and Technology–Revue d'IFP Energies nouvelles* 66.5 (2011), p. 801-822 (cf. p. 65).

[112] Qiang Cheng, Hulkkonen Tuomo, Ossi Tapani Kaario et Larmi Martti. « Spray dynamics of HVO and EN590 diesel fuels ». *Fuel* 245 (2019), p. 198-211 (cf. p. 65).

[113] H Hiroyasu. « Supplementary comments : fuel spray characterization in diesel engines ». *Comustion Modeling in Reciprocating Engines Editecd* (1980), p. 369-408 (cf. p. 66).

[114] Hiro Hiroyasu et Masataka Arai. « Structures of fuel sprays in diesel engines ». *SAE transactions* (1990), p. 1050-1061 (cf. p. 66, 67).

[115] Jeffrey D Naber et Dennis L Siebers. « Effects of gas density and vaporization on penetration and dispersion of diesel sprays ». *SAE transactions* (1996), p. 82-111 (cf. p. 66).

[116] Dennis L Siebers. « Scaling liquid-phase fuel penetration in diesel sprays based on mixing-limited vaporization ». *SAE transactions* (1999), p. 703-728 (cf. p. 66, 67).

[117] AS Kuleshov. « Multi-zone DI diesel spray combustion model for thermodynamic simulation of engine with PCCI and high EGR level ». *SAE International Journal of Engines* 2.1 (2009), p. 1811-1834 (cf. p. 66-68).

[118] MM Elkotb. « Fuel atomization for spray modelling ». *Progress in Energy and Combustion Science* 8.1 (1982), p. 61-91 (cf. p. 67).

[119] Roland Clift, John R Grace et Martin E Weber. « Bubbles, drops, and particles » (2005) (cf. p. 68).

[120] J-S Wu, K-H Hsu, P-M Kuo et H-J Sheen. « Evaporation model of a single hydrocarbon fuel droplet due to ambient turbulence at intermediate Reynolds numbers ». *International journal of heat and mass transfer* 46.24 (2003), p. 4741-4745 (cf. p. 68).

[121] Dudley Brian Spalding. « Combustion of liquid fuels ». *Nature* 165.4187 (1950), p. 160-160 (cf. p. 68).

[122] GAE Godsave. « Studies of the combustion of drops in a fuel spray—the burning of single drops of fuel ». *Symposium (international) on combustion*. T. 4. 1. Elsevier. 1953, p. 818-830 (cf. p. 68).

[123] PA Lakshminarayanan, Yogesh V Aghav et Yu Shi. *Modelling diesel combustion*. T. 53. Springer, 2010 (cf. p. 69).

[124] S Ikura, T Kadota et H Hiroyasu. « Ignition delay of fuel sprays in a constant volume bomb ». *Trans. JSME* 41.345 (1975), p. 1559-1568 (cf. p. 69).

[125] HO Hardenberg et FW Hase. « An empirical formula for computing the pressure rise delay of a fuel from its cetane number and from the relevant parameters of direct-injection diesel engines ». *SAE Transactions* (1979), p. 1823-1834 (cf. p. 69).

[126] H Fujimoto, GT Sato, H Tanabe et al. « Illumination delay in diesel spray ». *JASE Paper* 149 (1980) (cf. p. 69).

[127] Claude Valery Ngayihi Abbe. « Contribution à la modélisation 0D de la combustion Diesel : Application au Biodiesel ». Thèse de doct. UNIVERSITE DE YAOUNDE I, 2016 (cf. p. 70).

[128] Bahram Jafari, Hassan Khatamnejad, Mohammad Hassan Shahavi et Davood Domeyri Ganji. « Simulation of dual fuel combustion of direct injection engine with variable natural gas premixed ratio ». *International Journal of Engineering* 32.9 (2019), p. 1327-1336 (cf. p. 71).

[129] Satbir Singh, Song-Charng Kong, Rolf D Reitz, Sundar R Krishnan et K Clark Midkiff. « Modeling and experiments of dual-fuel engine combustion and emissions ». *SAE transactions* (2004), p. 124-133 (cf. p. 71).

[130] Youtong Zhang, Song-Charng Kong et Rolf D Reitz. « Modeling and simulation of a dual fuel (diesel/natural gas) engine with multidimensional CFD ». *SAE transactions* (2003), p. 336-347 (cf. p. 71).

[131] Shuonan Xu, David Anderson, Amrit Singh, Mark Hoffman, Robert Prucka et Zoran Filipi. « Development of a phenomenological dual-fuel natural gas diesel engine simulation and its use for analysis of transient operations ». *SAE International Journal of Engines* 7.4 (2014), p. 1665-1673 (cf. p. 71).

[132] Z Liu et GA Karim. « Simulation of combustion processes in gas-fuelled diesel engines ». *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A : Journal of Power and Energy* 211.2 (1997), p. 159-169 (cf. p. 71).

[133] Hans-Philipp Walther, Stéphanie Schlatter, Georg Wachtmeister et Konstantinos Boulouchos. « Combustion models for lean-burn gas engines with pilot injection ». *MTZ worldwide* 73.2 (2012), p. 56-63 (cf. p. 71).

[134] Rhutwik Sanjay Pohekar, Bhaskar Tamma, Pramod S Mehta et Sreenivasa Rao Gubba. *Multizone Phenomenological Modeling of Dual-Fuel Combustion in Diesel Engines*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2020 (cf. p. 71).

[135] SR Krishnan et KK Srinivasan. « Multi-zone modelling of partially premixed low-temperature combustion in pilot-ignited natural-gas engines ». *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D : Journal of Automobile Engineering* 224.12 (2010), p. 1597-1622 (cf. p. 71).

[136] Federico Millo, Francesco Accurso, Andrea Piano, Navin Fogla, Gennaro Caputo, Alberto Cafari et al. « Development and Validation of a Multi-zone Predictive Combustion Model for Large-Bore Dual-Fuel Engines ». *SAE International Journal of Engines* 15.03-15-05-0038 (2021) (cf. p. 71).

[137] Dennis N Assanis, Zoran S Filipi, Scott B Fiveland et Michalis Syrimis. « A predictive ignition delay correlation under steady-state and transient operation of a direct injection diesel engine ». *J. Eng. Gas Turbines Power* 125.2 (2003), p. 450-457 (cf. p. 77).

[138] Shuonan Xu, Hirotaka Yamakawa, Keiya Nishida et Zoran Filipi. « Quasi-dimensional diesel engine combustion modeling with improved diesel spray tip penetration, ignition delay, and heat release submodels ». *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 139.11 (2017) (cf. p. 79).

[139] Federico Dalla Barba, Jietuo Wang et Francesco Picano. « Revisiting D 2-law for the evaporation of dilute droplets ». *Physics of Fluids* 33.5 (2021), p. 051701 (cf. p. 80).

[140] GM Faeth. « Evaporation and combustion of sprays ». *Progress in energy and combustion science* 9.1-2 (1983), p. 1-76 (cf. p. 80).

[141] Simon N Wood. « Thin plate regression splines ». *Journal of the Royal Statistical Society : Series B (Statistical Methodology)* 65.1 (2003), p. 95-114 (cf. p. 84).

[142] James A Miller et Craig T Bowman. « Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion ». *Progress in energy and combustion science* 15.4 (1989), p. 287-338 (cf. p. 85).

[143] Ronald K Hanson et Siamak Salimian. « Survey of rate constants in the N/H/O system ». *Combustion chemistry* (1984), p. 361-421 (cf. p. 85).

[144] Imran Mokashi, Asif Afzal, Sher Afghan Khan, Nur Azam Abdullah, Muhammad Hanafi Bin Azami, RD Jilte et al. « Nusselt number analysis from a battery pack cooled by different fluids and multiple back-propagation modelling using feed-forward networks ». *International Journal of Thermal Sciences* 161 (2021), p. 106738 (cf. p. 91).

[145] P Sibi, S Allwyn Jones et P Siddarth. « Analysis of different activation functions using back propagation neural networks ». *Journal of theoretical and applied information technology* 47.3 (2013), p. 1264-1268 (cf. p. 92).

[146] Jian-peng Sun, Guan-jun Lv et Xiao-gang Ma. « An improved typhoon simulation method based on Latin hypercube sampling method ». *Scientific Reports* 12.1 (2022), p. 9313 (cf. p. 92).

[147] S Sapna, A Tamilarasi, M Pravin Kumar et al. « Backpropagation learning algorithm based on Levenberg Marquardt Algorithm ». *Comp Sci Inform Technol (CS and IT)* 2 (2012), p. 393-398 (cf. p. 93).

[148] Herlan Silaban, Muhammad Zarlis et al. « Analysis of Accuracy and Epoch on Back-propagation BFGS Quasi-Newton ». *Journal of Physics : Conference Series*. T. 930. 1. IOP Publishing. 2017, p. 012006 (cf. p. 93).

[149] Orkhan Baghirli. *Comparison of Lavenberg-Marquardt, scaled conjugate gradient and Bayesian regularization backpropagation algorithms for multistep ahead wind speed forecasting using multilayer perceptron feedforward neural network*. 2015 (cf. p. 93).

[150] Toru Noda, Kazuya Hasegawa, Masaaki Kubo et Teruyuki Itoh. *Development of transient knock prediction technique by using a zero-dimensional knocking simulation with chemical kinetics*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2004 (cf. p. 108).

[151] GIANLUCA D'Errico, Tommaso Lucchini, Angelo Onorati, MARCO Mehl, T Faravelli, E Ranzi et al. *Development and experimental validation of a combustion model with detailed chemistry for knock predictions*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2007 (cf. p. 108).

[152] B Rossomando, C Fruncillo, I Arsie, M Comentale et M De Cesare. « A model based methodology for knock prediction in SI engines ». *IFAC-PapersOnLine* 52.5 (2019), p. 291-296 (cf. p. 108).

[153] Gautam Kalghatgi, Hassan Babiker et Jihad Badra. « A simple method to predict knock using toluene, n-heptane and iso-octane blends (TPRF) as gasoline surrogates ». *SAE International Journal of Engines* 8.2 (2015), p. 505-519 (cf. p. 108).

[154] Joshua Bradley Bettis. « Thermodynamic based modeling for nonlinear control of combustion phasing in HCCI engines » (2010) (cf. p. 109).

[155] Sebastian Hann, Lukas Urban, Michael Grill et Michael Bargende. « Prediction of burn rate, knocking and cycle-to-cycle variations of binary compressed natural gas substitutes in consideration of reaction kinetics influences ». *International Journal of Engine Research* 19.1 (2018), p. 21-32 (cf. p. 109).

[156] Keith J Richards, Peter K Senecal et Eric Pomraning. « CONVERGE 3.1 ». *Convergent Science, Madison, WI* (2020) (cf. p. 110, 155, 172).

[157] Per Ganestam. « Empirical knock model for automatic engine calibration ». *MSc Theses* (2010) (cf. p. 111).

[158] MA Kadi, N Akkouche, Sary Awad, K Loubar et Mohand Tazerout. « Kinetic study of transesterification using particle swarm optimization method ». *Heliyon* 5.8 (2019), e02146 (cf. p. 111).

[159] Colin R Ferguson et Allan T Kirkpatrick. *Internal combustion engines : applied thermosciences*. John Wiley & Sons, 2015 (cf. p. 112).

[160] Cherian Olikara et Gary L Borman. *A computer program for calculating properties of equilibrium combustion products with some applications to IC engines*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 1975 (cf. p. 112).

[161] C Radhakrishna Rao. « RA Fisher : The founder of modern statistics ». *Statistical science* (1992), p. 34-48 (cf. p. 112).

[162] MS Lounici, MA Benbellil, Khaled Loubar, DC Niculescu et Mohand Tazerout. « Knock characterization and development of a new knock indicator for dual-fuel engines ». *Energy* 141 (2017), p. 2351-2361 (cf. p. 115).

[163] Rupert G Miller et Rupert G Miller. « Normal univariate techniques ». *Simultaneous statistical inference* (1981), p. 37-108 (cf. p. 116).

[164] Fredrik Königsson, Per Stalhammar et Hans-Erik Angstrom. *Controlling the injector tip temperature in a diesel dual fuel engine*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2012 (cf. p. 125).

[165] Per A Risberg, Ludvig Adlercreutz, Miguel Gómez Aguilera, Tobias Johansson, Lars Stensiö et Hans-Erik Angstrom. *Development of a heavy duty nozzle coking test*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2013 (cf. p. 125).

[166] Dan Sykes, Guillaume de Sercey, Martin Gold, Richard Pearson et Cyril Crua. *Visual analyses of end of injection liquid structures and the behaviour of nozzle surface-bound fuel in a direct injection diesel engine*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2019 (cf. p. 125).

[167] Fabio E Czarneski, Stephan H Och et Luís M Moura. « Characterization of nozzle tip temperature of Diesel injector in a dual fuel engine ». *7th European Combustion Meeting*. 2015, p. 1-6 (cf. p. 125).

[168] LM Malbec, LM Pickett, R Payri, T Bazyn, M Meijer et A Kastengren. « Spray A nozzle tip temperature measurements ». *ECN workshop*. 2011 (cf. p. 125).

[169] Alex Gander, Dan Sykes, Raúl Payri, Guillaume De Sercey, Dave Kennaird, Martin Gold et al. « High-speed infrared measurement of injector tip temperature during diesel engine operation ». *Energies* 14.15 (2021), p. 4584 (cf. p. 125).

[170] Raul Payri, FJ Salvador, M Carreres et Joaquín De la Morena. « Fuel temperature influence on the performance of a last generation common-rail diesel ballistic injector. Part II : 1D model development, validation and analysis ». *Energy Conversion and Management* 114 (2016), p. 376-391 (cf. p. 125).

[171] Rafidah Rahim, Rizalman Mamat, Mohd Yusof Taib et Abdul Adam Abdullah. « Influence of fuel temperature on a diesel engine performance operating with biodiesel blended ». *Journal of Mechanical Engineering and Sciences* 2 (2012), p. 226-236 (cf. p. 125).

[172] J Shi, N Guerrassi, G Dober, K Karimi et Y Meslem. « Complex physics modelling of diesel injector nozzle flow and spray supported by new experiments ». *THIESEL 2014 Conference on Thermo-and Fluid Dynamic Processes in Direct Injection Engines*. 2014, p. 1-21 (cf. p. 125).

[173] Srinivas Anantharaman et Manoj Baskaran. *A research on factors affecting nozzle tip temperature in Diesel engines*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2015 (cf. p. 125).

[174] CA Finol et K Robinson. « Thermal modelling of modern engines : a review of empirical correlations to estimate the in-cylinder heat transfer coefficient ». *Proceedings of the institution of mechanical engineers, part D : journal of automobile engineering* 220.12 (2006), p. 1765-1781 (cf. p. 126).

[175] Mahfoudh Cerdoun, Carlo Carcasci et Adel Ghenaiet. « An approach for the thermal analysis of internal combustion engines' exhaust valves ». *Applied Thermal Engineering* 102 (2016), p. 1095-1108 (cf. p. 126, 127).

[176] MG Cooper, BB Mikic et MM Yovanovich. « Thermal contact conductance ». *International Journal of heat and mass transfer* 12.3 (1969), p. 279-300 (cf. p. 130, 132).

[177] MR Sridhar et MM Yovanovich. « Elastoplastic contact conductance model for isotropic conforming rough surfaces and comparison with experiments » (1996) (cf. p. 130, 131).

[178] Xiaoshan Pan, Xiaoyu Cui, Shaoshuai Liu, Zhenhua Jiang, Yinong Wu et Zhichao Chen. « Research progress of thermal contact resistance ». *Journal of Low Temperature Physics* 201 (2020), p. 213-253 (cf. p. 130).

[179] S Song et MM Yovanovich. « Relative contact pressure-Dependence on surface roughness and Vickers microhardness ». *Journal of thermophysics and heat transfer* 2.1 (1988), p. 43-47 (cf. p. 130).

[180] Frederick William Dittus. « Heat transfer in automobile radiators of the tubular type ». *Univ. of California Pub., Eng.* 2.13 (1930), p. 443-461 (cf. p. 132, 133).

[181] Youcef Sehili, Khaled Loubar, Lyes Tarabet, Mahfoudh Cerdoun et Clément Lacroix. « Effect of Composition Variability of a Syngas in a Spark Ignition Engine : an Experimental Study ». *Chemical Engineering Transactions* 96 (2022), p. 301-306 (cf. p. 136).

[182] David P Schmidt et Christopher J Rutland. « A new droplet collision algorithm ». *Journal of Computational Physics* 164.1 (2000), p. 62-80 (cf. p. 150).

[183] JD Naber et Rolf D Reitz. « Modeling engine spray/wall impingement ». *SAE transactions* (1988), p. 118-140 (cf. p. 150).

[184] AA Amsden. « A computer program for chemically reactive flows with sprays ». *Los Alamos National Laboratory Report LA-11560-MS* (1989) (cf. p. 150).

[185] Arthur H Lefebvre et Vincent G McDonell. *Atomization and sprays*. CRC press, 2017 (cf. p. 151).

[186] PK Senecal, E Pomraning, KJ Richards, TE Briggs, CY Choi, RM McDavid et al. « Multi-dimensional modeling of direct-injection diesel spray liquid length and flame lift-off length using CFD and parallel detailed chemistry ». *SAE transactions* (2003), p. 1331-1351 (cf. p. 152).

[187] PK Senecal, E Pomraning, KJ Richards et S Som. « Grid-convergent spray models for internal combustion engine computational fluid dynamics simulations ». *Journal of Energy Resources Technology* 136.1 (2014), p. 012204 (cf. p. 153).

[188] A Babajimopoulos, DN Assanis, DL Flowers, SM Aceves et RP Hessel. « A fully coupled computational fluid dynamics and multi-zone model with detailed chemical kinetics for the simulation of premixed charge compression ignition engines ». *International journal of engine research* 6.5 (2005), p. 497-512 (cf. p. 153).

[189] H Hiroyasu et To Kadota. « Models for combustion and formation of nitric oxide and soot in direct injection diesel engines ». *SAE transactions* (1976), p. 513-526 (cf. p. 153, 157).

[190] Christopher W Gross et Song-Charng Kong. « Performance characteristics of a compression-ignition engine using direct-injection ammonia–DME mixtures ». *Fuel* 103 (2013), p. 1069-1079 (cf. p. 154).

[191] Ebrahim Nadimi, Grzegorz Przybyła, David Emberson, Terese Løvås, Łukasz Ziółkowski et Wojciech Adamczyk. « Effects of using ammonia as a primary fuel on engine performance and emissions in an ammonia/biodiesel dual-fuel CI engine ». *International Journal of Energy Research* 46.11 (2022), p. 15347-15361 (cf. p. 154).

[192] Mohamed F Al-Dawody, Wisam Al-Obaidi, Emad D Aboud, Mohammed A Abdulwahid, Khaled Al-Farhany, Wasim Jamshed et al. « Mechanical engineering advantages of a dual fuel diesel engine powered by diesel and aqueous ammonia blends ». *Fuel* 346 (2023), p. 128398 (cf. p. 154).

[193] Leilei Xu et Xue-Song Bai. « Numerical investigation of engine performance and emission characteristics of an ammonia/hydrogen/n-heptane engine under RCCI operating conditions ». *Flow, Turbulence and Combustion* (2023), p. 1-18 (cf. p. 154).

[194] Omar Shafiq et Efstathios-Al Tingas. « Computational investigation of ammonia-hydrogen peroxide blends in HCCI engine mode ». *International Journal of Engine Research* 24.5 (2023), p. 2279-2294 (cf. p. 154).

[195] Kun Lin Tay, Wenming Yang, Siaw Kiang Chou, Dezhi Zhou, Jing Li, Wenbin Yu et al. « Effects of injection timing and pilot fuel on the combustion of a kerosene-diesel/ammonia dual fuel engine : a numerical study ». *Energy Procedia* 105 (2017), p. 4621-4626 (cf. p. 154).

[196] Jisoo Shin et Sungwook Park. « Numerical analysis for optimizing combustion strategy in an ammonia-diesel dual-fuel engine ». *Energy Conversion and Management* 284 (2023), p. 116980 (cf. p. 154).

[197] Xinlei Liu, Qinglong Tang et Hong G Im. « Enhancing ammonia engine efficiency through pre-chamber combustion and dual-fuel compression ignition techniques ». *Journal of Cleaner Production* 436 (2024), p. 140622 (cf. p. 154).

[198] Shouying Jin, Binyang Wu, Zhenyuan Zi, Puze Yang, Taifeng Shi et Junhong Zhang. « Effects of fuel injection strategy and ammonia energy ratio on combustion and emissions of ammonia-diesel dual-fuel engine ». *Fuel* 341 (2023), p. 127668 (cf. p. 155, 157, 158, 160).

[199] John K Dukowicz. « A particle-fluid numerical model for liquid sprays ». *Journal of computational Physics* 35.2 (1980), p. 229-253 (cf. p. 157).

[200] Zhiyu Han et Rolf D Reitz. « Turbulence modeling of internal combustion engines using RNG κ-ε models ». *Combustion science and technology* 106.4-6 (1995), p. 267-295 (cf. p. 157).

[201] Robert J Kee, Fran M Rupley et James A Miller. *Chemkin-II : A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics*. Rapp. tech. Sandia National Lab.(SNL-CA), Livermore, CA (United States), 1989 (cf. p. 157).

[202] Jennifer C Beale et Rolf D Reitz. « Modeling spray atomization with the Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor hybrid model ». *Atomization and sprays* 9.6 (1999) (cf. p. 157).

[203] Kalyanmoy Deb et Himanshu Gupta. « Introducing robustness in multi-objective optimization ». *Evolutionary computation* 14.4 (2006), p. 463-494 (cf. p. 158, 189).

[204] Jon C Helton et Freddie Joe Davis. « Latin hypercube sampling and the propagation of uncertainty in analyses of complex systems ». *Reliability Engineering & System Safety* 81.1 (2003), p. 23-69 (cf. p. 160).

[205] Junheng Liu, Anren Yao et Chunde Yao. « Effects of diesel injection pressure on the performance and emissions of a HD common-rail diesel engine fueled with diesel/methanol dual fuel ». *Fuel* 140 (2015), p. 192-200 (cf. p. 170).

[206] Zhiyong Li, Yang Wang, Zibin Yin, Heming Geng, Rui Zhu et Xudong Zhen. « Effect of injection strategy on a diesel/methanol dual-fuel direct-injection engine ». *Applied Thermal Engineering* 189 (2021), p. 116691 (cf. p. 171).

[207] Michael Saccullo, Timothy Benham et Ingemar Denbratt. *Dual fuel methanol and diesel direct injection HD single cylinder engine tests*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2018 (cf. p. 171).

[208] Yabin Dong, Ossi Kaario, Ghulam Hassan, Olli Ranta, Martti Larmi et Bengt Johansson. « High-pressure direct injection of methanol and pilot diesel : A non-premixed dual-fuel engine concept ». *Fuel* 277 (2020), p. 117932 (cf. p. 171).

[209] Le Ning, Qimeng Duan, Hailiang Kou et Ke Zeng. « Parametric study on effects of methanol injection timing and methanol substitution percentage on combustion and emissions of methanol/diesel dual-fuel direct injection engine at full load ». *Fuel* 279 (2020), p. 118424 (cf. p. 171).

[210] Lijiang Wei, Chunde Yao, Quangang Wang, Wang Pan et Guopeng Han. « Combustion and emission characteristics of a turbocharged diesel engine using high premixed ratio of methanol and diesel fuel ». *Fuel* 140 (2015), p. 156-163 (cf. p. 171).

[211] Xiaojun Yin, Guangzhao Yue, Junlong Liu, Hao Duan, Qimeng Duan, Hailiang Kou et al. « Investigation into the operating range of a dual-direct injection engine fueled with methanol and diesel ». *Energy* 267 (2023), p. 126625 (cf. p. 171).

[212] Guang-Lan Xu, Chun-De Yao et Christopher J Rutland. « Simulations of diesel–methanol dual-fuel engine combustion with large eddy simulation and Reynolds-averaged Navier–Stokes model ». *International Journal of Engine Research* 15.6 (2014), p. 751-769 (cf. p. 172).

[213] Hong-zhi Sheng, Li Chen et Cheng-kang Wu. « The droplet group micro-explosions in W/O diesel fuel emulsion sprays ». *SAE transactions* (1995), p. 1534-1542 (cf. p. 184).

[214] Wei Mingrui, Nguyen Thanh Sa, Richard Fiifi Turkson, Liu Jinping et Guo Guanlun. « Water injection for higher engine performance and lower emissions ». *Journal of the Energy Institute* 90.2 (2017), p. 285-299 (cf. p. 184).

[215] Osama H Ghazal. « Performance and combustion characteristic of CI engine fueled with hydrogen enriched diesel ». *International journal of hydrogen energy* 38.35 (2013), p. 15469-15476 (cf. p. 185).

[216] Sudarshan Gowrishankar et Anand Krishnasamy. « A relative assessment of emulsification and water injection methods to mitigate higher oxides of nitrogen emissions from biodiesel fueled light-duty diesel engine ». *Fuel* 308 (2022), p. 121926 (cf. p. 185).

[217] Mozhgan Rahimi Boldaji, Aimilios Sofianopoulos, Sotirios Mamalis et Benjamin Lawler. « Computational fluid dynamics investigations of the effect of water injection timing on thermal stratification and heat release in thermally stratified compression ignition combustion ». *International Journal of Engine Research* 20.5 (2019), p. 555-569 (cf. p. 186).

[218] Aqian Li et Zhaolei Zheng. « Effect of spark ignition timing and water injection temperature on the knock combustion of a GDI engine ». *Energies* 13.18 (2020), p. 4931 (cf. p. 186).

[219] Mohamed H Morsy. « Assessment of a direct injection diesel engine fumigated with ethanol/water mixtures ». *Energy Conversion and Management* 94 (2015), p. 406-414 (cf. p. 186).

[220] V Chintala et KA Subramanian. « Hydrogen energy share improvement along with NOx (oxides of nitrogen) emission reduction in a hydrogen dual-fuel compression ignition engine using water injection ». *Energy conversion and management* 83 (2014), p. 249-259 (cf. p. 186).

[221] Seungchul Woo et Kihyung Lee. « Effect of injection strategy and water content on water emulsion fuel engine for low pollutant compression ignition engines ». *Fuel* 343 (2023), p. 127809 (cf. p. 186).

[222] Ahmad Muhsin Ithnin, Hirofumi Noge, Hasannuddin Abdul Kadir et Wira Jazair. « An overview of utilizing water-in-diesel emulsion fuel in diesel engine and its potential research study ». *Journal of the Energy Institute* 87.4 (2014), p. 273-288 (cf. p. 186).

[223] Rafal Stocki. « A method to improve design reliability using optimal Latin hypercube sampling ». *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences* 12.4 (2005), p. 393 (cf. p. 188, 202).

[224] Xiwen Cai, Haobo Qiu, Liang Gao, Li Wei et Xinyu Shao. « Adaptive radial-basis-function-based multifidelity metamodeling for expensive black-box problems ». *AIAA journal* 55.7 (2017), p. 2424-2436 (cf. p. 188, 202).

[225] S Khalfallah et HE Lehtihet. « A multi-objective optimization methodology based on multi-mid-range meta-models for multimodal deterministic/robust problems ». *Structural and Multidisciplinary Optimization* 60.6 (2019), p. 2373-2389 (cf. p. 189, 204).

[226] Shmuel Rippa. « An algorithm for selecting a good value for the parameter c in radial basis function interpolation ». *Advances in Computational Mathematics* 11 (1999), p. 193-210 (cf. p. 189).

[227] Wenlong Li, Min-Qian Liu et Boxin Tang. « A method of constructing maximin distance designs ». *Biometrika* 108.4 (2021), p. 845-855 (cf. p. 189, 202).

[228] Ivan Arsie, Fausto Di Genova, Cesare Pianese, Marco Sorrentino, Gianfranco Rizzo, Antonello Caraceni et al. *Development and identification of phenomenological models for combustion and emissions of common-rail multi-jet Diesel engines*. Rapp. tech. SAE Technical Paper, 2004 (cf. p. 194).

[229] Jun Liu, Jiaxiang Yi, Qi Zhou et Yuansheng Cheng. « A sequential multi-fidelity surrogate model-assisted contour prediction method for engineering problems with expensive simulations ». *Engineering with Computers* (2022), p. 1-19 (cf. p. 199).

[230] Pramudita Satria Palar, Takeshi Tsuchiya et Geoffrey Thomas Parks. « Multi-fidelity non-intrusive polynomial chaos based on regression ». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 305 (2016), p. 579-606 (cf. p. 199).

[231] Guangyong Sun, Guangyao Li et Qing Li. « Variable fidelity design based surrogate and artificial bee colony algorithm for sheet metal forming process ». *Finite Elements in Analysis and Design* 59 (2012), p. 76-90 (cf. p. 199).

[232] Jun Tao et Gang Sun. « Application of deep learning based multi-fidelity surrogate model to robust aerodynamic design optimization ». *Aerospace Science and Technology* 92 (2019), p. 722-737 (cf. p. 199).

[233] Slawomir Koziel et Leifur T Leifsson. « Multi-objective airfoil design using variable-fidelity CFD simulations and response surface surrogates ». *10th AIAA multidisciplinary design optimization conference*. 2014, p. 0289 (cf. p. 199).

[234] Andrew March et Karen Willcox. « Constrained multifidelity optimization using model calibration ». *Structural and Multidisciplinary Optimization* 46 (2012), p. 93-109 (cf. p. 199).

[235] Shawn E Gano, John E Renaud et Brian Sanders. « Hybrid variable fidelity optimization by using a kriging-based scaling function ». *Aiaa Journal* 43.11 (2005), p. 2422-2433 (cf. p. 199, 208).

[236] Jie Ren, Leifur T Leifsson, Slawomir Koziel et Yonatan Tesfahunegn. « Multi-fidelity aerodynamic shape optimization using manifold mapping ». *57th AIAA/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference*. 2016, p. 0419 (cf. p. 199).

[237] Ping Jiang, Tingli Xie, Qi Zhou, Xinyu Shao, Jiexiang Hu et Longchao Cao. « A space mapping method based on Gaussian process model for variable fidelity metamodeling ». *Simulation Modelling Practice and Theory* 81 (2018), p. 64-84 (cf. p. 199).

[238] Peng Hao, Shaojun Feng, Yuwei Li, Bo Wang et Huihan Chen. « Adaptive infill sampling criterion for multi-fidelity gradient-enhanced kriging model ». *Structural and Multidisciplinary Optimization* 62 (2020), p. 353-373 (cf. p. 199).

[239] Loic Le Gratiet et Josselin Garnier. « Recursive co-kriging model for design of computer experiments with multiple levels of fidelity ». *International Journal for Uncertainty Quantification* 4.5 (2014) (cf. p. 199).

[240] Daniel L Clark, Admir Makas et Ramana V Grandhi. « Status of multifidelity model management strategies in aircraft design ». *18th AIAA/ISSMO multidisciplinary analysis and optimization conference*. 2017, p. 4431 (cf. p. 199).

[241] Penghui Liu et Jing Liu. « Multi-leader PSO (MLPSO) : A new PSO variant for solving global optimization problems ». *Applied Soft Computing* 61 (2017), p. 256-263 (cf. p. 202).

[242] Qi Zhou, Xinyu Shao, Ping Jiang, Zhongmei Gao, Chaochao Wang et Leshi Shu. « An active learning metamodeling approach by sequentially exploiting difference information from variable-fidelity models ». *Advanced Engineering Informatics* 30.3 (2016), p. 283-297 (cf. p. 202).

[243] Zhong-Hua Han et Stefan Görtz. « Hierarchical kriging model for variable-fidelity surrogate modeling ». *AIAA journal* 50.9 (2012), p. 1885-1896 (cf. p. 202).

[244] Aditya Narayan Bhatt et Nitin Shrivastava. « Application of artificial neural network for internal combustion engines : a state of the art review ». *Archives of Computational Methods in Engineering* 29.2 (2022), p. 897-919 (cf. p. 202).

[245] Robert Lewis et Stephen Nash. « A multigrid approach to the optimization of systems governed by differential equations ». *8th symposium on multidisciplinary analysis and optimization*. 2000, p. 4890 (cf. p. 204).

[246] Rommel G Regis. « Evolutionary programming for high-dimensional constrained expensive black-box optimization using radial basis functions ». *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* 18.3 (2013), p. 326-347 (cf. p. 204).

[247] Deb Kalyanmoy et Gupta Himanshu. « Introducing robustness in multiobjective optimization ». *Evolutionary Computation Journal* 14.4 (2006), p. 463-494 (cf. p. 207).

[248] Loic Le Gratiet. « Multi-fidelity Gaussian process regression for computer experiments ». Thèse de doct. Université Paris-Diderot-Paris VII, 2013 (cf. p. 208).

[249] Qi Zhou, Yuda Wu, Zhendong Guo, Jiexiang Hu et Peng Jin. « A generalized hierarchical co-Kriging model for multi-fidelity data fusion ». *Structural and Multidisciplinary Optimization* 62 (2020), p. 1885-1904 (cf. p. 208).

[250] Marc C Kennedy et Anthony O'Hagan. « Predicting the output from a complex computer code when fast approximations are available ». *Biometrika* 87.1 (2000), p. 1-13 (cf. p. 208).

[251] GP Smith, DM Golden, M Frenklach, NW Moriarty, B Eiteneer, M Goldenberg et al. « GRI 3.0 Mechanism, Version 3.0 7/30/99 ». *Gas Research Institute, Chicago, IL. http ://combustion. berkeley. edu/gri-mech* (1999) (cf. p. 215).

COLLEGES BRETAGNE LOIRE SCIENCES POUR L'INGENIEUR ET LE NUMERIQUE

IMT Atlantique
Bretagne-Pays de la Loire
École Mines-Télécom

Titre : Contribution à la modélisation pour l'optimisation des performances et des émissions polluantes d'un moteur diesel fonctionnant en mode dual fuel.

Mots clés : Moteur à combustion interne, dual fuel, modélisation, optimisation, performances, émissions, cliquetis.

Résumé : Les moteurs à combustion interne jouent un rôle crucial dans notre société moderne, alimentant une variété d'applications allant des transports aux générateurs d'énergie. Face aux défis croissants en matière d'efficacité, d'émissions et de durabilité, une compréhension approfondie et une modélisation précise de la combustion sont essentielles. Cette thèse se consacre à la modélisation de la combustion dans les moteurs à combustion interne en se concentrant sur le mode dual fuel. L'objectif est de contribuer de manière significative à la compréhension, à la modélisation et à l'optimisation de la combustion dans ces moteurs. Les contributions incluent l'amélioration des modèles existants, la validation expérimentale, la caractérisation des performances des moteurs dans divers modes de combustion, ainsi que la proposition de stratégies de modélisation et d'optimisation pour réduire les émissions et améliorer l'efficacité énergétique. La thèse présente plusieurs axes d'exploitation basés sur divers outils et approches. Un modèle prédictif 0D a été développé pour un moteur dual fuel fonctionnant avec un mélange de gaz naturel et d'hydrogène comme carburant primaire. Ensuite, la thèse aborde la modélisation des problèmes limitant le fonctionnement du moteur dual fuel, notamment le cliquetis et la surchauffe des injecteurs. La décarbonation de ces moteurs est ensuite mise en œuvre via l'utilisation de combustibles alternatifs tels que l'ammoniac et le méthanol, en se basant sur des simulations 3D. Enfin, des méta-modèles innovants ont été développés à des fins d'optimisation des moteurs, incluant une nouvelle approche de modélisation multi-fidélité et une optimisation multi-objectifs. Les résultats de cette thèse apportent des avancées significatives dans la modélisation et l'optimisation des moteurs à combustion interne fonctionnant en mode dual fuel, proposant des solutions potentielles pour améliorer l'efficacité énergétique et réduire les émissions, répondant ainsi aux défis environnementaux et énergétiques actuels et futurs.

Title : Contribution to modeling for optimizing the performance and pollutant emissions of a diesel engine operating in dual fuel mode.

Keywords : Internal combustion engine, dual fuel, modeling, optimization, performance, emissions, knock.

Abstract : Internal combustion engines play a crucial role in our modern society, powering a variety of applications ranging from transportation to power generators. Given the growing challenges related to efficiency, emissions, and sustainability, a deep understanding and precise modeling of combustion are essential. This thesis is devoted to modeling dual fuel engines. The aim is to make significant contributions to the understanding, modeling, and optimization of combustion in these engines. Contributions include the improvement of existing models, experimental validation, characterization of engine performance in various combustion modes, and the proposal of modeling and optimization strategies to reduce emissions and improve energy efficiency. The thesis presents several lines of exploitation based on various tools and approaches. A 0D predictive model was developed for dual fuel engine operating with a mixture of natural gas and hydrogen as the primary fuel. Subsequently, the thesis addresses the modeling of issues limiting the operation of the dual fuel engine, such as knocking and injector overheating. The decarbonization of dual fuel engines is then implemented using alternative fuels such as ammonia and methanol, based on 3D simulations. Finally, innovative meta-models have been developed for engine optimization, including a new multi-fidelity modeling approach and multi-objective optimization. The thesis results provide significant advancements in the modeling and optimization of internal combustion engines operating in dual fuel mode, proposing potential solutions to improve energy efficiency and reduce emissions, thereby addressing current and future environmental and energy challenges.