

Etude de la combustion HCCI du GNC enrichi à l'hydrogène à l'aide de Chemkin-Pro

Tayeb Ouksel *, Abdelaziz Chelghoum et Abdelbaki Maméri

Département de Génie Mécanique, Faculté des Sciences et Sciences Appliquées
Université Larbi Ben M'hidi, B.P. 358, 04000, Oum El Bouaghi, Algérie

(reçu le 10 Août 2017 - accepté le 25 Septembre 2017)

Résumé - L'objectif principal de ce travail de recherche était d'étudier les effets de l'addition de l'hydrogène H_2 sur quelques caractéristiques thermochimiques de la combustion du GNC (Gaz Naturel Comprimé) à base de méthane CH_4 dans un moteur thermique. Afin d'assurer un bon rapport puissance/ consommation et pour répondre aux vœux des écologistes, on présente dans le présent travail une nouvelle piste de recherche sur un nouveau mode de combustion qui permet de s'affranchir en partie des systèmes de post-traitement des gaz d'échappement devenus très complexes et trop coûteux. Ce mode de combustion connu sous le nom 'HCCI', (Homogeneous Charge Compression Ignition). Les nouveaux concepts de combustion doivent permettre de réduire à la source les émissions polluantes. La combustion homogène pauvre est l'une des solutions qui répond à ces exigences. Pour ce faire, nous avons utilisé le code de simulation Chemkin-Pro [1] pour suivre les évolutions de la température, de la pression et des émissions polluantes pour différentes quantités d'hydrogène ajouté. Cette étude a montré que l'ajout d'hydrogène au GNC est une alternative assez intéressante. Elle conduit à une diminution des délais d'inflammation, c'est-à-dire une augmentation de la réactivité et une diminution des émissions polluantes (exclusivement le NO et le CO_2).

Abstract - The main purpose of this research is to study the effects of the hydrogen addition on some thermo chemical characteristics of the combustion of CNG type (Compressed Natural Gas) that is based on CH_4 methane in a heat engine. In order to ensure a good ratio between power and consumption and to meet the demands of environmentalists, we present in this work new research perspectives on a new combustion mode that eliminates part of post-processing systems for gas exhaust which becomes very complex and too expensive. The latter is known as 'HCCI', (Homogeneous Charge Compression Ignition). The new combustion concepts should reduce noxious emissions at source. Poor homogeneous combustion is one of the solutions that meet these requirements. To do this, the Chemkin-Pro code [1] has been used to monitor changes respectively of temperature, pressure and emissions for various amounts of added hydrogen. This study showed that adding hydrogen to compressed natural gas is an interesting alternative. It leads to a decrease in time of ignition that is to say an increase in reactivity and a decrease in polluting emissions (exclusively monoxide of nitrogen NO and dioxide of carbon CO_2).

Mots clés: Mode de combustion HCCI-GazNaturel Comprimé - Modèle Multi-zone - Enrichissement par de l'hydrogène - Chemkin-Pro.

1. INTRODUCTION

La volonté du législateur en matière de respect de l'environnement a obligé l'industrie automobile à se pencher sur d'autres sources d'énergie moins polluantes que les hydrocarbures et aussi sur l'optimisation des moteurs de nos véhicules. Dans l'attente de la généralisation de motorisations encore moins polluantes (moteurs fonctionnant à l'hydrogène, pile à combustible, véhicule électrique, etc...), les moteurs alimentés par des carburants de substitution représentent une alternative intéressante au moteur fonctionnant avec les carburants conventionnels (essence et carburant diesel).

* ouksel@yahoo.fr

Les études sur l'utilisation du gaz naturel à l'état pur comme carburant de substitution en remplacement des énergies fossiles, se sont beaucoup développées ces dernières années. Le gaz naturel est un mélange gazeux qui possède un fort potentiel dans l'aspect dépollution, mais aussi dans l'aspect performance quant à son utilisation comme carburant.

Par contre, le mélange du gaz naturel avec l'hydrogène reste un domaine très peu étudié. On a commencé à s'intéresser à la combustion de ce genre de mélange que depuis peu de temps. Quelques articles seulement ont été publiés sur ce sujet [3, 4, 7].

L'ajout d'hydrogène au gaz naturel donne la possibilité au moteur de fonctionner avec un mélange pauvre sous des conditions de charge partielle.

Le gaz naturel étant plus léger que l'air, il se disperse et se dilue rapidement dans l'air ambiant. Contrairement à l'essence et au gaz du pétrole liquéfié, il s'enflamme uniquement quand sa concentration dans l'air se situe entre 5 et 15 %. En dessous de 5 %, le mélange est trop pauvre pour brûler et au-dessus de 15 %, le mélange est trop riche et ne brûlera pas non plus. Le point d'inflammation du gaz naturel est d'approximativement 580 °C, pour le diesel, il est de 260 °C, alors que l'essence s'enflamme à 220 °C. Le gaz naturel prend donc moins facilement feu que le diesel et l'essence.

Le gaz naturel est transporté en toute sécurité par gazoducs souterrains. Ceci permet aussi de distribuer du gaz naturel dans les stations-service des zones à forte densité de population.

Un réservoir de gaz naturel résiste mieux à une collision qu'un réservoir à essence traditionnel. Le gaz naturel est stocké dans des cylindres dont la paroi mesure 10 à 20 mm d'épaisseur et qui sont réalisés en matériaux durables et comprennent des dispositifs de sécurité intégrés.

Les véhicules roulant au gaz naturel sont actuellement plus chers que ceux fonctionnant avec les carburants traditionnels. Néanmoins, le gaz naturel véhicule est significativement moins cher que les carburants classiques tels que l'essence ou le diesel: 1 kg de gaz naturel comprimé coûte à la pompe de 30 à 40 % moins cher qu'un litre de diesel.

L'écart de prix entre un véhicule au gaz et un véhicule essence ou diesel va diminuer au fil du temps.

Grâce à la combustion plus propre du gaz naturel, il y aura moins de frais d'entretien et la durée de vie du moteur est nettement plus longue que celle d'un moteur essence ou diesel.

En plus, le gaz naturel possède d'autres avantages tels que:

- Couple disponible à bas régime plus élevé qu'à l'essence.
- Stabilité de fonctionnement accrue.
- Bruits de fonctionnement atténués.
- Démarrages en richesse stoechiométrique possibles.
- Indice d'octane élevé.

L'objectif de cette étude consiste à évaluer le potentiel d'utilisation du GNC et d'hydrogène en mélanges dans les moteurs à combustion interne. Une approche analytique basée sur la modélisation 0D en décomposant la chambre de combustion du moteur au moment de la combustion en 40 zones fictives a été élaborée.

Cinq (05) types de mélanges de GNC enrichi à l'hydrogène H_2 ont été étudiés en associant le concept de la combustion HCCI.

2. MODELE MATHEMATIQUE

Le modèle mathématique utilisé dans la présente étude dit 'multi-zones' [2, 15], décompose la chambre de combustion du moteur en 40 zones fictives. Chaque zone est traitée comme un réacteur homogène fermé (de masse constante). La pression est uniforme dans toutes les zones, et la somme des volumes individuels de toutes les zones est égale au volume géométrique instantané du cylindre [15]. L'échange de chaleur inter-zonale est négligé, tandis que celui avec les parois est pris en considération par le biais de la loi de Woschni modifiée [9].

2.1 Conservation des espèces

$$\rho^i \times \frac{dY_k^i}{dt} = \dot{w}_k^i \times W_k \quad \text{pour } i=1, \dots, N_{\text{zones}} \quad (1)$$

Où ρ^i , Y_k^i , W_k et $\dot{w}_k^i$ sont respectivement: la masse volumique, la fraction massique, la masse molaire et le taux de production molaire de l'espèce k dans la zone « i ».

2.2 Energie interne

La température dans une zone « i » est déterminée de la façon suivante: lorsque l'angle de rotation du vilebrequin est inférieur à un angle de transition θ_t pré-défini, la température est calculée à partir d'un code CFD [12, 17].

$$T^i = T_{\text{profite}}^i(t) \quad \text{si } \theta(t) \leq \theta_t \quad (2)$$

Au-delà de cet angle θ_t , la température locale dans la zone « i » est déterminée à partir de l'équation de conservation d'énergie (premier principe de la thermodynamique):

$$\rho^i \cdot C_v^i \cdot \frac{dT^i}{dt} = - \sum_{k=1}^{K_{\text{gas}}} \dot{w}_k^i \cdot W_k \cdot u_k^i - \frac{P^i}{V^i} \cdot \frac{dV^i}{dt} - \frac{h_w^i (T^i - T_w) A_w^i}{V^i} \quad \text{si } \theta(t) > \theta_t \quad (3)$$

Où P^i , V^i , T^i sont respectivement la pression, le volume et la température des gaz dans la zone « i » considérée. C_v^i , La capacité calorifique du mélange à volume constant dans la zone « i ». u_k^i , représente l'énergie interne de l'espèce « k » contenu dans la zone « i ». h_w^i et A_w^i , sont respectivement le coefficient d'échange et la surface d'échange zone « i »-parois. Le code de calcul utilisé dans la présente étude dit «Chemkin-Pro» considère la surface d'échange zone-parois A_w^i comme une fraction de la surface totale d'échange (**Table 2**). Le coefficient d'échange zone-parois h_w^i est déterminé à partir de la loi de Woschni modifié [9].

2.3 Cinétique chimique

Le taux de production/destruction des espèces chimiques est modélisé par la loi d'action de masse, qui dépend de la température. Une réaction élémentaire contenant « K » espèces intervenant dans « i » réactions peut être représentée par:

$$\sum_{k=1}^K v_{ki}' \cdot \chi_k \Leftrightarrow \sum_{k=1}^K v_{ki}'' \cdot \chi_k \quad (4)$$

$$\dot{w}_k^i = (v_{ki}'' - v_{ki}') \cdot q_i \quad (5)$$

$$q_i = k_{f,i} \cdot \prod_{k=1}^K [X_k]^{v_{ki}'} - k_{r,i} \cdot \prod_{k=1}^K [X_k]^{v_{ki}''} \quad (6)$$

Où v_{ki} , χ_k , $\dot{w}_{ki}$, q_i , $k_{f,i}$ et $k_{r,i}$ sont les coefficients stochiométriques, les symboles chimiques, le taux de production de l'espèce « k », le taux d'avancement pour la réaction « i », la constante de vitesse directe et inverse de la réaction « i » respectivement.

Les constantes de vitesse directe et inverse sont déterminées à partir des relations suivantes:

$$k_{f,i} = A_i \cdot T^{\beta_i} \cdot \exp\left(\frac{-E_i}{R \cdot T}\right) \quad (7)$$

$$k_{r,i} = \frac{k_{f,i}}{K_{c,i}} \quad (8)$$

$$K_{c,i} = K_{p,i} \cdot \left(\frac{P_{atm}}{R \cdot T}\right)^{\sum_{k=1}^K (v_{ki}^* - v_{ki})} \quad (9)$$

$$K_{p,i} = \exp\left(\frac{\Delta S_0^i}{R} - \frac{\Delta H_0^i}{R \cdot T}\right) \quad (10)$$

Où A_i , β_i , E_i et $K_{p,i}$ sont respectivement: un facteur pré-exponentielle, exposant de la température, l'énergie d'activation et la constante d'équilibre de la réaction « i ».

2.4 Les propriétés thermodynamiques

Les propriétés thermodynamiques du fluide moteur comme la capacité calorifique à pression constante, l'enthalpie et l'entropie sont calculées à partir des tables NASA [13] comme suit:

$$\frac{C_{p,k}}{R} = \sum_{n=1}^5 a_{n,k} \cdot T^{n-1} \quad (11)$$

$$\frac{h_k^0}{RT} = a_{1k} + \sum_{n=1}^5 \frac{a_{n,k}}{n} \cdot T_k^{n-1} + \frac{a_{6k}}{T_k} \quad (12)$$

$$\frac{s_k^0}{R} = a_{1k} \cdot \ln T_k + \sum_{n=1}^4 \frac{a_{n+1,k}}{n} \cdot T_k^n + a_{7k} \quad (13)$$

3. RESULTATS ET DISCUSSION

Les paramètres initiaux du moteur sont pris du travail de Aceves *et al.*, [17]. - Nombre d'angle du vilebrequin, 300 degrés; -Taux de compression, 10.5; -Cylindrée unitaire, 1378 cm³; -Rapport longueur de la bielle / rayon manivelle, 2.7871; -Vitesse de rotation, 2007 rpm; -Angle de calcul de départ (RFA), 205°; -Température à RFA, 573K; -Pression à RFA, 3.18 bars; -Richesse, 0.4; -Constantes de corrélation du coefficient d'échange, a=0.035, b=0.73, c=0.0; -Alésage, 11.41 cm; -Course, 13.48 cm; -Température moyenne des parois, 424 K; -Corrélation de Woschni pour le calcul de la vitesse moyenne de la charge à l'intérieur du cylindre, $C_{11}=2.28$, $C_{12}=0.308$, $C_2=3.24 \times 10^{-3}$; -Rapport de la vitesse de swirl à la vitesse moyenne du piston, 0.5.

Les caractéristiques techniques du moteur étudié [17] sont regroupées dans le **Tableau 1**.

La numérotation des zones est faite dans un ordre croissant des parois vers le cœur de la chambre de combustion (c'est-à-dire de la zone #1 la plus froide jusqu'à la zone #40 la plus chaude).

Tableau 1: Caractéristiques techniques du moteur étudié [17]

Paramètres	Values
Vitesse de rotation	2007 rpm
Taux de compression	10.5
Course	13.48 cm
Alésage	11.41 cm
Rapport Longueur de bielle/rayon manivelle	2.7871
Cylindrée unitaire	1378 cm³
Retard Fermeture Admission (RFA)	25 après PMB
Mécanisme réactionnel (53 espèces et 325 réactions)	GRI - MECH 3,0 [16]
Carburant	CNG enrichi à H ₂
Pression à RFA	3.18 bars
Température à FRA	573 %
Richesse moyenne	0,40
Fraction des gaz résiduels	0 %

Le **tableau 2** regroupe les caractéristiques des zones utilisées dans la présente étude.

Tableau 2: Configuration des zones [12]

Zone#	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Region	Crevice												Boundary							
Mass%	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	1	1	1.5	1.5	1.5	1.5	2	2
Area%	1.5	1	1.5	1	1.5	1	1.5	1	1.5	1	1.5	1	2.5	2	2.5	3	3	2.5	2	2.5
Zone#	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
Region	Layer		Core																	
Mass%	2	2	3	3	3	3	3	3	3	3	4.5	4.5	4.5	4.5	5.5	5.5	5.5	5.5	7	7
Area%	3.5	4	3.5	4	3.5	4	3.5	4	3.5	4	3.5	4	2.5	2.5	2.5	2.5	2.5	2.5	2.5	2.5

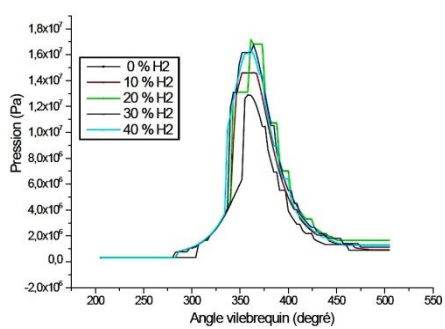


Fig. 1: Evolutions de la pression pour différents mélanges de GNC+H₂ à iso-richesse ($\phi = 0.4$)

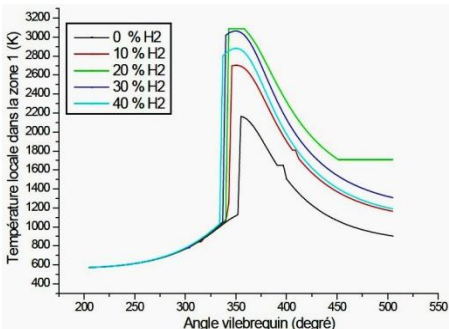


Fig. 2: Evolutions de la température locale dans la zone 1 pour différents mélanges de GNC+H₂ ($\phi = 0.4$)

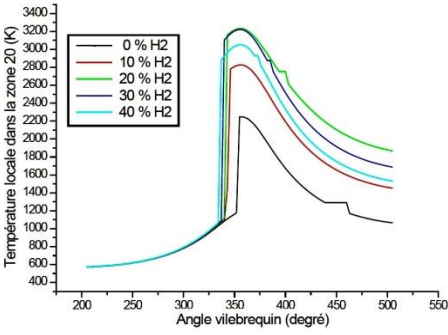


Fig. 3: Evolutions de la température locale dans la zone 20 pour différents mélanges de GNC+H₂ à iso-richesse ($\phi = 0.4$)

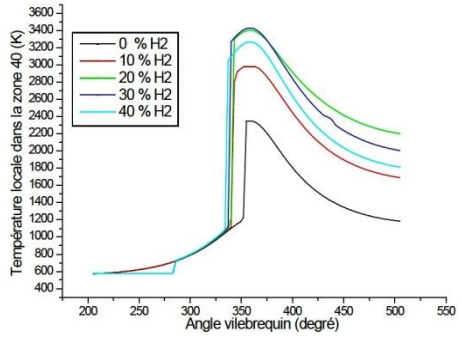


Fig. 4: Evolutions de la température locale dans la zone 40 pour différents mélanges de GNC + H₂ à iso-richesse ($\phi = 0.4$)

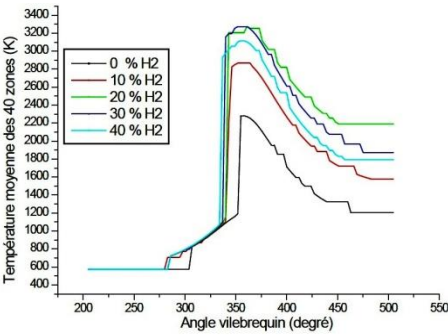


Fig. 5: Evolutions de la température moyenne des 40 zones pour différents mélanges de GNC + H₂ à iso-richesse ($\phi = 0.4$)

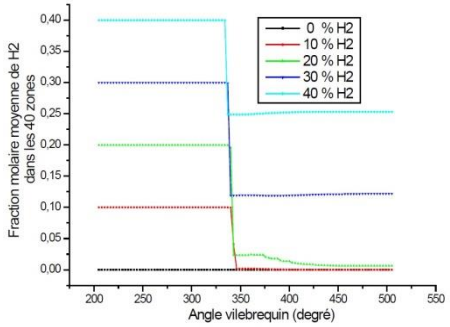


Fig. 6: Evolution de la fraction molaire de H₂ en fonction de l'angle vilebrequin pour différents mélanges GNC + H₂ à iso-richesse ($\phi = 0.4$)

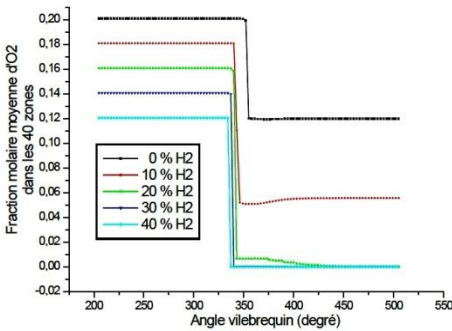


Fig. 7: Evolution de la fraction molaire de O₂ en fonction de l'angle vilebrequin pour différents mélanges GNC + H₂ à iso-richesse ($\phi = 0.4$)

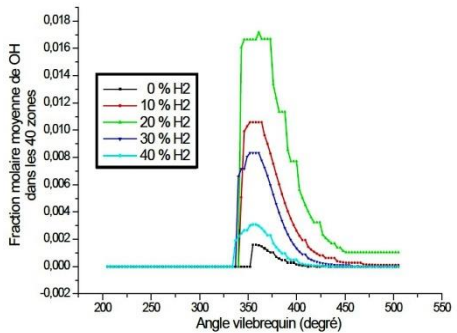


Fig. 8: Evolution de la fraction molaire du radical OH en fonction de l'angle vilebrequin pour différents mélanges GNC + H₂ à iso-richesse ($\phi = 0.4$)

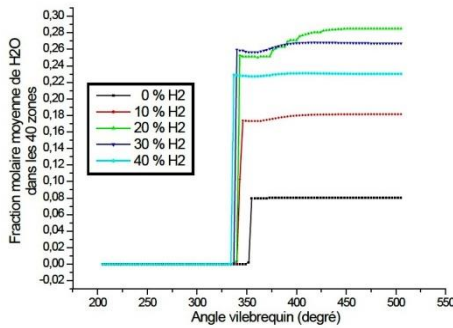


Fig. 9: Evolution de la fraction molaire de H₂O en fonction de l'angle vilebrequin pour différents mélanges GNC + H₂ à iso-richeesse ($\phi = 0.4$)

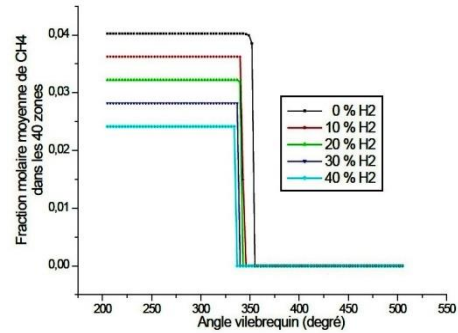


Fig. 10: Evolution de la fraction molaire de CH₄ en fonction de l'angle vilebrequin pour différents mélanges GNC + H₂ à iso-richeesse ($\phi = 0.4$)

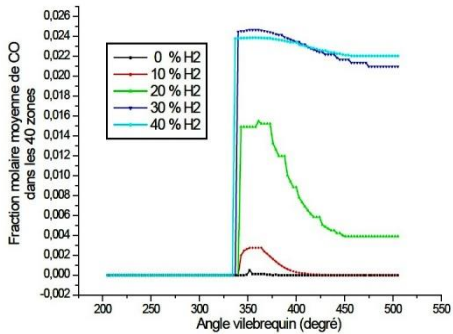


Fig. 11: Evolution de la fraction molaire de CO en fonction de l'angle vilebrequin pour différents mélanges GNC + H₂ à iso-richeesse ($\phi = 0.4$)

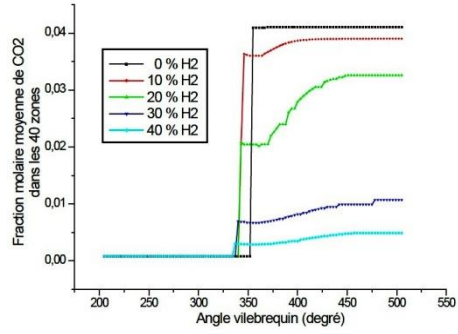


Fig. 12: Evolution de la fraction molaire de CO₂ en fonction de l'angle vilebrequin pour différents mélanges GNC + H₂ à iso-richeesse ($\phi = 0.4$)

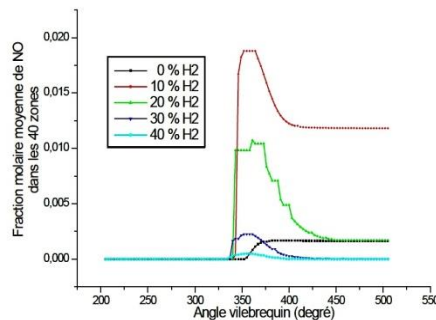


Fig. 13: Evolution de la fraction molaire de NO en fonction de l'angle vilebrequin pour différents mélanges GNC + H₂ à iso-richeesse ($\phi = 0.4$)

Nous avons étudié l'effet de l'ajout d'hydrogène sur la température, la pression et les espèces majoritaires de la combustion du GNC, dans une chambre de combustion

d'un moteur thermique. Cette étude a été réalisée avec le modèle 'Multi-Zones' de 'Chemkin-Pro'.

Des figures 1, 2, 3, 4, et 5, on voit qu'en augmentant la fraction molaire de l'hydrogène dans le carburant (de 0 % H₂, 10 % H₂, 20 % H₂ et 30 % H₂ et 40 % H₂), le maximum de la pression et de la température du cylindre se rapproche de la position du point mort haut et augmente au fur et à mesure de l'enrichissement du mélange par l'hydrogène.

De plus, Lors de la phase de la combustion, l'inflammation du mélange carburé est une réaction fortement exothermique. Cet apport d'énergie provoque alors une élévation brusque de la température et de la pression aussi. Ce qui explique l'allure des courbes caractérisées par des montées très rapides.

En ce qui concerne l'effet de l'addition d'hydrogène sur la combustion du GNC, on remarque bien que lorsque la proportion d'hydrogène augmente, la température maximale de combustion augmente aussi et la combustion devient plus rapide.

Ceci peut être expliqué par le fait que l'hydrogène est plus énergétique que le méthane (composant majoritaire du GNC). En effet son PCI est supérieur à celui du méthane. Aussi les délais d'inflammations sont plus courts pour l'hydrogène. De plus l'hydrogène ne contient pas de carbone (C), donc la chaîne réactive de sa combustion est plus courte. Dans cette étude, nous nous sommes limités au suivi des évolutions des espèces CH₄, H₂, O₂, CO₂, H₂O, NO, OH et CO.

Les figures 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12 et 13 représentent les évolutions des fractions molaires des espèces majoritaires des différents mélanges GNC+H₂, obtenus avec le mécanisme détaillé de Grimech, pour un mélange pauvre ($\phi = 0.4$).

Les figures 6-13, montrent bien que l'addition d'hydrogène a permis la réduction totale des émissions du NO et du CO₂, avec une augmentation de la production de H₂O et du CO. En effet la quantité d'O₂ qui participait à la production de CO et CO₂, en combustion du méthane pur, est maintenant consommée par l'hydrogène ajouté, pour produire de l'eau.

Il faut souligner enfin qu'un résultat très important obtenu est que l'ajout de 40 % de H₂ au GNC (formé de 58 % de CH₄ et de 2% CO₂) conduit à une dépollution presque totale des émissions de CO₂ et de NO.

4. CONCLUSION

Dans ce travail, une étude de l'influence de l'ajout d'hydrogène au GNC sur les performances et les émissions polluantes d'un moteur suralimenté, en mode de combustion HCCI a été présentée à l'aide d'un modèle Multi-Zone (40 zones) en utilisant le code Chemkin-Pro [1]

Les résultats issus de cette étude peuvent être résumés dans les points suivants:

- Le processus d'auto-inflammation débute du cœur de la chambre de combustion (zone 40 la plus chaude) (zone 1 la plus froide).
- L'augmentation du taux d'H₂ dans les limites considérées (de 0 % à 40 %), entraîne un accroissement de la pression et de la température des gaz à l'intérieur du cylindre du moteur, et de la vitesse de combustion, du fait de la grande quantité de chaleur libérée par l'H₂ qui possède un PCI élevé (presque 3 fois que celui du GNC utilisé).
- La suralimentation provoque une élévation de la pression et de la température ce qui est favorable à l'augmentation de la puissance du moteur.

- La valeur optimale du taux d' H_2 est de 40 % , ce qui assure une baisse des émissions des NO et du CO_2 dans les gaz d'échappement de 100 % et de 94 % respectivement.

NOMENCLATURE

PCI,	Pouvoir calorifique inférieur du carburant, MJ/kg
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition
GNC	Gaz Naturel comprimé
NO	Monoxyde d'azote
CO_2	Dioxyde de carbone
H_2	Hydrogène
RFA	Angle retard fermeture soupape admission

REFERENCES

- [1] Chemkin-pro 15131, 'Reaction Design', San Diego, CA, 2013.
- [2] A.Y. Nobakht, R.K. Saray and A. Rahimi, 'A Parametric Study on Natural Gas Fueled HCCI Combustion Engine Using a Multi-Zone Combustion Model', Fuel, Vol. 90, N°4, pp. 1508 - 1514, 2011.
- [3] M. Kosar, B. Ozdalyan and M.B. Celik, 'The Usage of Hydrogen for Improving Emissions and Fuel Consumption in a Small Gasoline Engine', Journal of Thermal Science and Technology, Vol. 31, N°2, pp. 101 - 108, 2011.
- [4] L.M. Das, R. Gulati and P.K. Gupta, 'A Comparative Evaluation of the Performance Characteristics of a Spark Ignition Engine Using Hydrogen and Compressed Natural Gas as Alternative Fuels', International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 25, N°8, pp. 783 - 793, 2000.
- [5] M. Yao, Z. Zheng and H. Liu, 'Progress and Recent Trends in Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engines', Progress Energy and Combustion Science, Vol. 5, N°35, pp. 398 - 497, 2009.
- [6] D.L. Handford and M.D. Checkel, 'Extending the Load Range of a Natural Gas HCCI Engine using Direct Injected Pilot Charge and External EGR', SAE technical, paper 2009-01-1884, 2009.