



HAL
open science

Contribution à la modélisation 0D de la combustion Diesel: Application au Biodiesel

Claude Valery Ngayihi Abbe

► **To cite this version:**

Claude Valery Ngayihi Abbe. Contribution à la modélisation 0D de la combustion Diesel: Application au Biodiesel . Génie mécanique [physics.class-ph]. UNIVERSITE DE YAOUNDE I, 2016. Français. NNT: . tel-01402308

HAL Id: tel-01402308

<https://theses.hal.science/tel-01402308>

Submitted on 24 Nov 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITE DE YAOUNDE I

CENTRE DE RECHERCHE ET FORMATION
DOCTORALE EN « SCIENCES,
TECHNOLOGIES ET GEOSCIENCES »



UNIVERSITY OF YAOUNDE I

POSTGRADUATE SCHOOL OF
« SCIENCES, TECHNOLOGY AND
GEOSCIENCES »

UNITE DE RECHERCHE ET DE FORMATION
DOCTORALE EN « SCIENCES DE
L'INGENIEUR ET APPLICATIONS »

RESEARCH AND POSTGRADUATE TRAINING
UNIT « ENGINEERING SCIENCES AND
APPLICATIONS »

LABORATOIRE ENGINEERING CIVIL ET MECANIQUE

**« Contribution à la modélisation 0D de la combustion Diesel
: Application au Biodiesel »**

Thèse présentée et soutenue le 01 juillet 2016 en vue de l'obtention du **DOCTORAT/ PhD** en
Sciences de l'Ingénieur et Applications

Spécialité : Mécanique et Matériaux

Par

NGAYIHI ABBE Claude Valery

Matricule : 12P361

Sous la Codirection de :

Robert Ekeri NZENGWA

Maître de Conférences

Raidandi DANWE

Maître de Conférences

JURY

Timoléon KOFANE	Professeur	Faculté des Sciences, Université de Yaoundé I	Président
Robert NZENGWA	Maître de Conférences	Faculté de Génie Industriel, Université de Douala	Rapporteur
Raidandi DANWE	Maître de Conférences	Ecole Nationale Supérieure Polytechnique, Université de Yaoundé I	rapporteur
Benoît BENGUELLAH LOURA	Professeur	Institut Supérieur du Sahel, Université de Maroua	Membre
Jean-Marie Bienvenu NDJAKA	Professeur	Faculté des Sciences, Université de Yaoundé I	Membre
Lucien MEVA'A	Maître de Conférences	Ecole Nationale Supérieure Polytechnique, Université de Yaoundé I	Membre

Année académique 2015-2016

A MA TENDRE EPOUSE
CAROLE

REMERCIEMENTS

Cette thèse a été effectuée au sein du Laboratoire de Civil Engineering et Mécanique de l'Ecole Nationale Supérieure Polytechnique de l'Université de Yaoundé.

Je tiens tout d'abord à remercier M. Robert NZENGWA, Maître de conférences, qui est le principal instigateur de ce travail, pour la confiance qu'il m'a accordée, pour sa disponibilité et pour tout le support technique dont il m'a fait bénéficier. J'aimerais aussi remercier M. Raidandi DANWE, Maître de conférences, pour avoir codirigé ce travail et prodigué de si nombreux conseils forts utiles tout au long de ces années. Je remercie également très sincèrement M. Andrei Poliakov, professeur, de l'Université Nationale Technique de Vinnitsa en Ukraine, pour tout le temps qu'il m'a accordé lors de mes premiers voyages de recherche, pour nos nombreuses discussions techniques, et pour sa patience souvent mise à rude épreuve au cours du début de ce travail. Je ne saurais oublier le professeur, Andrei KULESHOV de l'Université d'Etat Technique de Moscou « Baumanskaya » pour avoir mis à ma disposition des données expérimentales cruciales ayant permis à l'aboutissement de ce travail. Ma profonde gratitude va également au personnel du Centre de Formation aux Techniques Armées (CFTA) à Ekounou Yaoundé pour avoir mis à ma disposition leur matériel expérimental, particulièrement à l'Adjudant MBOA pour sa disponibilité et surtout son savoir-faire technique en termes d'essais moteurs.

Je souhaite également remercier tous mes collègues de la Faculté de Génie Industriel de l'Université de Douala, notamment Jean-Chills, Cyrille, Moïse, Severin, Charitos, Dieudonné. Je ne saurais oublier les membres du Groupement de Combustion du Cameroun, en particulier Zacharie AYISSI, sans lequel les données sur le Biodiesel à base de Neem ne seraient pas disponibles. Merci également à l'Ingénieur Brist ASSOURA pour son assistance lors de ces travaux. Ma gratitude va également aux Dr. OBONOU Marcel et Dr. MOUANGUE Ruben, dont les multiples discussions dans le domaine de la combustion m'ont permis d'avancer dans ma recherche.

De manière générale, je tiens à remercier toutes les personnes qui m'ont aidé, accueilli et conseillé durant ces années. Merci à Clovis, NDJE Lopez, Franck MBELLA à toutes ces personnes qui m'ont permis d'avancer dans ma démarche.

Enfin, merci de tout mon cœur à mes parents, Jean Baptiste et Séraphine NGAYIHI, à mes frères, Abbé, Serge, Didier et John, à ma sœur Marietta, à mon épouse adorée Carole, mon fils Luc – Nathan, ma fille Sarah et à mes amis pour leur patience, leur amour et leur indéfectible soutien tout au long de ces années.

TABLE DE MATIERES

DEDICACE.....	i
REMERCIEMENTS	iv
TABLE DE MATIERES.....	v
LISTE DES FIGURES.....	xi
NOMENCLATURE.....	xvi
RESUME.....	xx
ABSTRACT	xxi
DEFINITION DE LA PROBLEMATIQUE ET INTRODUCTION.....	2
PARTIE I : SYNTHESE BIBLIOGRAPHIQUE ET ASPECTS	
THEORIQUES.....	8
CHAPITRE 1 : GENERALITES SUR LA COMBUSTION DANS LES MOTEURS	
A COMPRESSION.....	9
I.1 INTRODUCTION	10
I.2 GENERALITE SUR LES MOTEURS A COMPRESSION.....	10
I.2.1 HISTORIQUE ET ARCHITECTURE DES MOTEURS À COMPRESSION....	10
I.2.2 CYCLE THERMODYNAMIQUE ET CRITÈRES DE PERFORMANCES	14
I.2.2.1 CYCLE THERMODYNAMIQUE	14
I.2.2.2. CRITERES DE PERFORMANCE D'UN MOTEUR A COMPRESSION .	18
I.2.3 NORMES ET STANDARDS APPLICABLES AUX MOTEURS À	
COMPRESSION.....	20
I.2.4 PERSPECTIVE DE DÉVELOPPEMENT DES MOTEURS À COMPRESSIONS	
.....	22
I.3. LES CARBURANTS POUR LES DIESELS : DESCRIPTION ET LEGISLATION	
.....	24
I.3.1 PRINCIPALES CARACTÉRISTIQUES DES CARBURANTS POUR LES	
DIESELS ET LEUR EFFET SUR LES PERFORMANCES DU MOTEUR	24
I.3.2 LES CARBURANTS ALTERNATIFS.....	29

I.4. LES MODELES MATHEMATiques PREDICTIFS APPLIQUES MOTEURS A COMPRESSION.....	31
I.4.1 LES MODÈLES MULTIDIMENSIONNELS	32
I.4.2 LES MODÈLES ZÉRO-DIMENSIONNELS THERMODYNAMIQUES.....	34
I.4.2.1. LES MODELES DE DEGAGEMENT DE CHALEUR.....	34
I.4.2.2. LES MODELES 0D DE TRANSFERT THERMIQUE	36
I.4.3 LES MODÈLES PHENOMENOLOGIQUES	37
I.4.3.1 INJECTION ET PULVERISATION	38
I.4.3.1.A. PENETRATION DU JET LIQUIDE (L_B) ET PENETRATION DU MELANGE VAPEUR-LIQUIDE (S)	39
I.4.3.1.B. ANGLE OU DEMI-ANGLE DE JET	42
I.4.3.1.C. FINESSE D_{32} (SMD - DIAMETRE MOYEN DES GOUTTELETTES PULVERISEES).....	44
I.4.3.2. MODELES D'EVAPORATION	45
I.4.3.3. DELAI D'AUTO INFLAMMATION	47
I.4.3.4. SOUS-MODELE 0D THERMODYNAMIQUE	50
I.4.3.5. SOUS-MODELE D'EMISSION.....	50
I.4.4.1. NO THERMIQUE.....	51
I.4.4.2. NO PRECOCE	52
I.4.4.3. NO DU COMBUSTIBLE	53
I.4.5. DERNIERS DEVELOPPEMENT SUR LES MODELES 0D ET LEUR APPLICATION A LA SIMULATION DE LA COMBUSTION DES BIODIESEL	53
CONCLUSION.....	55
CHAPITRE 2 : MODELISATION 0D THERMODYNAMIQUE DE LA COMBUSTION DIESEL.....	56
II.1 INTRODUCTION.....	57
II.2. MODELES DE DEGAGEMENT DE CHALEUR.....	57

II.2.1. APPROCHE DE COMBUSTION DE WIEBE ET ADAPTATION A LA DYNAMIQUE DE COMBUSTION DIESEL.....	58
II.2.1.1. DOUBLE FONCTIONS DE WIEBE.....	58
II.2.1.1.A. APPROCHE DE POUGATCHEV.....	58
II.2.1.1.B. APPROCHE DE GHOJEL.....	59
II.2.1.1.C. APPROCHE DE MIYAMOTO.....	59
II.2.1.1.D. APPROCHE DE WATSON.....	60
II.2.1.2. MULTIPLES FONCTIONS DE WIEBE.....	60
II.2.1.3. CHOIX DE L'APPROCHE DU MODELE DE DEGAGEMENT DE CHALEUR ET JUSTIFICATION.....	61
II.3. DESCRIPTION DU MODELE ET EQUATIONS GOUVERNANTES.....	61
II.3.1. SOUS MODELE DE DELAI D'INFLAMMATION.....	62
II.3.2. ÉTAPES DE CALCUL.....	62
II.3.2.1. TEMPS D'ADMISSION.....	63
II.3.2.3 TEMPS DE COMBUSTION.....	65
II.3.2.3.1 MODELE DE DEGAGEMENT DE CHALEUR.....	65
II.3.2.3.2. MODELE DE COMBUSTION.....	65
II.3.2.4. TEMPS DE DETENTE.....	72
II.5. RESULTATS ET DISCUSSIONS.....	74
II.5.1. VALIDATION DU MODELE.....	74
II.5.2. DISPOSITIF EXPERIMENTAL.....	75
II.5.3. COMPARAISON DES RESULTATS EXPERIMENTAUX ET SIMULES....	77
II.5.4. SIMULATION DES PERFORMANCES D'UN MOTEUR DIESEL ALIMENTE AU BIODIESEL.....	81
CONCLUSION.....	85
PARTIE II : MODELISATION 0D PHENOMENOLOGIQUE DE LA COMBUSTION DIESEL : APPLICATION AU BIODIESEL.....	87

CHAPITRE 3 :	ETUDE COMPARATIVE ET CHOIX D'UN MODELE DE COMBUSTION 0D THERMODYNAMIQUE A BASE DE CHIME TABULEE	88
III.1.	Introduction.....	89
III.2.	MODELES COMMUNS AUX DEUX SIMULATIONS	89
III.2.1.	MODELE DE DELAI D'AUTO INFLAMMATION MODIFIE.....	89
III.2.2.	CHOIX D'UN MODELE DE TRANSFER THERMIQUE	90
III.3.	COMPARAISON DES MODELES DE COMBUSTION	90
III.3.1.	METHODE 1 – MODELE DE COMBUSTION DE KRIEGER ET BORMANN [47, 110](BORMAN AND KRIEGER 1966; BUTTSWORTH 2002)[47, 110].....	91
III.3.2.	METHODE 2 – MODELE DE COMBUSTION DE FERGUSON ET OLIKARA AND BORMANN [111, 112]	94
III.3.2.1.	CALCUL DES PROPRIETES DE L'AIR ET DES PRODUITS DE COMBUSTION	95
III.3.2.2.	CALCUL DES PROPRIETES DU CARBURANT.....	96
III.3.2.3.	CALCUL DES PRODUITS DE COMBUSTION A L'EQUILIBRE.....	96
III.3.2.4.	CALCUL DES PARAMETRES THERMODYNAMIQUES DU MELANGE REACTIF A L'EQUILIBRE	101
III.3.2.5.	EQUATIONS DIFFERENTIELLES DECRIVANT L'EVOLUTION DES PARAMETRES THERMODYNAMIQUES PAR RAPPORT A L'ANGLE BALAYE PAR LE VILEBREQUIN	102
III.4.	RESULTATS ET DISCUSSION	104
III.4.1.	PRECISION DES CALCULS	104
III.4.2.	VITESSE DE CALCUL.....	109
CONCLUSION	109
CHAPITRE 4 :	MODELE 0D PHENOMENOLOGIQUE : VALIDATION ET APPLICATION AU NEEM METHYL ESTER.....	111
IV.1.	INTRODUCTION	112
IV.2.	MATERIELS ET METHODES	112

IV.2.1. EQUATIONS GOUVERNANTES DU MODELE.....	112
IV.2.1.1. MODELE DE PULVERISATION ET DE VAPORISATION DU CARBURANT.....	112
IV.2.1.1.1. SOUS MODELE DE PULVERISATION.....	113
IV.2.1.1.2. SOUS MODELE D'EVAPORATION.....	114
IV.2.1.2. MODELE D'EMISSION DES OXIDES NITRIQUES (NOX).....	117
IV.2.2. ALGORITHME D'IMPLEMENTATION DU MODELE ET COUPLAGE DES SOUS MODELES	119
IV.3. DISPOSITIF ET EQUIPEMENTS EXPERIMENTAUX.....	121
IV.3.1. DESCRIPTION ET INSTRUMENTATION.....	122
IV.3.1.1. DISPOSITIF EXPERIMENTAL	122
IV.3.1.2. PROCEDURE EXPERIMENTALE ET TRAITEMENT DES DONNES	127
IV.3.2. ESSAIS NUMERIQUES A PARTIR DU LOGICIEL DIESEL RK.....	128
IV.3.3 – CARACTERISTIQUES DES CARBURANTS UTILISES.....	130
IV.3.3.1. DESCRIPTION DE LA METHODOLOGIE DE CARACTERISATION DU BIODIESEL DE NEEM	131
IV.3.3.1.1. OBTENTION DU BIODIESEL	131
IV.3.3.1.1. CARACTERISATION DU BIODIESEL A BASE DE METHYLE ESTER DE NEEM.....	133
IV.4. VALIDATION DU MODELE	134
IV.4.1. MODELES THERMODYNAMIQUES DES CARBURANTS.....	134
IV.4.2. VALIDATION EXPERIMENTALE.....	134
IV.4.3. TEMPS DE CALCUL	135
IV.5. SIMULATION DE LA COMBUSTION DU BIODIESEL A BASE D'ESTER DE METHYL DE NEEM DANS UN MOTEUR DIESEL.....	146
IV.5.1. RESULTATS DE LA SIMULATION	146
IV.5.2. EVALUATION DES CARBURANTS DE SUBSTITUTION	147

IV.6. ETUDE DE SENSIBILITE DU MODELE POUR 4 DIFFERENTS SUBSTITUTS	152
CONCLUSION	167
CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES	170
REFERENCES	176
ANNEXES	1

LISTE DES FIGURES









Figure 1-1 - Moteur Diesel à injection directe et 3 cylindres Volkswagen[14].....	11
Figure 1-2 - Temps moteurs à compression.....	13
Figure 1-3 - Diagramme indicatif $P - V$ d'un moteur Diesel.....	15
Figure 1-4 - Diagramme indicatif $p - \varphi$ d'un moteur Diesel; PMH – Point Mort Haut, PMB – point Mort Bas, RFE – Retard Fermeture Échappement, RFA – Retard Fermeture Admission, ID – Délai d'auto Inflammation, AOE – Avance Ouverture Échappement, AOA – Avance Ouverture Admission, AI – Avance à l'Injection.....	16
Figure 1-5 - Réaction chimique du processus de transestérification.....	29
Figure 1-6 - Simulation comparative de l'écoulement du carburant Diesel et du Biodiesel dans un injecteur à l'aide du code Fluent 6.3 [44].....	33
Figure 1-7 - Simulation d'un jet de n-heptane dans une chambre remplie de nitrogène sur OpenFoam[45].....	33
Figure 1-8 - Évolution de la fraction de carburant brûlé et de sa dérivée pour m allant de 0,1 à 0,3 et une durée de combustion de 40 degrés[51].....	35
Figure 1-9 - Diagramme de calcul pour les modèles 0D phénoménologiques.....	38
Figure 1-10 - Caractéristiques du jet Diesel.....	39
Figure 2-1 - Discrétisation du diagramme $p-v$	69
Figure 2-2 - Algorithme du modèle 0D thermodynamique; CN - Indice de cétane; CC - Composition chimique; P - Puissance; FC - La consommation de carburant; PCI - calorifique inférieur[102].....	74
Figure 2-3 - Courbes expérimentale  et simulée  de la variation de pression dans le cylindre pour le premier essai.....	78
Figure 2-4 - Courbes expérimentale  et simulée  de la variation de pression dans le cylindre pour le second essai à 2000 tr/min.....	80
Figure 2-5 - Pression cylindre simulée pour le carburant Diesel  et le Biodiesel  à vitesse nominale.....	83
Figure 2-6 - Température cylindre simulée pour le carburant Diesel  et pour le Biodiesel  à vitesse nominale.....	85
Figure 3-1 – Schéma du modèle de combustion à une zone de Krieger et Bormann.....	91
Figure 3-2 – Schématisation du modèle à deux zones de Ferguson et Olikara.....	95

Figure 3-3 - Superposition des courbes de pression cylindre expérimentales et simulées grace à la méthode de Krieger et Borman pour le carburant Biodiesel	107
Figure 3-4 - Superposition des courbes de pression cylindre expérimentales et simulées grace à la méthode de Ferguson et Olikara pour le carburant Biodiesel	108
Figure 3-5 - Superposition des courbes de pression cylindre expérimentales et simulées grace à la méthode de Krieger et Borman pour le carburant Diesel	108
Figure 3-6 - Superposition des courbes de pression cylindre expérimentales et simulées grâce à la méthode de Ferguson et Olikara pour le carburant Diesel	109
Figure 4-1 - Algorithme d'implémentation du modèle 0D phénoménologique.....	121
Figure 4-2 - Structure et équipements du banc d'essai de recherche.....	123
Figure 4-3 - Vue du moteur expérimental	124
Figure 4-4 - Vue du banc d'injection expérimental	126
Figure 4-5 - testeur Diesel Souriau	126
Figure 4-6 - Pistolet stroboscopique.....	127
Figure 4-7 - Interface du logiciel Diesel - Rk	129
Figure 4-8 - Interface « visualisation » du logiciel Diesel-Rk	130
Figure 4-9 - graines de Neem	131
Figure 4-10 - Processus de fabrication du Biodiesel à base d'huile de Neem[121].....	133
Figure 4-11 - courbes simulées et expérimentales (calibrées Diesel-Rk) de pénétration de jet liquide, pression dans le cylindre, température dans le cylindre et émission de NOx à 2800 tr/min	140
Figure 4-12 - courbes simulées et expérimentales (calibrées Diesel-Rk) de pénétration de jet liquide, pression dans le cylindre, température dans le cylindre et émission de NOx à 2000 tr/min	141
Figure 4-13 - courbes simulées et expérimentales (calibrées Diesel-Rk) de pénétration de jet liquide, pression dans le cylindre, température dans le cylindre et émission de NOx à 1800 tr/min	142
Figure 4-14 - courbes simulées et expérimentales (calibrées Diesel-Rk) de pénétration de jet liquide, pression dans le cylindre, température dans le cylindre et émission de NOx à 1400 tr/min	143
Figure 4-15 - courbes simulées et expérimentales (calibrées Diesel-Rk) de pénétration de jet liquide, pression dans le cylindre, température dans le cylindre et émission de NOx à 1000 tr/min	144

Figure 4-16 - Visualisation du spray à 1000 et 2800 tr/min.....	145
Figure 4-17 - Comparaison de la variation de l'enthalpie par rapport à la température pour le butanoate et butyrate de méthyle.....	148
Figure 4-18 - Comparaison de la variation de l'entropie par rapport à la température pour le butanoate et butyrate de méthyle.....	149
Figure 4-19 - Comparaison de la variation de la chaleur massique par rapport à la température pour le butanoate et butyrate de méthyle.....	149
Figure 4-20 Courbes de pressions expérimentales et simulées pour le biodiesel d'ester de méthyle à 1700 tr/min pour chaque substitut	160
Figure 4-21 Courbes de pressions expérimentales et simulées pour le biodiesel d'ester d'éthyle à 1700 tr/min pour chaque substitut	165

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1-1 - Normes d'émissions pour les véhicules non routiers [29]..... 21

Tableau 1-2 - Normes d'émissions pour les poids lourds et véhicules de transport en commun[29] 22

Tableau 1-3 – principales spécifications européennes du carburant diesel (NF EN 590)..... 28

Tableau 1-4 - Propriétés standards des carburants Biodiesel (EN 14 214)..... 31

Tableau 1-5 - synoptique des corrélations pour la pénétration du jet liquide (L_b) et (ou) pénétration du mélange vapeur-liquide (S) 40

Tableau 1-6 - synoptique des corrélations pour l'angle de jet θ 43

Tableau 1-7 - synoptique des corrélations définissant le diamètre moyen des gouttelettes pulvérisées 45

Tableau 1-8 - synoptique des corrélations de délais d'inflammation..... 48

Tableau 2-1 - Valeurs recommandées de ξ , l'efficacité de combustion dépendamment du type de chambre de combustion 68

Tableau 2-2 - Spécification du moteur pour la première expérimentation..... 76

Tableau 2-3 - Spécification du moteur pour la deuxième expérimentation 76

Tableau 2-4 - Spécifications du carburant Diesel utilisé pour la validation du modèle..... 77

Tableau 2-5 - Comparaison des résultats pour la première expérimentation 78

Tableau 2-6 – Comparaison des résultats simulés à partir de la seconde expérimentation 81

Tableau 2-7 - Spécification du carburant Biodiesel 82

Tableau 2-8 - Comparaison des performances moteurs simulées et expérimentales 84

Tableau 3-1 - Coefficients du modèle de Krieger et Borman..... 94

Tableau 3-2 - Coefficients d'équilibre chimique du modèle de Olikara et Borman..... 98

Tableau 3-3 - Spécification du moteur d'essai 105

Tableau 3-4 - Comparaison des performances de combustion des moteurs simulées à l'aide des modèles de Krieger et Borman et de Ferguson et Olikara avec les données expérimentales 107

Tableau 4-1 - Constante d'équilibre pour les réactions du mécanisme de Zeldovich..... 118

Tableau 4-2 - Paramètre du modèle expérimental utilisé pour la validation du modèle 0D phénoménologique 125

Tableau 4-3 – Matrice d'expérience..... 128

Tableau 4-4 – Comparaison des propriétés du gazole à celles de l'ester de méthyl de Neem132

Tableau 4-5 - Evaluation des performances du modèle 0D phénoménologique par rapport au pas de temps de calcul	136
Tableau 4-6 - Comparaison des valeurs simulées et expérimentales des diamètres moyens et de pénétration de jet de liquide pulvérisé à partir du modèle 0D phénoménologique.....	137
Tableau 4-7 - Comparaison des valeurs simulées et expérimentales de pics de pression et de température à partir du modèle 0D phénoménologique	138
Tableau 4-8 - Comparaison des valeurs simulées et expérimentales d'émissions de NOx et de puissance à partir du modèle 0D phénoménologique.....	139
Tableau 4-9 - tables thermodynamiques CHEMKIN pour le butanoate et le butyrate de méthyle	148
Tableau 4-10 - Performances calculées du Biodiesel à base de Neem à 2800 tr/min à partir du modèle 0D phénoménologique.....	150
Tableau 4-11 - Performances calculées du Biodiesel à base de Neem à 2000 tr/min à partir du modèle 0D phénoménologique.....	151
Tableau 4-12 - Performances calculées du Biodiesel à base de Neem à 1000 tr/min à partir du modèle 0D phénoménologique.....	152
Tableau 4-13 Caractéristiques du moteur [135].....	153
Tableau 4-14 - Caractéristiques des biodiesels [135].....	154
Tableau 4-15 Valeur de l'avance à l'injection[135].....	155
Tableau 4-16 Résultats comparatifs entre les valeurs expérimentales et simulées pour chaque substitut pour biodiesel d'ester de méthyle à 1100 tr/min.....	157
Tableau 4-17 Résultats comparatifs entre les valeurs expérimentales et simulées pour chaque substitut pour biodiesel d'ester de méthyle à 1400 tr/min.....	158
Tableau 4-18 Résultats comparatifs entre les valeurs expérimentales et simulées pour chaque substitut pour le biodiesel d'ester de méthyle à 1700 tr/min.....	159
Tableau 4-19 Résultats comparatifs entre les valeurs expérimentales et simulées pour chaque substitut pour le biodiesel d'ester d'éthyle à 1100 tr/min	162
Tableau 4-20 Résultats comparatifs entre les valeurs expérimentales et simulées pour chaque substitut pour le biodiesel d'ester d'éthyle à 1400 tr/min	163
Tableau 4-21 Résultats comparatifs entre les valeurs expérimentales et simulées pour chaque substitut pour le biodiesel d'ester d'éthyle à 1700 tr/min	164

NOMENCLATURE

Abréviations françaises

PMB – Point Mort Bas

PMH – point Mort Haut

RFE – Retard Fermeture Echappement

RFA – Retard Fermeture Admission

AOE – Avance Ouverture Echappement

DI – Délai d’auto-Inflammation

AOA – Avance Ouverture Admission

AI – Avance à l’Injection

NF – Norme Française

PCI –Pouvoir Calorifique Inférieur

CFTA – Centre de Formation aux Techniques Armées

HYDRAC – Hydrocarbures Analyse Contrôle

Acronymes anglo-saxons

CFD – Computational Fluid Dynamics

EGR – Exhaust Gas Recirculation

ASTM - American Society for Testing and Materials

HCCI – Homogeneous Charge Compression Ignition

SMD – Sauter Mean Diameter

PCCI – Premixed Charge Compression Ignition

JANAF – Joint Army, Navy and Air Force

CN – Cetane Number

BSFC – Break Specific Fuel Consumption

NO_x – Nitric Oxid

0D – ZeroDimensionnal

1D – OneDimensionnal

ISO – International Standard Organisation

CHEMKIN - Chemical kinetics

IP – Institute of Petroleum

Chimie

C – Radical carbone

H – Radical Hydrogène

O – Radical oxygène

N₂ - Azote

H₂O - Eau

CO₂ – Dioxyde de carbone

NO_x – Oxydes nitriques

NO₂ – dioxyde d’azote

NO – Oxyde d’azote

CO – Monoxyde de carbone

OH - Hydroxyde

HCN – Cyanure d’hydrogène

C₁₆H₃₄ – Cétane

C₁₁H₁₀ – Méthylnaphtalène

C_aH_bO_cN_d – Hydrocarbure quelconque

Paramètres géométriques

D – diamètre de l’alésage (mm)

ε – Rapport de compression

V_d – Volume déplacé (m³)

V_r – Volume mort (m³)

λ – rapport manivelle du vilebrequin / bielle

Mécanique

φ – Angle instantané balayé par vilebrequin (°V)

θ – Angle de jet de combustible (°)

m – masse (kg)

P – Puissance (kW)

RPM – vitesse de rotation du vilebrequin (tr/min)

Thermodynamique et Combustion

η – Rendement

n – Exposant polytropique

γ – Rapport de chaleurs spécifiques

c_p – Chaleur spécifique à pression constante (J/kg·K)

c_v – Chaleur spécifique à volume constant (J/kg·K)

ϕ – Richesse

α – Excès d'air

ρ – Masse volumique (kg/m³)

μ – Viscosité (Pa·s)

σ – Coefficient de tension surfacique (N·m⁻¹)

u – Energie interne (J)

\bar{h} – Enthalpie molaire (J/mol)

h – Enthalpie (J)

\bar{s} – Entropie molaire (J·mol⁻¹·K⁻¹)

S – Entropie (J/K)

E_a – Energie d'activation (J/mol)

R – Constante universelle des gaz (J·mol⁻¹·K⁻¹)

p – Pression (MPa)

T – Température (K)

h_c – Coefficient de transfert thermique par convection	$(W \cdot K^{-1} \cdot m^{-2})$
d_{32} – Diamètre moyen de Sauter	(mm)
Nu – Nombre de Nusselt	
We – Nombre de Webber	
q_c – Débit massique	$(kg/cycle)$
V – Volume	(m^3)
v – Volume spécifique	(m^3/kg)
Q – Chaleur	(J)
L – Travail	(J)
l – Travail spécifique	(J/kg)

RESUME

La conception et le suivi des moteurs diesel modernes fonctionnant à l'aide de carburants alternatifs exigent des modèles fiables qui peuvent valablement remplacer les essais expérimentaux et prédire leurs caractéristiques de fonctionnement pour différentes conditions de charge. Bien qu'il existe une multitude de modèles appliqués à la combustion diesel, les modèles 0D phénoménologiques présentent les avantages de donner des résultats précis avec des temps d'exécution relativement courts. Ces modèles sont utiles pour la prévision des caractéristiques de pulvérisation du combustible et de l'état instantané des produits de combustion. Cependant, on note une certaine rareté dans la littérature scientifique, d'applications de ce type de modèle pour la combustion des Biodiesels dans les moteurs diesel. Ce travail porte sur l'élaboration, la validation et l'application à la combustion d'un Biodiesel local, d'un modèle 0D phénoménologique de simulation de la combustion diesel.

Ce travail traite de certains aspects spécifiques à la modélisation de la combustion diesel tels que traités dans la littérature, à savoir : le compromis entre temps d'exécution, la précision et la simplicité des modèles; la réduction du nombre de constantes empiriques ; la prédiction de la cinétique de combustion sans données expérimentales préalables au calibrage du modèle ; la capacité à simuler pour différents points de fonctionnement les paramètres thermodynamiques des produits de combustion, de pulvérisation du carburant et d'émissions polluantes ; la capacité à simuler les paramètres du moteur diesel lors d'un fonctionnement au Biodiesel pour différents régimes de fonctionnement. Le modèle est implémenté en utilisant une approche à chimie tabulée sous code Matlab. Le modèle proposé prédit la pulvérisation du combustible, la combustion dans le cylindre et les émissions d'oxydes d'azote(NOx). Le modèle est principalement basé sur le modèle d'évaporation et pulvérisation de Razlejtsev, le modèle de dégagement de chaleur à double fonction de Wiebe de Watson et le modèle de combustion à chimie tabulée d'Olikara et Ferguson. Les émissions de NOx sont calculées à partir du mécanisme étendu de Zeldovich, les transferts thermiques et le délai d'auto inflammation sont également pris en compte dans le modèle. Le modèle est validé expérimentalement et les résultats présentent une bonne adéquation tant pour la modélisation de la combustion diesel conventionnelle que celle du Biodiesel. Le temps d'exécution du modèle est d'environ 25 secondes pour un cycle complet. Il a également été montré que notre modèle est stable pour un pas de temps variable et que les données thermochimiques des carburants de substituts usuels peuvent également être utilisées de manière effective pour le modèle.

Mots clés: Diesel; modèle 0D; Biodiesel; Combustion; NOx; Spray

ABSTRACT

The design and monitoring of modern diesel engines running on alternative fuels require reliable models that can validly substitute experimental tests and predict their operating characteristics under different load conditions. Although there exists a multitude of models for diesel engines, 0D phenomenological models present the advantages of giving fast and accurate computed results. These models are useful for predicting fuel spray characteristics and instantaneous gas state. However, there are few reported studies on the application of 0D phenomenological models on Biodiesel fuel combustion in diesel engines. This work reports the elaboration, validation and application on local Biodiesel combustion of a 0D phenomenological model for diesel engine simulation.

The model addresses some specific aspects of diesel engine modeling found in previous studies such as the compromise between computers cost, accurateness and model simplicity, the reduction of the number of empirical fitting constant, the prediction of combustion kinetics with reduction of the need of experimental curve fitting, the ability to simultaneously predict under various loads engine thermodynamic and spray parameters as well as emission characteristics and finally the ability to simulate diesel engine parameters when fueled by alternative fuels. The model is implemented using a tabulated chemistry approach through a Matlab code. The proposed model predicts fuel spray behavior, in cylinder combustion and nitric oxides (NO_x) emissions. The model is mainly based on Razlejtsev's spray evaporation model, Watson's double Wiebe function and Ferguson's tabulated chemistry thermodynamic cycle algorithm. NO_x emissions are implemented in the model using the extended Zeldovich mechanism, heat transfer and ignition delay are also taken into account in the model. The model is validated experimentally and the results show a good match both for the modeling of the conventional diesel combustion and Biodiesel. The running time of the model is about 25 seconds for a full cycle. It was also shown that our model is stable for variable time steps and thermochemical data for usual surrogates fuels can also be used effectively for the model.

Keywords: Diesel; 0D model; Biodiesel; Combustion; Nitric oxides; Spray

DEFINITION DE LA PROBLEMATIQUE ET INTRODUCTION

Un des éléments clés pour toute activité économique est la disponibilité en ressources énergétiques suffisantes. La demande en énergie dans les pays en développement est une préoccupation sans cesse croissante pour les politiques gouvernementales. La fluctuation des prix et la rareté continues en carburant à base d'hydrocarbures fossiles rendent l'utilisation des équipements motorisés coûteux pour les utilisateurs ordinaires et les petites et moyennes entreprises. Par conséquent, il de plus en plus nécessaire d'étudier la possibilité d'utiliser des carburants alternatifs de substitution, spécifiquement les carburants Biodiesel comme substituts au gazole, de par leur durabilité et leur faible taux de pollution. De nombreux travaux [1-6] ont montré que le Biodiesel peut être utilisé dans n'importe quel moteur à injection directe sans modifications majeures à apporter au moteur; cependant, quelques variations en termes d'efficacité, de performance globale et de durabilité des moteurs alimentés par du Biodiesel ont été remarquées. Dans des études récentes, il a été démontré que l'utilisation du Biodiesel dans les moteurs diesel réduit la toxicité des gaz d'échappement[3, 4, 7] et augmente également le rendement thermique du moteur [5]. Les principales propriétés affectant les performances du moteur, lorsqu'il est alimenté par un carburant Biodiesel sont celles liées à sa capacité d'écoulement et d'évaporation et ainsi que ses propriétés de combustion. De récents travaux ont montré que lors de l'injection du Biodiesel on observe généralement une pénétration du jet liquide beaucoup plus prononcée ainsi qu'un affinement des gouttelettes pulvérisées [8, 9]. Le Biodiesel possède également un délai d'auto inflammation plus court que celui du carburant diesel conventionnel, ceci associé à sa forte teneur tendent à entraîner une augmentation des émissions d'oxydes d'azote (NOx) ainsi que de l'efficacité combustion [5] lors de son utilisation.

Afin d'étudier le comportement des moteurs diesel travaillant sous divers carburants de substitution, des simulations expérimentales ou numériques doivent être effectuées; ces dernières présentent l'avantage de réduire le temps et les coûts liés à la fabrication de prototypes et des équipements expérimentaux.

La simulation numérique du fonctionnement du moteur diesel est basée sur l'application de modèles mathématiques décrivant les différents processus physiques qui se produisent tout au long du cycle moteur. L'élaboration d'un modèle mathématique permettant la simulation des processus de combustion dans les moteurs diesel donne la possibilité d'exécuter des scénarios et procédures d'optimisation multiples permettant de prédire le comportement du moteur dans des conditions diverses, réduisant ainsi les dépenses liées aux recherches expérimentales.

Les modèles mathématiques permettant la simulation des processus de combustion dans les moteurs diesel ont été largement étudiés par les chercheurs du monde entier ; ils sont généralement subdivisés en trois grands groupes[10, 11]:

- Modèles 0D dimensionnel (modèles thermodynamiques et phénoménologiques);
- Modèles quasi - dimensionnels ou 1D;
- Modèles multidimensionnels (Computational Fluid Dynamics).

Les modèles thermodynamiques zéro dimensionnels sont basés sur les lois de la thermodynamique et des relations semi-empiriques décrivant la vitesse de combustion du carburant injecté. Ces modèles sont également connus sous le nom de modèles systèmes ou de connaissance [12]. Ce type de modèles trouve son attractivité de par leur relative simplicité de mise en œuvre et la vitesse qu'ils offrent en termes de temps de calcul et leur précision.

Dans les modèles 0D phénoménologiques, les dimensions et détails de divers phénomènes qui se produisent lors de la combustion diesel sont ajoutés à l'équation de base de la conservation de l'énergie appliquée dans les modèles 0D thermodynamiques. Ce type de modèle permet de considérer uniquement l'évolution des variables thermodynamiques dans le temps.

Les modèles de combustion 0D phénoménologiques sont commodes pour décrire la combustion diesel ainsi que pour la réalisation d'études paramétriques de moteurs. Ceci parce que le processus d'injection, qui peut relativement être bien simulé par une approche phénoménologique, a un effet dominant sur la formation du mélange de réactif et le processus de combustion qui lui est ultérieur.

Ces modèles 0D phénoménologiques sont généralement subdivisés en sous-modèles couplés les uns aux autres, chacun des modèles décrivant des phénomènes qui se produisent durant chaque cycle. Les principaux sous-modèles sont généralement les suivants: Injection et pulvérisation, évaporation, délai d'auto inflammation, sous-modèle thermodynamique, sous-modèle d'émission.

Les modèles multidimensionnels (CFD, Computational Fluid Dynamics) et 1D décrivent mieux les phénomènes internes impliqués dans la combustion des moteurs diesel. Dans les modèles 1D, la chambre de combustion ainsi que le jet pulvérisé sont divisés en plusieurs (centaines) zones, le champ d'écoulement réactif est résolu dans le temps pour chaque zone de la chambre de combustion (équations différentielles ordinaires), tandis que dans les modèles multidimensionnels, le domaine est résolu dans le temps et en volume (équations aux dérivées partielles). Le temps d'exécution et les contraintes de mémoire limitent sérieusement

l'utilisation de ces types modèles. Les modèles CFD sont principalement basés sur la résolution des équations de Navier-Stokes; l'ensemble du processus est généralement divisé en un certain nombre de parties à résoudre : la phase dynamique du jet de gaz en phase liquide et la cinétique chimique en phase gazeuse. Ainsi, les modèles CFD et 1D sont généralement plus utilisés pour la mise au point, la conception et l'étude des paramètres très précis de la combustion diesel. Tandis que les modèles 0D sont plus utilisés pour le contrôle, le diagnostic et le paramétrage des moteurs diesels, notamment pour l'établissement de cartographie moteur.

Nous nous proposons ici de mettre sur pied un modèle mathématique 0D pour le diagnostic et le contrôle des moteurs diesel fonctionnant au gasoil conventionnel et au biodiesel.

Le présent travail porte sur des problèmes spécifiques mis en évidence sur la modélisation 0D de la combustion Diesel telle que décrite dans les travaux récents, à savoir:

- Un compromis doit être trouvé entre l'utilisation de grande table thermochimique et un nombre élevé de zones pouvant permettre l'atteinte d'une grande précision, mais avec un coût en temps d'exécution et de mémoire élevé, et utilisation de tables thermochimiques réduites et un faible nombre de zones pouvant entraîner une précision moindre pour un temps d'exécution réduit;
- La réduction du nombre de constantes expérimentales de réglage pour le modèle sous diverses charges;
- La prédiction précise de la cinétique de combustion permettant de s'affranchir des lissages expérimentaux souvent nécessaires à la prévision des variations de pression;
- La capacité de prédire pour différentes charges et conditions environnementales les paramètres moteurs de performance et d'émission sans aucun réglage ou ajustement de calibrage par rapport à la charge;
- la capacité de simuler le fonctionnement des moteurs diesel alimentés au Biodiesel.

Le modèle proposé dans cette étude prendra en compte l'influence du jet de carburant sur les caractéristiques de la cinétique de combustion ; il permettra aussi de faire un lien entre ce dernier et la détermination des performances et émissions polluantes du moteur. Enfin, le modèle adoptera une approche à chimie tabulée permettant ainsi la simulation de la combustion de carburants alternatifs tels que le Biodiesel. Il est important de souligner que l'objectif dans l'utilisation de modèles 0D est d'avoir un outil prédictif permettant aussi la prospection de plages non explorées expérimentalement

Plan de la thèse

Le présent document se compose de 2 parties subdivisées chacune en 2 chapitres : la première partie concerne une étude bibliographique et théorique portant respectivement sur le fonctionnement des moteurs diesel et leurs différentes approches de modélisation et sur l'étude d'un modèle 0D thermodynamique. La seconde partie aborde la modélisation 0D phénoménologique proprement dite élaborée dans ce travail. La première partie de ce travail est organisée de la manière suivante :

Le chapitre 1 rappelle les différents aspects théoriques et constructifs des moteurs diesel, on y parle notamment du cycle diesel et des différents critères de performance y associés. Ce chapitre parle également des différentes normes associées aux carburants diesel ainsi qu'aux Biodiesel. On y aborde également les différentes approches de modélisation applicables à la simulation de la combustion diesel.

Le chapitre 2 porte sur une étude théorique de l'implémentation d'un modèle 0D purement thermodynamique et une analyse de ses performances en vue de la modélisation complète des cycles diesel et une application aux Biodiesels. Le modèle ici conçu y est validé et analysé en vue de son amélioration subséquente vers une approche 0D phénoménologique.

La deuxième partie de cette thèse s'articule comme suit :

Le chapitre 3 présente une étude comparative de deux modèles 0D thermodynamiques basés sur la chimie tabulée en vue de leur implantation dans le modèle 0D phénoménologique constituant le nœud de notre travail. Ceci en vue de pallier aux manquements décelés dans l'approche décrite au chapitre 2. Ainsi les modèles de Krieger et Borman et d'Olikara et Ferguson seront comparés en termes de vitesse d'exécution et de précision de calcul ainsi que leur applicabilité à la combustion diesel sous carburant Biodiesel.

Le chapitre 4 est entièrement consacré à la modélisation 0D phénoménologique de la combustion diesel appliquée au Biodiesel. On y présentera comment le modèle prend en compte les phénomènes d'injection et de pulvérisation du carburant ainsi que le couplage qui est effectué entre ce dernier et les sous-modèles thermodynamiques et d'émissions d'oxydes d'azote. Une description du matériel expérimental et de la procédure de validation sont également présentées ainsi qu'une étude de sensibilité du modèle dans ce chapitre.

PARTIE I :
SYNTHESE BIBLIOGRAPHIQUE
ET ASPECTS THEORIQUES

CHAPITRE 1 : GENERALITES SUR LA COMBUSTION DANS LES MOTEURS A COMPRESSION

I.1 INTRODUCTION

Dans ce chapitre, nous effectuons une revue exhaustive de l'état des connaissances relatives aux moteurs Diesel et leur modélisation. Nous commençons par une description de l'architecture globale des moteurs Diesel en présentant les différents organes élémentaires le constituant ainsi que leurs différentes fonctions. Par la suite, nous évoquons les cycles thermodynamiques et critères de performances caractérisant le fonctionnement des moteurs Diesel. La conception et le fonctionnement des moteurs Diesel étant soumis à des normes, nous présentons à la section suivante les normes applicables à ces derniers, notamment les normes anti pollutions. Il est également question de présenter les normes applicables aux carburants Diesel, et les derniers développements concernant les Biodiesel. La dernière partie de ce chapitre présente les différents modèles mathématiques appliqués à la simulation des moteurs Diesel. Nous présentons tout d'abord un bref descriptif des modèles multidimensionnels en spécifiant leur applicabilité et leur performance. Dans la suite, nous décrivons successivement les modèles 0D thermodynamiques, 0D phénoménologiques pour lesquels une grande attention est faite, car ceux-ci constituent l'ossature de cette thèse ; nous présentons donc les sous modèles d'injection, de combustion et d'émission applicables à ces modèles. En fin de ce chapitre, une brève étude critique est posée sur l'évolution des modèles 0D phénoménologiques et leur application à la combustion des Biodiesels.

I.2 GENERALITE SUR LES MOTEURS A COMPRESSION

I.2.1 HISTORIQUE ET ARCHITECTURE DES MOTEURS À COMPRESSION

Les moteurs à compression encore appelés moteurs Diesel, sont des moteurs à combustion internes dont l'élaboration est attribuée à Rudolf Diesel [13] au cours de la fin du 19e siècle ce qui lui valut en 1900 la médaille d'or de l'exposition universelle de Paris. Initialement fonctionnant par injection de charbon pulvérisé, ils fonctionnent aujourd'hui par injection de carburant à base de pétrole brut. Dans les moteurs à compression, au contraire des moteurs à allumage commandés, la combustion s'effectue par auto inflammation du carburant injecté dans le cylindre et non par le biais d'une étincelle. Au début de leur exploitation, les moteurs à compression servaient à l'alimentation en énergie des bateaux, leur utilisation a été étendue aux camions au cours des années 1930. C'est à partir de la fin de la Deuxième Guerre

mondiale que l'utilisation des moteurs à compression dans les véhicules légers s'est généralisée. Aujourd'hui, les moteurs à compression se retrouvent dans plusieurs domaines industriels autres que le transport, notamment la génération de l'énergie électrique, la centrale à fioul lourd de Logbaba en est un exemple au Cameroun dans la ville de Douala. Comme principales caractéristiques des moteurs à compression, on peut citer :

- Un rapport de compression élevé ($\varepsilon = 14...22$);
- Injection de carburant lourd dans le cylindre du moteur à la fin de la compression;
- Auto-inflammation du carburant due à la température élevée de l'air comprimé dans le cylindre;
- Une combustion incomplète, se caractérisant principalement par des émissions des suies dans les gaz d'échappement et de faible quantité de monoxyde de carbone;
- Leur consommation en carburant est moindre que celle des moteurs à allumage commandé ceci étant dû à un meilleur rendement thermique et un rapport de compression plus élevé.
- La durée de vie d'un moteur Diesel est généralement d'environ deux fois plus longue que celle d'un moteur à essence en raison d'une plus grande résistance des pièces le constituant.
- Le carburant Diesel possède de meilleures propriétés de lubrification que l'essence.

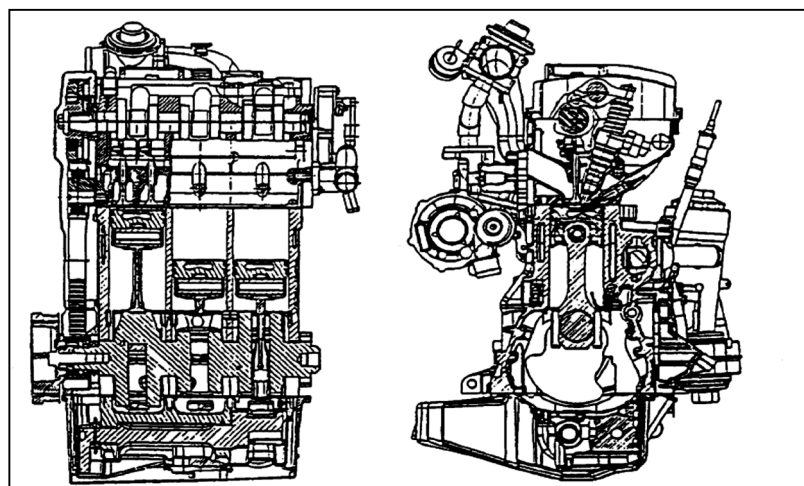


Figure 1-1 - Moteur Diesel à injection directe et 3 cylindres Volkswagen[14]

Les moteurs à compression sont pour la plupart à quatre temps, ceux à deux temps existent également, plus performants, mais beaucoup plus polluants, ce qui a pratiquement sonné le glas de ce type de moteur pour l'alimentation des véhicules de tourisme.

Les moteurs à compression sont constitués de 8 principaux éléments :

- **Le carter** : il joue le rôle de contenant de tous les éléments constitutifs du moteur et assure son étanchéité. Généralement moulé, il est dimensionné de manière à pouvoir supporter les pressions et températures élevées ayant cours dans les cylindres.
- **Les cylindres** : le plus souvent disposés en ligne ou en V, ils peuvent être moulés directement dans le carter ou bien insérés dans des alésages prévus à cet effet. L'importance des cylindres dans le fonctionnement des moteurs à compression est capitale ; en effet c'est à l'intérieur des cylindres que se passe l'essentiel des processus thermodynamiques qui ont cours lors du fonctionnement des moteurs à compression.
- **Culasse** : la culasse correspond à la partie supérieure interne du cylindre. La culasse comprend plusieurs orifices d'entrée correspondant aux tubulures d'admission et d'échappement au système d'injection. La culasse comprend également certains éléments du système de distribution.
- **Piston** : élément cylindrique à mouvement alternatif dans le cylindre et servant à convertir les variations de pression des gaz en travail mécanique.
- **La distribution** : le Mécanisme de distribution est constitué de (ou des) arbre à cames, les soupapes d'admission et d'échappement, ainsi que les éléments assurant leur montage et synchronisation: transmission à chaîne ou à courroie, tiges, culbuteurs, vis de réglage et d'écrous, ressorts, barres, et l'arbre de culbuteur.
- **Mécanisme bielle-manivelle** : ce mécanisme est conçu pour convertir le mouvement alternatif du piston en un mouvement rotatif du vilebrequin, transmettant ainsi le travail issu des gaz à l'arbre moteur.
- **Le mécanisme d'injection** : c'est l'un des éléments les plus importants du moteur Diesel il constitue le système d'alimentation en carburant, il assure la disponibilité de quantité de carburant nécessaire au bon moment à une pression prédéterminée dans la chambre de combustion.
- **Mécanisme de refroidissement et lubrification** : les éléments mécaniques des moteurs Diesel sont soumis à des contraintes thermiques très élevées, ceci du fait des grandes vitesses relatives entre eux, mais aussi des fortes températures produites lors du processus de combustion. Le circuit de refroidissement peut être soit interne à l'aide

d'eau contenant des additifs anticorrosion, soit externe à l'aide de l'air ambiant par le biais d'ailettes de refroidissement situé sur la culasse et le bloc moteur.

Les quatre temps qui caractérisent le fonctionnement d'un moteur à compression peuvent être décrits de la manière suivante.

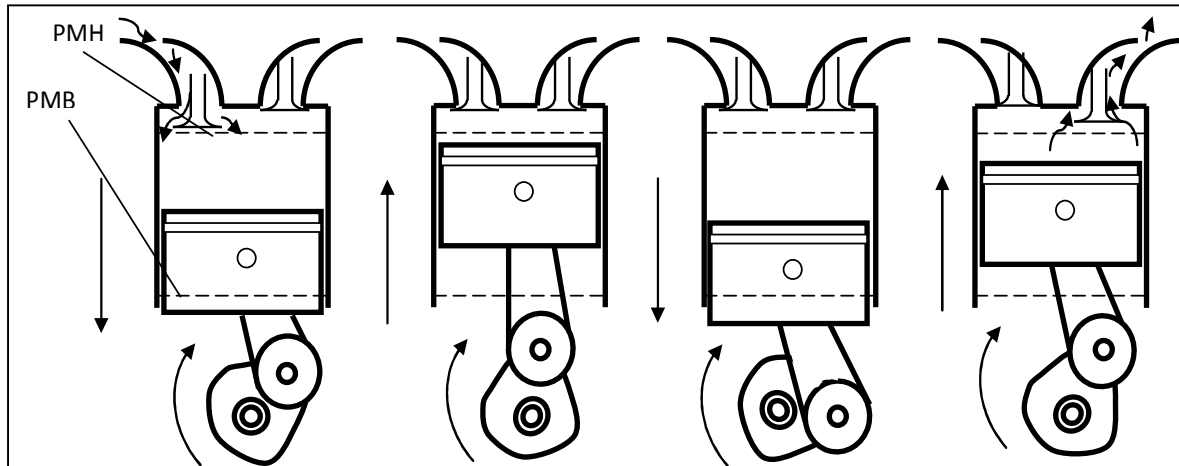


Figure 1-2 - Temps moteurs à compression

Admission : l'admission correspond au temps au cours duquel l'air (encore appelé charge fraîche) frais est introduit dans le cylindre. Ce temps correspond à l'un des temps dits « ouverts » [15], c'est-à-dire pour lesquels au moins une des soupapes est ouverte ou bien pour lesquels il y'a échanges avec le milieu extérieur. Au début de l'admission, le piston se trouve au Point Mort Haut, l'ouverture de la soupape d'admission crée une dépression qui entraîne l'entrée d'air ambiant à l'intérieur du cylindre et pousse le piston vers le Point Mort Bas. La fin du temps d'admission est effective quand le piston atteint le PMB et à la fermeture de la soupape d'admission. Le paramètre le plus important au cours de ce temps est la quantité de charges d'air aspiré, en effet de cette quantité dépend la quantité de carburant qui peut être brûlé et également la puissance dégagée du moteur.

Compression : le temps de compression, débutant à la fin du temps d'admission, consiste au déplacement du piston du PMB au PMH, les soupapes d'admissions et d'échappement étant fermées. Ce temps correspond à l'un des temps dits « fermés ». Bien que le piston atteigne le PMH au cours de ce temps, un espace est néanmoins préservé entre la tête du piston et la culasse, cet espace est appelé *volume mort*. Ce paramètre permet de définir le taux compression qui est le rapport entre le volume total du cylindre et le volume mort. Le

rendement des moteurs à compression dépend directement du taux de compression, cette corrélation sera explicitée plus loin dans les sections à venir.

Détente : le temps de détente correspond également à un temps « fermé », les soupapes d'admission et d'échappement étant closes. Ce temps peut être subdivisé en trois étapes :

- Injection: l'injection de carburant est généralement effectuée avec un certain angle d'avance par rapport au PMH, avant que la pression maximale soit atteinte ceci souvent pour réguler les émissions d'oxydes nitriques ou encore appelés NOx [10].
- Le délai d'inflammation correspond au temps entre le début d'injection et le début de la combustion. Ce même délai peut être subdivisé en délai physique et chimique[16], ce que nous verrons plus loin.
- Combustion et détente: les réactions en chaîne se produisant dans la chambre de combustion provoquent une combustion spontanée à pression constante des réactifs ce qui entraîne une forte montée en pression et température (en moyenne jusqu'à 12 bars et 2000 Kelvins). Le piston poussé vers le bas par la forte pression fait tourner le vilebrequin.

Échappement : Ce temps correspond à l'étape finale du cycle de combustion dans un moteur à compression. Le temps d'échappement est un temps « ouvert », la soupape d'échappement étant ouverte et celle d'admission fermée. Le piston, par effet d'inertie grâce au volant moteur remonte vers le PMH et poussant les gaz brûlés vers le milieu extérieur.

I.2.2 CYCLE THERMODYNAMIQUE ET CRITÈRES DE PERFORMANCES

I.2.2.1 CYCLE THERMODYNAMIQUE

Dans cette section, nous décrivons les principales étapes du cycle de combustion dans un moteur à compression ainsi que les facteurs le caractérisant. Nous décrivons ensuite paramètres indicatifs et effectifs définissant les performances d'un moteur à compression ainsi que les méthodes permettant leur évaluation.

Comme il a été présenté plus haut, le cycle complet d'un moteur à compression comprend quatre temps – admission, compression, détente et échappement – ; il est décrit

expérimentalement à l'aide de diagrammes communément qualifiés d'*indicatifs*. Le principal diagramme permettant d'évaluer le processus de combustion dans le cylindre est le **diagramme indicatif** permettant d'observer l'évolution de la pression, la température et le dégagement de chaleur par rapport à l'angle de rotation du vilebrequin. Ce diagramme s'obtient généralement à l'aide de capteurs de pression piézoélectriques, de thermocouples et de chaînes d'acquisition des données [17-19]. La figure 3 montre l'allure typique de l'évolution d'un diagramme indicatif dans un cylindre de moteur à compression pour un système pression – volume, tandis que la figure 4 est pour un système pression – angle balayé par le vilebrequin.

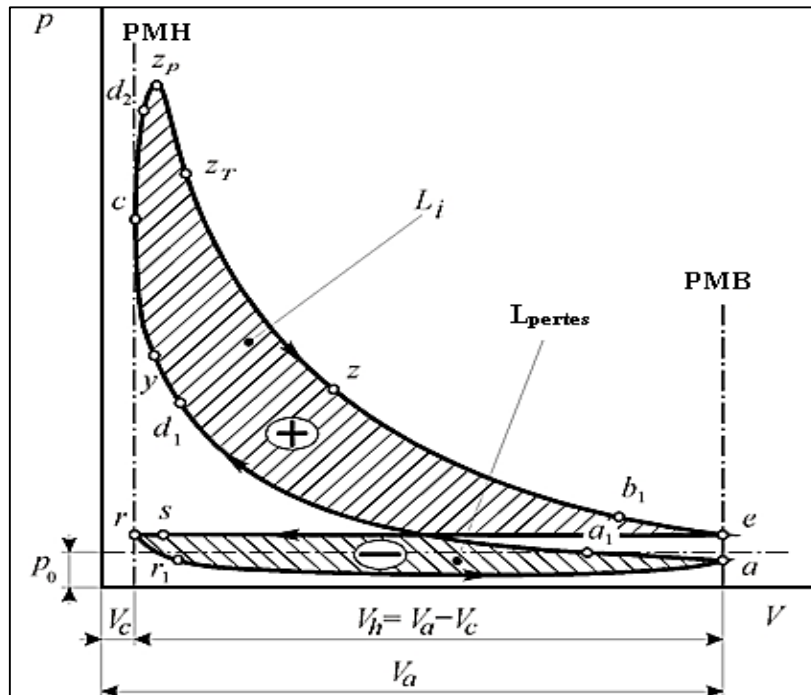


Figure 1-3 - Diagramme indicatif P – V d'un moteur Diesel

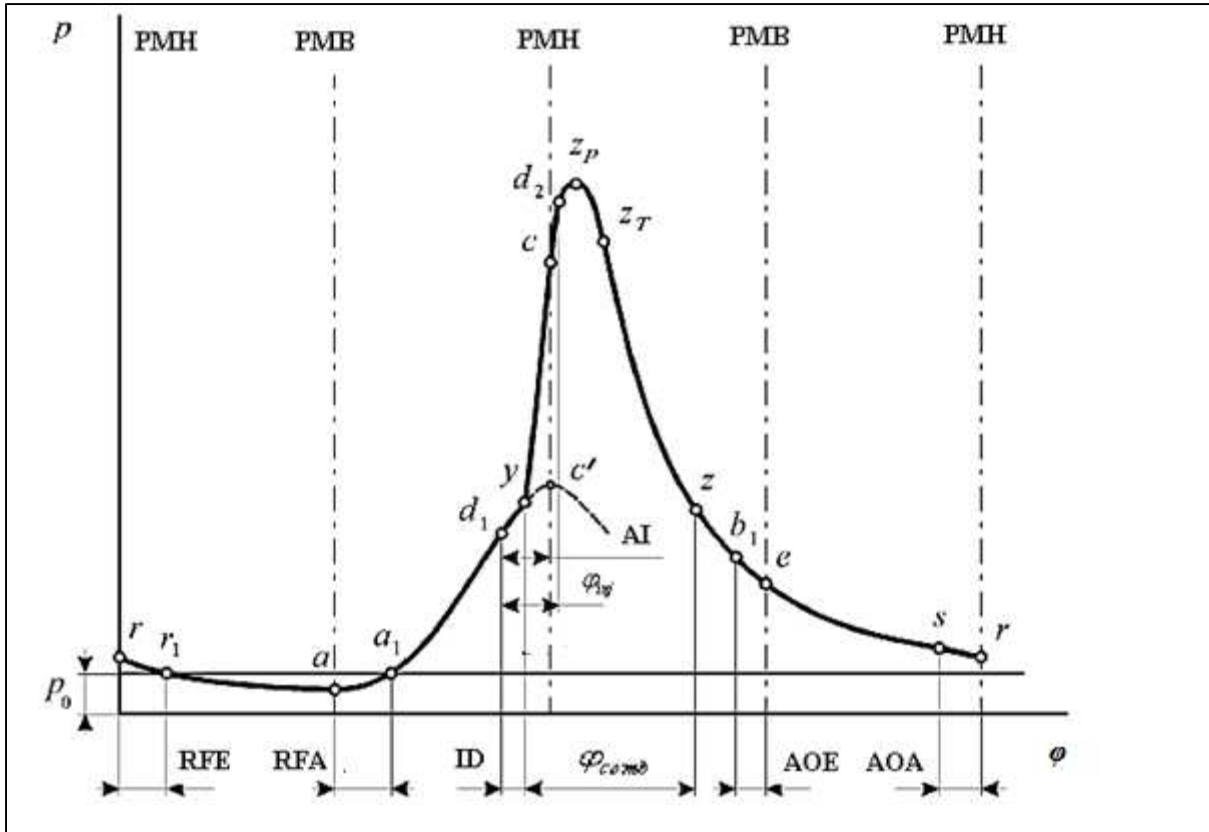


Figure 1-4 - Diagramme indicatif $p - \varphi$ d'un moteur Diesel; PMH – Point Mort Haut, PMB – point Mort Bas, RFE – Retard Fermeture Échappement, RFA – Retard Fermeture Admission, ID – Délai d'auto Inflammation, AOE – Avance Ouverture Échappement, AOA – Avance Ouverture Admission, AI – Avance à l'Injection.

Le diagramme indicatif montre que l'on peut diviser le temps de combustion et d'expansion en quatre phases :

Première phase – période allant du point d_1 au point y sur le diagramme $P-\varphi$ – période de formation des zones de la combustion, ou période de délai d'inflammation (Coordonnée ID sur le diagramme $P - \varphi$). Cette période correspond à la durée allant du début de l'injection du combustible au début de sa combustion. Au cours de cette période la température du combustible injecté sous forte pression moyenne (3,5 – 4,5 MPa) dans de l'air chauffé (600–700 °C), augmente et atteint les températures correspondantes à l'ignition spontanée (200–300 °C). Plusieurs études ont montré que le combustible a une influence sur cette phase de la manière suivante [20-22]:

- ✓ Sa température d'inflammation : la phase de délai d'inflammation sera d'autant plus longue que la température d'inflammation du combustible sera élevée

- ✓ sa viscosité et sa densité : ces propriétés joueront sur la finesse de pulvérisation du combustible, en effet plus les gouttelettes de carburant injecté seront grossières, plus la durée correspondante à leur inflammation sera élevée [20]
- ✓ L'inflammabilité : l'indice de cétane, qui définit en premier lieu la capacité du combustible à l'ignition spontanée ; plus cet indice est élevé, plus l'inflammation spontanée est favorisée. Si le combustible ne brûle pas entièrement au cycle précédent, les produits de combustion imbrulés peuvent se retrouver dans les soupapes d'échappement, et peuvent ainsi se mêler au mélange carburé ; la formation de produits de la cokéfaction au niveau des injecteurs, des pistons et des anneaux peut ainsi être favorisée.

L'avance à l'injection (AI sur le diagramme $P - \varphi$) est également un paramètre déterminant pour la phase de délai d'ignition ; un angle optimal d'injection doit être garanti afin d'assurer des niveaux de performance idoines [23, 24]. En effet, une injection trop précoce du combustible peut entraîner une combustion également prématurée ; ceci entraînera une diminution de productivité du moteur causée par la pression des gaz résiduels élevée dont la direction sera opposée à celle des gaz issus de l'admission. A l'inverse, une injection trop tardive entraînerait une combustion dans un volume d'air très élevé ; ce qui entraînera une diminution de pression des gaz, une augmentation de la chaleur transmise par les parois et conséquemment une diminution du rendement de puissance et économique du moteur.

Deuxième phase – période allant du point y au point d_2 $P - \varphi$ – période de combustion rapide ou encore de combustion dite de pré mélange. La période de la combustion rapide - la quantité du combustible ayant passé la préparation du mélange correspondant au délai d'inflammation, brûle à une grande vitesse ; ce qui donne naissance à une flamme dite de pré mélange. Dans cette phase, plus la pulvérisation du combustible est fine et plus l'intensité de l'injection est grande ; alors plus élevé sera le dégagement de chaleur et la pression (gradient de pression) des gaz dans le cylindre. Cette phase couvre la brève période angulaire qui sépare l'auto-ignition de l'instant où la pression atteint sa valeur maximale.

Troisième phase – période allant du point d_2 au point z – période de combustion dite de diffusion. Cette phase dépend de la qualité de la pulvérisation et de la quantité du combustible injecté après le début de la combustion. Moins élevée sera la quantité de carburant injectée avant le début de cette phase, moins élevée sera la quantité de chaleur dégagée au cours de cette dernière ; ce qui est caractéristique des moteurs Diesel sous faible charge.

Quatrième phase – période de combustion tardive.- après le point z commence la phase de combustion tardive au cours de laquelle la pression se met à diminuer. Une partie du combustible, encore non utilisée, continue à brûler. Une partie du carburant continue d'être brûlée au cours de la détente.

I.2.2.2. CRITERES DE PERFORMANCE D'UN MOTEUR A COMPRESSION

Cette section traite des principaux critères caractérisant les moteurs à compression. Ces différents critères permettent d'évaluer un moteur à compression tant sur un plan purement technologique que sur plan économique et écologique. Il est à noter que ces critères d'évaluation s'appliquent également pour les autres types de moteurs à combustion interne.

Parmi eux, on peut citer :

- La puissance P ;
- La pression moyenne p ;
- Le travail par cycle L ;
- Le rendement η ;
- La consommation spécifique g .

La puissance effective P_e , déterminée en sortie du vilebrequin est toujours inférieure à la puissance indiquée P_i développée par les gaz contenus dans le cylindre, cette infériorité est caractérisée par la puissance des pertes mécaniques P_m . On a donc

$$P_e = P_i - P_m ; \quad (1.1)$$

Les pertes mécaniques dans les cylindres sont causées par divers facteurs qu'on peut citer de manière non exhaustive :

- les frottements dans les groupes cylindre-piston, le mécanisme bielle-manivelle et autres groupes;
- les résistances hydrauliques, qui apparaissent dans le moteur au sein de l'air, des milieux gazeux et liquides;
- l'entraînement des mécanismes auxiliaires : pompe à huile, pompe à essence, ventilateur et tout autre mécanisme auxiliaire;
- la recirculation des gaz de combustion résiduels (EGR);

La valeur des pertes mécaniques est évaluée par des valeurs complexes telles que le rendement mécanique η_m et la pression moyenne de frottement p_m .

Le rendement mécanique est déterminé par les résultats des essais moteurs. Il est numériquement égal au ratio entre les critères effectifs par les critères indicels

$$\eta_m = \frac{N_e}{N_i} = \frac{p_e}{p_i} = \frac{g_e}{g_i} = \frac{\eta_e}{\eta_i} \quad (1.2)$$

Dans le calcul des cycles η_m est évalué par sa valeur statistique moyenne au régime nominal avec prise en compte du type de moteur, fréquence de rotation du vilebrequin, présence de turbo chargeur et autres.

Dans de le cadre de l'exploitation, la valeur de la pression de frottement peut être évaluée par la formule empirique suivante :

$$p_m = A + B \cdot U_p \quad (1.3)$$

où $U_p = \frac{S \cdot RPM}{30}$ - vitesse moyenne du piston. Les valeurs des coefficients empiriques A et B sont données dans [25]. La pression moyenne de frottement p_m est liée au rendement mécanique par la relation :

$$\eta_m = 1 - \frac{p_m}{p_i} \quad (1.4)$$

La pression moyenne effective se calcule par :

$$p_e = p_i - p_m \text{ ou encore } p_e = p_i \eta_m \quad (1.5)$$

Rendement effectif

Le rendement effectif qui inclut toutes les pertes se détermine comme le rapport du travail mécanique L_e sur la quantité de chaleur Q_{comb} , susceptible d'être générée par la combustion complète du carburant introduit dans le cylindre. On peut l'exprimer à l'aide de la relation suivante :

$$\eta_e = \eta_i \eta_m \text{ ou encore } \eta_e = \frac{p_e}{p_i} \quad (1.6)$$

La consommation spécifique qui correspond à la masse de combustible \dot{m}_f consommée par unité de puissance. Sa valeur est d'autant plus petite que le rendement du moteur sera élevé.

$$g = \frac{\dot{m}_f}{P} \quad (1.7)$$

La consommation spécifique effective peut également être évaluée en g/kWh à l'aide de la formule suivante

$$g_e = \frac{3600}{H_l \cdot \eta_e} \quad (1.8)$$

où H_l est le pouvoir calorifique inférieur du combustible utilisé.

I.2.3 NORMES ET STANDARDS APPLICABLES AUX MOTEURS À COMPRESSION

Les moteurs à compression étant alimentés originellement aux carburants fossiles, ils ont donc une capacité de pollution assez importante. Au-delà de cette capacité de pollution, les moteurs Diesel peuvent également être source de nuisance sonore. Ces deux effets sont, entre autres, parmi ceux ayant poussé les différentes législations mondiales, industries et constructeurs à travers le monde à élaborer des normes permettant l'utilisation de ces moteurs avec prise en compte des contraintes humaines, économiques et environnementales.

Ces restrictions normatives ont pris forme en Europe, aux États-Unis et au Japon sous forme de normes EURO, ASTM qui sont principalement des normes antipollution [10, 26-28].

Les normes représentées au tableau ci-dessous s'appliquent aux véhicules aux moteurs de véhicules non routiers [29] (tableau 1.1) et aux moteurs de véhicules poids lourds et de transport en commun (tableau 1.2).

La réglementation, portant sur les véhicules non routiers a été mise en place en la date du 27 février 1998 (Directive 97/68/CE). Elle est constituée de deux étapes (1999, 2001 et 2004). Cette réglementation s'applique au type de véhicules suivants : puits de forage industriels, compresseurs, engins de chantier, machines de construction des routes, chariots élévateurs, chasse-neiges, grues mobiles, équipements d'assistance aéroportuaire au sol.

En ce qui concerne les moteurs de poids lourds et d'engins de transport en commun, la réglementation européenne a mis sur pied plusieurs étapes pour la limitation de la pollution émise par ces engins. La première est connue sous le nom d'Euro I a été mise en application depuis 1992, suivie d'Euro II en 1996. En 1999, la directive 1999/96/CE modifiant la directive 88/77/CE fixe les réglementations Euro III, IV et V, ces deux dernières sont entrées en vigueur respectivement en 2005 et 2008.

Tableau 1-1 - Normes d'émissions pour les véhicules non routiers [29]

TABLEAU A

Puissance (kW)	Date d'application	CO (g/kWh)	Hydrocarbure (g/kWh)	NO _x (g/kWh)	Particules (g/kWh)
Étape I					
130 - 560	01.1999	5,0	1,3	9,2	0,54
75 - 130	01.1999	5,0	1,3	9,2	0,70
37 - 75	04.1999	6,5	1,3	9,2	0,85
Étape II					
130 - 560	01.2002	3,5	1,0	6,0	0,2
75 - 130	01.2003	5,0	1,0	6,0	0,3
37 - 75	01.2004	5,0	1,3	7,0	0,4
18 - 37	01.2001	5,5	1,5	8,0	0,8

TABLEAU B

Puissance (kW)	Date d'application	CO (g/kWh)	NO _x + Hydrocarbure (g/kWh)	Hydrocarbure (g/kWh)	NO _x (g/kWh)	Particules (g/kWh)
Étape III A						
130 - 560	31.12.2005	3,5	4,0			0,2
75 - 130	31.12.2006	5,0	4,0			0,3
37 - 75	31.12.2007	5,0	4,7			0,4
19 - 37	31.12.2006	5,5	7,5			0,6
Étape III B						
130 - 560	31.12.2010	3,5		0,19	2,0	0,02
75 - 130	31.12.2011	5,0		0,19	3,3	0,02
56 - 75	31.12.2011	5,0		0,19	3,3	0,02
37 - 56	31.12.2012	5,0	4,7			0,025
Étape IV						
130 - 560	31.12.2013	3,5		0,19	0,4	0,025
56 - 130	31.09.2014	5,0		0,19	0,4	0,025

Tableau 1-2 - Normes d'émissions pour les poids lourds et véhicules de transport en commun[29]

TABLEAU C

	Date et catégorie	méthode de test	CO (g/kWh)	Hydrocarbure (g/kWh)	NO _x (g/kWh)	Particules (g/kWh)	Opacités des fumées (m ⁻¹)
Euro I	1992, < 85 kW	ECE R-49	4,5	1,1	8,0	0,612	
Euro I	1992, < 85 kW	ECE R-49	4,5	1,1	8,0	0,36	
Euro II	10.1996	ECE R-49	4,0	1,1	7,0	0,25	
Euro II	10.1998	ECE R-49	4,0	1,1	7,0	0,15	
Euro III	10.1999 EEVs*	ESC et ELR	1,5	0,25	2,0	0,02	0,15
Euro III	10.2000	ESC et ELR	2,1	0,66	5,0	0,1	0,8
Euro IV	10.2005	ESC et ELR	1,5	0,46	3,5	0,02	0,5
Euro V	10.2008	ESC et ELR	1,5	0,46	2,0	0,02	0,5

* EEVs : Véhicules à très basse émission destinés à réduire la pollution dans les villes

TABLEAU D

	Date et catégorie	méthode de test	CO (g/kWh)	NMHC ^a (g/kWh)	CH ₄ ^b (g/kWh)	NO _x (g/kWh)	Particules ^c (g/kWh)
Euro III	10.1999 EEVs	ETC	3,0	0,40	0,65	2,0	0,02
	10.2000	ETC	5,45	0,78	1,6	5,0	0,16
Euro IV	10.2005	ETC	4,0	0,55	1,1	2,0	0,03
Euro V	10.2008	ETC	4,0	0,55	1,1	2,0	0,03

a Hydrocarbures autres que le méthane
 b Uniquement pour les moteurs à gaz
 c Non applicable aux moteurs à gaz

1.2.4 PERSPECTIVE DE DÉVELOPPEMENT DES MOTEURS À COMPRESSIONS

De nombreux progrès ont été réalisés au cours des dernières décennies et continuent de l'être afin d'améliorer la conception des moteurs diesels, conduisant à la réduction de leur consommation de carburant, leur poids, leur bruit, leur vibration et leur coût. Ceci a également permis l'amélioration de leur durabilité et de leur fiabilité. Les frottements dans les organes des moteurs ont été réduits grâce à de meilleures conceptions des organes mécaniques ce qui a permis une réduction de consommation des huiles de lubrification. Les pertes de pompage ont été réduites également grâce de meilleures conceptions des turbocompresseurs et une amélioration du rendement volumétrique des moteurs à compression.

La récupération des gaz d'échappement a reçu une attention particulière à partir des années 1980. Le potentiel de la technologie du turbo a été étudié pour essayer de récupérer une partie de la chaleur des gaz d'échappement à la sortie de la turbine du turbocompresseur afin de la conduire vers une autre turbine fournissant une certaine puissance mécanique pouvant ainsi être rajoutée au vilebrequin.

D'autres challenges ont été dégagés concernant l'industrie de fabrication des moteurs à compression, tels ceux ayant trait aux problèmes de tribologie et concernant les émissions excessives de NOx.

L'adoption dans le monde de réglementations sur les émissions polluantes (principalement aux États-Unis, Europe et Japon) a donné une impulsion majeure pour le développement technologique des moteurs à compression modernes, des carburants et huiles lubrifiantes plus propres. Comparativement aux moteurs à essence équipés de catalyseurs, les moteurs à compression sans post-traitement des gaz brûlés sont caractérisés par des émissions d'hydrocarbures imbrûlés réduites, de monoxyde de carbone négligeable (CO), de particules fines plus élevées et d'oxydes d'azote (NOx, principalement NO et NO₂, avec un rapport NO₂/NO de 5 à 25%) à l'échappement. La raison pour laquelle les émissions de CO et hydrocarbures imbrûlés sont inférieures pour le moteur Diesel est qu'il fonctionne en mélange pauvre pour la plupart de ses charges.

Les défis concernant les émissions pour les moteurs à compression sont principalement les NOx et les émissions de suie. Dans la plupart des cas, la réduction d'un paramètre d'émission dans les moteurs à compression entraîne l'aggravation d'un autre, on parle souvent de compromis inhérents aux Diesels [30]. Un exemple typique de ce type de compromis est celui de l'angle d'avance à l'injection, qui s'il est retardé réduit les quantités de NOx émises, mais entraîne une augmentation des émissions de suie et de la consommation spécifique.

Un autre dispositif important qui a été apporté aux moteurs à compression modernes afin d'assurer l'arrimage aux normes d'émissions en vigueur est l'EGR (Exhaust Gas Recirculation) [28, 31]. L'EGR a été utilisé comme une technologie très efficace pour réduire les NOx, notamment aux États-Unis.

L'EGR réduit les NOx par l'intermédiaire d'un mécanisme de réduction de la concentration en oxygène dans le cylindre et de la température de combustion.

En plus de l'EGR, les moteurs Diesel modernes se caractérisent également par plusieurs autres technologies de contrôle des émissions. De nouveaux concepts de combustion innovants (par exemple, la combustion à faible température, HCCI) font l'objet d'études intensives [26,

31]. Les systèmes d'injection modernes travaillant à ultra-haute pression, permettant d'atteindre des pressions d'injection élevées à des régimes moteurs à la fois faibles et élevés (par exemple, le système d'injection à rampe commune haute pression – Common Rail).

En bref, dans l'industrie des moteurs à compression moderne il existe quatre axes principaux de recherche et de développement pour assurer le respect des normes d'émissions et un rendement thermique élevé, tout en réduisant le coût global moteur-véhicule. Il s'agit de:

- Le développement de modèles mathématiques décrivant le phénomène de combustion dans le cylindre;
- Le post traitement des gaz d'échappement ;
- Le développement des systèmes d'hybridation des moteurs ;
- La qualité des carburants et carburants alternatifs.

I.3. LES CARBURANTS POUR LES DIESELS : DESCRIPTION ET LEGISLATION

I.3.1 PRINCIPALES CARACTÉRISTIQUES DES CARBURANTS POUR LES DIESELS ET LEUR EFFET SUR LES PERFORMANCES DU MOTEUR

Les carburants pour les moteurs à compression ont fortement évolués depuis la création de ce type de moteur. Il est à noter qu'initialement le moteur conçu par Rudolph Diesel travaillait au charbon pulvérisé et ensuite à l'huile de palme [13] . Depuis l'avènement de l'utilisation des hydrocarbures dans les véhicules utilitaires, de transport et dans tout autre équipement travaillant à l'aide de moteur à combustion, il a été nécessaire de caractériser les carburants servant à leur fonctionnement par des méthodes standardisées [32]. Cette caractérisation a permis de dégager des propriétés spécifiques aux carburants utilisés pour les moteurs à compression ainsi que leur influence sur le fonctionnement de ces derniers. Nous décrirons ici les propriétés qui selon nous revêtent le plus d'importance pour notre travail de modélisation.

Masse volumique

Par masse volumique d'un fluide on sous-entend une grandeur physique qui caractérise la masse de ce liquide matériau par unité de volume à une température donnée (g/cm^3).

En général, la masse volumique est mesurée à 20°C. La mesure de la masse volumique est réalisée à l'aide d'un densimètre, en le plongeant dans le carburant d'essai, avec prise des mesures à l'échelle du densimètre à une température donnée. Les résultats sont ensuite

recalculés pour la définition de la masse volumique à la température de 20°C. Pour recalculer, il est nécessaire d'utiliser les facteurs de correction pour chaque combustible étudié.

Il est possible de déterminer la masse volumique à l'aide d'un pycnomètre [33]. La méthode est basée sur la détermination de la densité relative - le rapport massique du produit étudié par rapport à la masse de l'eau recueillie dans le même volume et à la même température.

La variation de la masse volumique est fortement liée à la teneur en carbone. Le ratio C/H sera d'autant plus grand que la masse volumique du carburant sera élevée, ce qui est susceptible d'accroître la formation des suies.

Une augmentation de la masse volumique du carburant entraînera une réduction du volume de carburant utilisé au cours du cycle, mais aussi une augmentation de la distance parcourue par le jet de carburant à la phase de combustion, ce qui pourra augmenter la fraction de mélange réactif se trouvant sur la paroi du cylindre favorisant la formation de suie.

Viscosité

La viscosité caractérise les frottements internes d'un liquide, c.-à-d. les frottements survenant entre les molécules du liquide quand ce dernier est déplacé sous l'influence de forces extérieures.

La valeur de la viscosité peut être dynamique ou cinématique et la densité en unités de degrés.

Viscosité dynamique – c'est le rapport entre la contrainte de cisaillement par rapport au gradient de la vitesse du d'écoulement. C'est une mesure de la résistance à l'écoulement du fluide.

La viscosité cinématique est le rapport entre la viscosité dynamique et la masse volumique du liquide à la même température.

L'unité de la viscosité cinématique est mm^2/s ou cSt (centistokes).

La viscosité se mesure généralement à une température de 40°C, souvent on peut la trouver pour une température de 20°C.

Plus la viscosité du carburant est grande plus les pertes dues aux défauts d'étanchéité au niveau du groupe piston/cylindre seront diminuées, ce qui améliore le démarrage du moteur et peut également augmenter la longévité du moteur.

Dans un même temps, cela entraîne une augmentation la taille des gouttelettes du jet de combustible, de sa portée, ce qui serait la cause d'émissions de gaz imbrulés et de fortes quantités de suie. La viscosité est une propriété dépendante de la température et de la pression, ce qui est particulièrement important pour les moteurs modernes à grande vitesse. Une Viscosité

élevée provoque des problèmes lors du démarrage pour le système de carburation, en particulier pendant les saisons froides.

Pouvoir calorifique

Le pouvoir calorifique est la quantité de chaleur dégagée pendant la combustion complète de 1 kg carburant. On fait une distinction entre les pouvoirs calorifiques supérieurs et inférieurs.

Pouvoir calorifique supérieur – quantité de chaleur qui est libérée au cours de la combustion de 1 kg de carburant, y compris la chaleur de vaporisation.

Pouvoir calorifique inférieur – Quantité de chaleur libérée lors de la combustion complète d'un mètre cube de carburant dans des conditions «normales » de température et de pression lorsque l'eau formée pendant la combustion demeure à l'état de vapeur et que les produits de combustion sont évacués dans les conditions d'essais normalisées.

La combustion d'un kilogramme d'hydrogène produit 9 kilogrammes d'eau. Pour la composition du carburant Diesel dont les rapports massiques des éléments carbone, hydrogène et oxygène sont respectivement $C \approx 0,87$; $H \approx 0,126$; $O \approx 0,004$, en brûlant 1 kg de quantité de carburant, la quantité d'eau rejetée sera sensiblement de 1,134 kg.

Le pouvoir calorifique caractérise la consommation en énergie du carburant, ce qui implique qu'un pouvoir calorifique élevé devrait assurer nécessairement une puissance motrice également plus élevée. Mais l'expérience a montré que l'utilisation d'un carburant à plus grand pouvoir calorifique n'est pas toujours gage de performance motrice supérieure, il vaut mieux assurer des conditions optimales du mélange et la combustion des gaz dans le cylindre [10, 28, 34].

Indice de cétane (ASTM 2007, ISO 3104)

L'indice de cétane est une propriété du carburant servant à évaluer son inflammabilité. Cet indice est pris comme le pourcentage (volumique) de cétane $C_{16}H_{34}$ contenu dans son mélange avec de l'alpha-méthyle-naphtalène $C_{11}H_{10}$, équivalente à l'auto inflammabilité du carburant lorsqu'il est testé dans les conditions standards [35].

Ainsi, le cétane et l'alpha-méthyle-naphtalène constituent les étalons de mesure de l'indice de cétane : du cétane à 100% - inflammabilité maximale ; de l'alpha-méthyle-naphtalène à 100 – zéro auto inflammabilité.

Un indice de cétane élevé assure une réduction du délai d'auto-inflammation dans des intervalles nécessaires, ce qui assure un fonctionnement normal du moteur. A l'inverse, un indice de cétane plus réduit conduit à une augmentation du délai d'auto-inflammation. Ainsi, au cours de cette période la quantité majeure de carburant sera injectée avant que la combustion ne prenne place et cette dernière sera caractérisée par la détonation [10]. Le fonctionnement du moteur sera plus rigide, ce qui entrainera une augmentation de l'usure de ses composants, ainsi qu'une augmentation des émissions de NOx. Ce paramètre influe fortement sur le démarrage du moteur. Plus l'indice de cétane est faible, plus le démarrage du moteur est difficile.

Point éclair (ASTM D93, NF T 07 - 019).

Le point éclair est la plus basse température à laquelle un mélange combustible peut être formé au-dessus du combustible liquide. Il est important pour des considérations de sûreté incendie et dépend de la limite d'inflammabilité du carburant en mélange pauvre ainsi que la pression de vapeur partielle des constituants de ses constituants. Le point éclair est déterminé en chauffant un échantillon de carburant dans un récipient remué et en passant une flamme au-dessus de la surface du liquide. Si la température est en dessus du point éclair, la vapeur s'enflammera et il est possible d'observer une bavure facilement discernable.

Point de trouble (ASTM D2500, ISO 3015)

Le point de trouble est la température à laquelle un nuage de cristaux de paraffine apparaît pour la première fois dans un échantillon d'essence qui est refroidi dans des conditions contrôlées. Le point de cristallisation est déterminé en inspectant visuellement un carburant normalement clair pour en détecter la moindre brume.

Le point de congélation (ASTM D97, IP 15)

Le point de congélation est la plus basse température à laquelle le mouvement de l'échantillon de carburant peut être déterminé quand le récipient témoin est incliné. À chaque 3°C de refroidissement, l'échantillon est inspecté, et quand aucun mouvement n'est détecté après 5 secondes, l'essai est arrêté. 3°C sont additionnés à la température où l'on n'a observé aucun mouvement et cette température est prise comme le point de congélation. Les points de congélation sont toujours exprimés en multiples de 3°C.

Le tableau 1-3, présente certaines caractéristiques standards des gasoils ou carburants Diesel, on peut également se référer à l'annexe correspondant à la norme NF EN 590.

Tableau 1-3 – principales spécifications européennes du carburant diesel (NF EN 590)

Caractéristiques	Valeurs limites en climat tempéré et tropical	Tests
Teneur en soufre (% masse) max	0,05	ISO 8754
Température limite de Filtrabilité		
Classe A	+5	EN 116
Classe B	0	
Classe C	-5	
Classe D	-10	
Classe E	-15	
Classe F	20	
Point de trouble		ISO 3015
Masse volumique à 15° C (kg/dm ³) min	0,820 – 0,860	ISO 3675
Viscosité à 40°C (mm ² /s)	2,0 – 4,5	ISO 3104
Indice de cétane mesuré minimal	49	ISO 5165
Indice de cétane calculé minimal	46	ISO 4264
Point éclair (°C) minimal	55	NF T 07 – 019

I.3.2 LES CARBURANTS ALTERNATIFS

LES HUILES VEGETALES

Les composants principaux des graisses et huiles animales et végétales sont des triglycérides. Chimiquement, les triglycérides sont des esters d'acides gras avec du glycérol (glycérine). Les triglycérides des graisses et huiles animales et végétales contiennent typiquement plusieurs types d'acides gras. Les caractéristiques et propriétés des acides constituent les paramètres les plus importants influençant les propriétés correspondantes d'une graisse d'huile animale ou végétale [36].

LE BIODIESEL

Pour obtenir du Biodiesel, la graisse ou huile animale ou végétale est soumise à une réaction chimique nommée transestérification. Au cours de cette réaction, la graisse ou huile animale ou végétale réagit en présence d'un catalyseur (un composé basique en général) avec un alcool (du méthanol en général) pour former des esters méthyloxy correspondants au mélange d'acide gras se trouvant dans la graisse ou huile mise en réaction. La figure suivante décrit la réaction de transestérification.

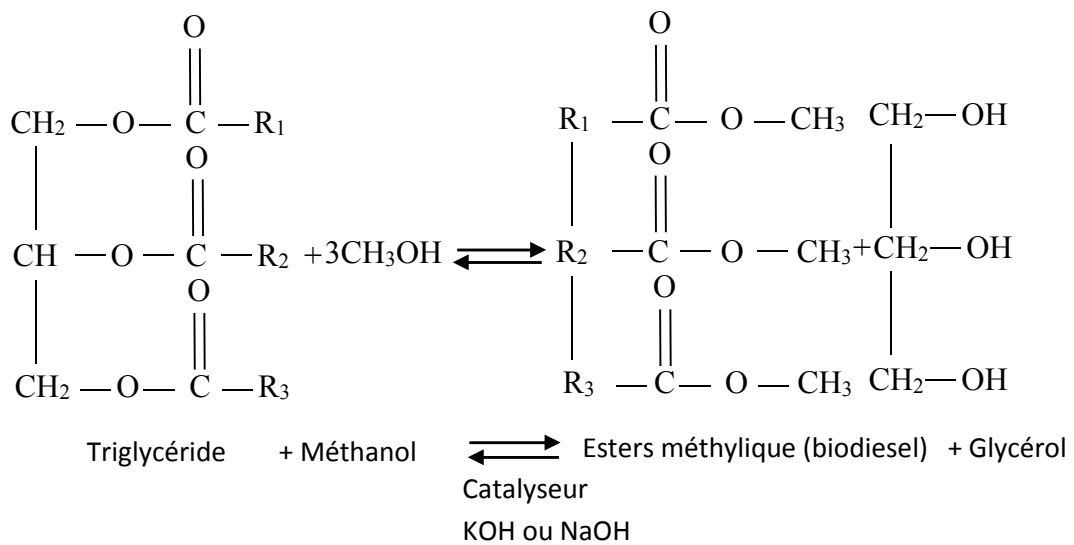


Figure 1-5 - Réaction chimique du processus de transestérification

Le Biodiesel peut être produit à partir d'une grande variété de matières premières. Ces matières premières incluent la plupart des graisses ou huiles végétales courantes (soja, coton, arachide, colza, tournesol, coco, neem etc..) et animales ainsi que les huiles récupération (huiles de friture utilisées). Le Biodiesel est miscible avec le gasoil (gasoil adultéré au Biodiesel) dans

tous les rapports on parle ainsi de B5, B20 ou encore B100 respectivement pour des mélanges de 5, 20 et 100% de Biodiesel.

Le Biodiesel, comme le gasoil est aussi sujet à une législation normalisée. En effet les pays tels que le Brésil, les États-Unis la France et l'Allemagne, ont mis sur pied des normes définissant les caractéristiques auxquels doivent répondre tout Biodiesel commercialisé dans ces territoires [36].

Le Biodiesel comporte plusieurs avantages comparés au gasoil ; entre autres on peut citer:

- Son origine : dérivant d'une ressource renouvelable, il permet de réduire la dépendance au carburant à base d'hydrocarbure d'origine fossile ;
- Sa biodégradabilité ;
- Son faible taux d'émission de substances polluantes au cours de sa combustion excepté pour les oxydes d'azote dont le taux d'émission augmente avec le pourcentage de Biodiesel dans le mélange[37, 38] ;
- Son point éclair plus élevé, menant à des manipulations et stockages plus sûrs ;
- Ses qualités autolubrifiantes ;
- Sa faible teneur en soufre ;

Cependant, il est nécessaire de noter qu'au cours de l'utilisation du Biodiesel comme carburant dans les moteurs à compression usuels et sans modification, certains paramètres de fonctionnement de ces derniers peuvent être affectés :

- La température d'ébullition du Biodiesel étant très haute par rapport au gasoil, il est plus susceptible d'avoir une combustion incomplète dans la chambre de combustion. Ceci entraîne souvent des fumées noires composées de particules en suspension et de suie ;
- La viscosité du Biodiesel est très supérieure à celle du gasoil, l'injection, la pulvérisation et la combustion dans la chambre à combustion s'en trouvent affectés. En effet on observera une perte dans la finesse de pulvérisation du jet, l'une des solutions souvent préconisées est le préchauffage du Biodiesel avant son utilisation ;
- Son point éclair étant très haut, il est susceptible de causer de problèmes de démarrage à froid. Ce problème est particulièrement perceptible dans les pays froids de l'Europe de l'est ou de l'Amérique du nord [36].

Le tableau 1-4, présente certaines caractéristiques standards des Biodiesels d'après la norme européenne EN 14 214.

Tableau 1-4 - Propriétés standards des carburants Biodiesel (EN 14 214)

Caractéristiques	Valeurs limites en climat tempéré et tropical	Tests
Teneur en soufre (% masse) max	0,0015	D 5453
Température limite de Filtrabilité		
Point de trouble		ISO 3015
Masse volumique à 15° C (kg/dm ³) min	0,860 – 0,900	ISO 3675
Viscosité à 40°C (mm ² /s)	3,5 – 6,0	D 445, ISO 3104
Indice de cétane mesuré minimal	51	ISO 5165, D 613
Indice de cétane calculé minimal	47	ISO 4264
Point éclair (°C) minimal	120	NF T 07 – 019

I.4. LES MODELES MATHEMATIQUES PREDICTIFS APPLIQUES MOTEURS A COMPRESSION

Nous évoquerons ici les modèles prédictifs communément appelés modèles de remplissage et de vidange. Les modèles de remplissage et de vidange considèrent les collecteurs d'admission et d'échappement comme des volumes capacitifs et le moteur comme un système ouvert où l'échange de masse et de chaleur est gouverné par l'équation de la conservation de masse et d'énergie. Suivant la précision souhaitée du modèle, l'écoulement des gaz à l'intérieur des conduites est supposé multidimensionnel (3D, 2D ou 1D) ou 0D (zerodimensionnel). A chaque itération, l'état des gaz dans les différents volumes est calculé d'après la loi de la conservation de la masse et d'énergie.

I.4.1 LES MODÈLES MULTIDIMENSIONNELS

Ces types de modèles sont définis comme multidimensionnels ou CFD (Computational Fluid Dynamics) dus à leur capacité inhérente à fournir des informations géométriques détaillées sur les champs d'écoulement basés sur la résolution des équations gouvernantes. Dans les calculs numériques des écoulements réactifs, le temps machine et les contraintes de stockage limitent sévèrement la complexité du mécanisme de réaction qui peut être incorporé. Ces modèles sont principalement basés sur la résolution des équations de Navier Stokes ; le procédé entier est habituellement décomposé en un certain nombre de parties à résoudre: dynamique de la phase liquide du jet, dynamique de la phase gazeuse, et cinétique chimique en phase gazeuse. Chaque partie est décrite par la formulation mathématique correspondante. Après l'application des modèles physiques appropriés, les équations gouvernantes sont résolues en utilisant des méthodes numériques [39, 40].

Les modèles multidimensionnels revêtent un caractère limitatif en terme de coût d'implémentation numérique. Ils sont en effet gourmands en mémoire et en temps de calcul, ce qui fait que leur utilisation est surtout appliquée à la recherche et développement de nouveaux prototypes ou à la simulation de phénomènes physiques concrets ayant cours pendant un cycle Diesel[8, 41]. Les études paramétriques de la combustion Diesel sont aussi difficiles à l'aide de ces modèles pour les mêmes raisons citées plus haut. Ils peuvent également être utilisés comme outils de validation des modèles 0D ou phénoménologiques car étant beaucoup plus précis que ces derniers.

De multiples codes de calculs commerciaux et Open Source utilisant des modèles multidimensionnels ont été développés, les plus connus étant Kiva [42], OpenFoam [43] et Ansys Fluent.

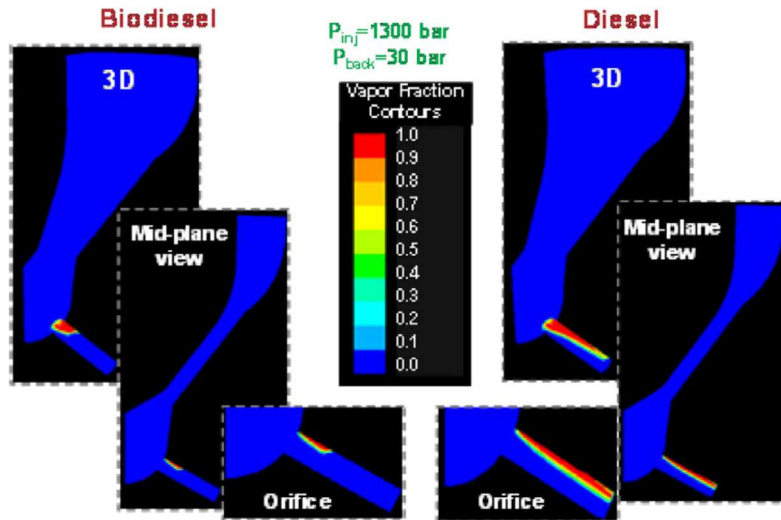


Figure 1-6 - Simulation comparative de l'écoulement du carburant Diesel et du Biodiesel dans un injecteur à l'aide du code Fluent 6.3 [44]

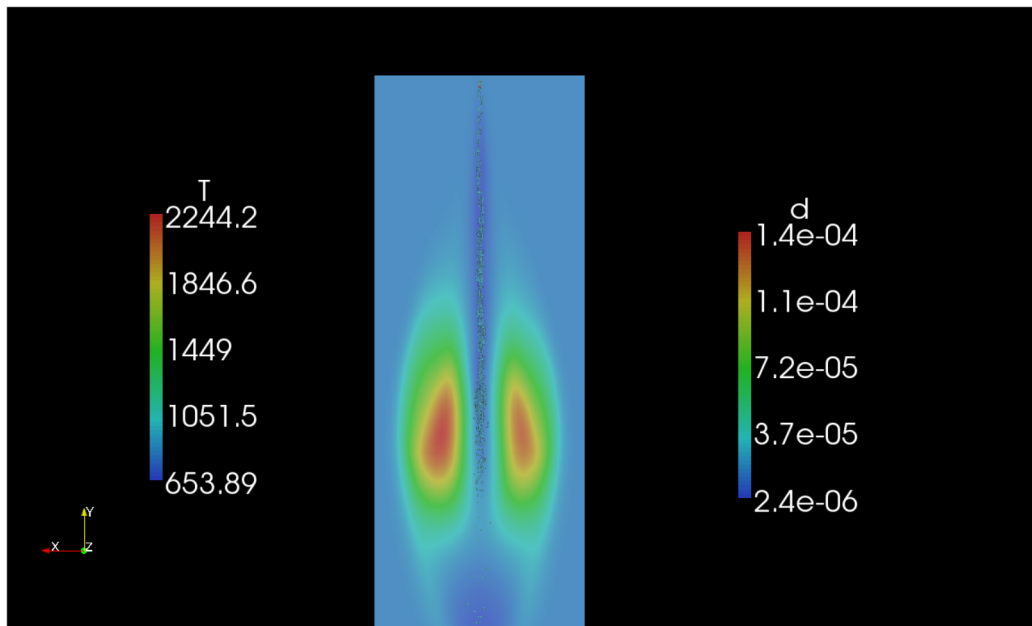


Figure 1-7 - Simulation d'un jet de n-heptane dans une chambre remplie de nitrogène sur OpenFoam[45]

I.4.2 LES MODÈLES ZÉRO-DIMENSIONNELS THERMODYNAMIQUES

Les modèles de combustion dit zéro-dimensionnels thermodynamiques sont des modèles basés sur les lois de la thermodynamique et sur des relations semi-empiriques décrivant le taux de combustion du carburant injecté. Ces modèles sont aussi connus sous le nom de modèles système [26]. Ce type modèle tient son attractivité du fait de la relative simplicité de leur implémentation et de la rapidité qu'ils offrent en termes de vitesse de calcul et précision. A l'aide des outils de calculs performants existant de nos jours, ce type modèle peut servir à une simulation en temps réel de la combustion dans un moteur Diesel ; ce qui est un atout clair pour leur utilisation dans le contrôle moteur. Dans ce type de modèle, la composition des gaz contenus dans le cylindre est considérée homogène en tout temps et en tout lieu tout au cours du cycle [46].

Parmi les principaux précurseurs dans le domaine de la simulation 0D thermodynamique des moteurs à compression on peut citer les travaux de [10], Borman et Krieger [47] Watson [48].

I.4.2.1. LES MODELES DE DEGAGEMENT DE CHALEUR

Le dégagement de chaleur exprime la quantité de chaleur produite au cours de la combustion du carburant pendant le fonctionnement du moteur. Elle est liée à l'évolution de la fraction massique x de carburant brûlé par rapport à la rotation du vilebrequin.

Le dégagement de chaleur sans perte s'exprime suivant la corrélation suivante

$$Q_{in} = xM_l H_l \quad (1.9)$$

où M_l est la masse de carburant et H_l le pouvoir calorifique inférieure du carburant liquide.

Théoriquement, la fraction massique de carburant brûlé évolue de 0 à 100% en considérant que les pertes sont nulles, ce qui est évidemment loin de la réalité.

Il a été donc nécessaire de proposer une formulation mathématique permettant de décrire l'évolution de la fraction massique du carburant dans le cylindre.

L'approche de Wiebe consiste à écrire l'évolution de la fraction de carburant brûlé et sa dérivée en fonction de l'angle vilebrequin à l'aide d'une fonction de type exponentielle et l'appliquer au calcul des performances du moteur [25]. La fonction originelle de Wiebe s'exprime de la manière suivante :

$$x = 1 - \exp\left(-6.908\left(\frac{\varphi}{\varphi_d}\right)^{m+1}\right) \quad (1.10)$$

et sa dérivée

$$w_\varphi = \frac{dx}{d\varphi} = \frac{6.908(m+1)}{\varphi_d} \left(\frac{\varphi}{\varphi_d}\right)^m \exp\left(-6.908\left(\frac{\varphi}{\varphi_d}\right)^{m+1}\right) \quad (1.11)$$

L'argument -6.908 exprime l'hypothèse d'une fraction de carburant brûlé de 99% au cours d'un cycle. L'angle φ est la mesure de l'angle de rotation du vilebrequin pris à partir du début la combustion, l'angle φ_d exprime la durée totale du processus de combustion. Le paramètre m est un paramètre d'ajustement du modèle par rapport aux données expérimentales.

Le modèle 0D de Wiebe a été très longtemps utilisé pour la simulation des moteurs à compression, mais il a été démontré qu'il pose des limites, car il ne prend pas en compte la période de pré mélange dans le cycle de combustion ; de plus les paramètres tels que m et le coefficient pré exponentiel doivent être lissés pour correspondre aux données expérimentales. L'utilisation de la fonction originelle de Wiebe s'est beaucoup plus limitée récemment à la modélisation des moteurs à allumage commandé [49, 50].

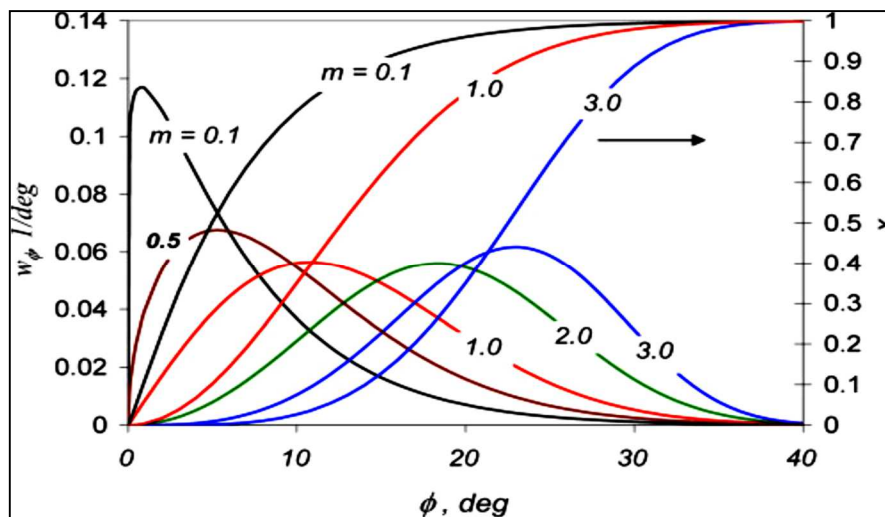


Figure 1-8 - Évolution de la fraction de carburant brûlé et de sa dérivée pour m allant de 0,1 à 0,3 et une durée de combustion de 40 degrés[51]

Le modèle 0D de Wiebe a nécessité plusieurs modifications pour son adaptation à la modélisation des moteurs à compression. On parle ainsi de double, triple ou multi fonction de Wiebe[27, 48, 52, 53].

Les auteurs [54, 55], dans le but de se libérer des multiples coefficients de lissage liés aux modèles de Wiebe, ont proposé un modèle innovateur basé sur l'hypothèse selon laquelle le mélange fuel/air, conséquemment 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 injectée. On constate que ce modèle prédit la tendance de dégagement de chaleur de manière très précise si et seulement si il n'y a pas d'impact du jet sur la tête du piston, ce qui lui revêt un certain caractère limitatif.

L'approche de [47, 56] est une méthode à une zone basée sur la première loi de la thermodynamique, la conservation de la masse et la loi des gaz parfaits pour le calcul des performances moteur. L'algorithme de Krieger et Bormann est basé l'utilisation de constantes polynomiales destinées à calculer l'indice adiabatique (rapport de chaleur spécifique) en fonction de l'angle de vilebrequin aux fins de déterminer l'énergie interne dans le cylindre à chaque instant du cycle. La difficulté que pose ce modèle est le nombre de constantes polynomiales à trouver et lisser afin de calibrer le modèle pour des types de moteurs et de carburants donnés.

I.4.2.2. LES MODELES 0D DE TRANSFERT THERMIQUE

Il est clair que la chaleur dégagée par le carburant injecté subit des pertes, dues notamment à la résistance des gaz dans les cylindres et également aux transferts convectifs forcés et de conduction vers les parois du cylindre.

La quantité de chaleur totale réellement dégagée dans le cylindre moteur est donc, avec prise en compte de ces charges, égale à :

$$Q_{tot} = Q_{in} - Q_{loss} ; \quad (1.12)$$

avec Q_{loss} exprimant les pertes. Ces pertes ont fait l'objet de plusieurs investigations, et différentes expressions les définissant ont été élaborées, allant des coefficients constants, à des expressions plus complexes.

En général on exprime ces pertes par une expression de type :

$$Q_{loss} = A \cdot h_c (T_{cyl} - T_{parois}) ; \quad (1.13)$$

avec A étant la surface instantanée d'échange et h coefficient de transfert de chaleur.

La surface instantanée d'échange est fonction de la cinématique du groupe bielle-manivelle ; le coefficient de transfert de chaleur (kW/m^2K) est beaucoup plus complexe à déterminer et a fait l'objet de plusieurs expressions le décrivant.

Parmi les expressions les plus utilisées pour la détermination du coefficient de transfert thermique se trouve celle de Woschni [57] :

$$h_c = 3,26 \cdot D^{-0,2} P_{cyl}^{0,8} T^{-0,55} w^{0,8} ; \quad (1.14)$$

pour laquelle w est la vitesse des gaz dans le cylindre. Elle est fonction des différents temps du cycle et s'exprime par :

$$w = \left[C_1 U_p + C_2 \frac{V_d T_r}{P_r V_r} (P_{cyl} - P_{ent}) \right] ; \quad (1.15)$$

avec P_r , T_r et V_r étant respectivement la pression, la température et le volume dans le cylindre au début de la combustion (PMH), V_d étant le volume déplacé, C_1 et C_2 étant des coefficients pris dépendamment du temps du cycle.

D'autres auteurs ont proposé des modèles de transfert thermiques, on peut notamment citer le modèle de Hohenberg [58] qui a proposé une amélioration du modèle de Woschni en la simplifiant, mais elle ne prend pas en compte les différents temps du cycle. La corrélation est la suivante :

$$h_c = 130 P_{cyl}^{-0,8} V_d^{-0,06} T_{cyl}^{-0,4} (U_p + 1,4)^{0,8} ; \quad (1.16)$$

D'autres corrélations peuvent être trouvées dans [59-61].

I.4.3 LES MODÈLES PHENOMENOLOGIQUES

Dans ces types de modèles, des détails de phénomènes différents se produisant pendant la combustion Diesel sont ajoutés à l'équation de base de la conservation d'énergie.

Les modèles phénoménologiques de combustion sont pratiques pour décrire la combustion dans les moteurs Diesel ainsi que pour effectuer des études paramétriques. Ceci parce que le processus d'injection, qui peut être relativement bien simulé par une approche phénoménologique, a un effet dominant sur la formation de mélange réactif et le processus subséquent de combustion.

Ces modèles se subdivisent généralement en sous-modèles 0D couplés les uns aux autres qui chacun modélise un des phénomènes ayant cours à chaque cycle. Les principaux sous-modèles sont généralement les suivants : Injection et pulvérisation, évaporation, délai d'auto inflammation, sous-modèle 0D thermodynamique, sous-modèles d'émissions. Le

diagramme général de simulation de ce type de modèle est représenté à la figure suivante (Fig. 1.9):

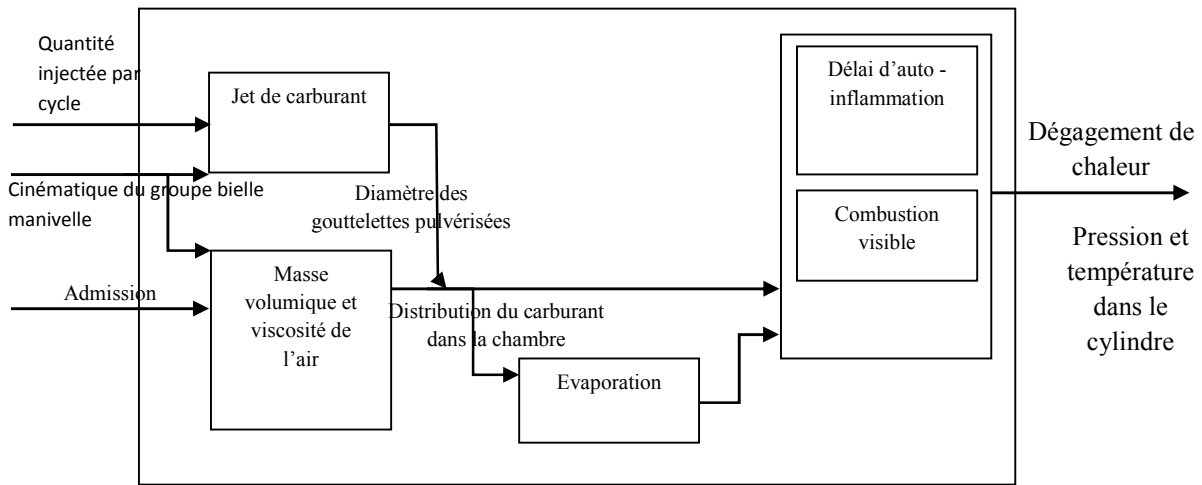


Figure 1-9 - Diagramme de calcul pour les modèles 0D phénoménologiques

I.4.3.1 INJECTION ET PULVERISATION

L'injection et la pulvérisation on fait et continuent de faire l'objet de nombreuses études dans la recherche sur les moteurs Diesel. En effet, il a été démontré que la finesse de pulvérisation agit sur la qualité de combustion dans le cylindre ; ainsi plus les gouttelettes de carburant pulvérisé sont fines, plus la distribution des gouttelettes sera homogène dans le cylindre ; plus le mélange air/carburant dans le cylindre est susceptible de bruler complètement[28, 62].

Différents modèles ont été proposés pour la modélisation des processus d'injection et la pulvérisation, nous allons brièvement présenter ici les plus notables.

En général l'injection de carburant dans le cylindre de moteur Diesel peut être caractérisée par :

- La pénétration du jet liquide ou 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).

La longueur de transition (en anglais Break-up length), caractérise la phase initiale du jet, celle pendant laquelle le liquide injecté constitue une masse uniforme se déplaçant le long de l'axe d'injection. Au-delà d'un certain temps appelé temps de Break-up (t_b), la phase liquide se décompose en fines gouttelettes dont le diamètre est caractérisé par le diamètre moyen de

Sauter, qui par la suite s'évaporeront à cause de la température élevée à l'intérieur du cylindre. La pénétration du mélange vapeur-liquide (S) caractérise quant à elle la distance parcourue après le Break-up du carburant injecté. La détermination de l'angle du jet revêt également une importance primordiale. En effet il est nécessaire de savoir si oui ou non le jet atteindra les parois du cylindre afin d'évaluer les interactions éventuelles. La finesse de la pulvérisation revêt également une importance avérée, car d'elle dépend la cinétique de combustion du carburant liquide dans la chambre de combustion. Les travaux de [63] présentent une revue des différentes corrélations caractérisant les paramètres énoncés plus haut. Nous nous attèlerons à présenter celles qui ont effectivement fait l'objet de notre étude bibliographique.

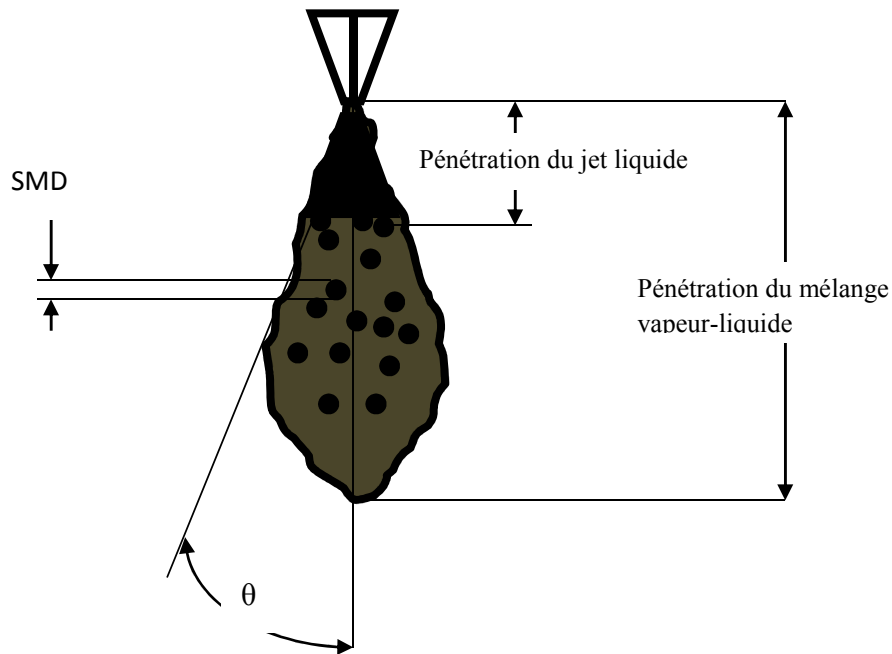


Figure 1-10 - Caractéristiques du jet Diesel

I.4.3.1.A. PENETRATION DU JET LIQUIDE (L_B) ET PENETRATION DU MELANGE VAPEUR-LIQUIDE (S)

La plupart des corrélations empiriques décrivant la pénétration du jet données par la littérature présentent des similitudes principalement au niveau des facteurs influençant ce dernier. Ces facteurs sont principalement, la masse volumique du carburant, la pression d'injection, le diamètre des trous d'injecteurs et la pression de l'air à l'intérieur du cylindre. Le tableau suivant présente les différentes corrélations existantes dans la littérature concernant les pénétrations du jet :

Tableau 1-5 - synoptique des corrélations pour la pénétration du jet liquide (L_b) et (ou) pénétration du mélange vapeur-liquide (S)

Dénomination du modèle	Corrélation pour la pénétration du jet liquide (L_b) et(ou) pénétration du mélange vapeur-liquide (S)	Référence bibliographique
Dent	$S = 3,07 \left(\frac{\Delta P}{\rho_g} \right)^{0,25} (d_0 t)^{0,5} \left(\frac{294}{T_g} \right)^{0,25} \quad (1.17)$	[64]
	$L_b = 7d_0 \cdot \left(1 + 0,4 \frac{r_0}{d_0} \right) \left(\frac{P_g}{\rho_l V_{inj}^2} \right)^{0,05} \left(\frac{l_0}{d_0} \right)^{0,13} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0,5} ; \quad (1.18)$	
Hiroyasu	$S = 0,39 \left(\frac{2 \cdot \Delta P}{\rho_l} \right)^{0,5} t \text{ pour } 0 < t < t_b$ $S = 2,95 \left(\frac{\Delta P}{\rho_g} \right)^{0,25} (d_0 t)^{0,25} \text{ pour } t > t_b$ $t_b = 28,6 \left(\frac{\rho_l d_0}{\sqrt{\rho_g \Delta P}} \right)$	[65, 66]
Naber et Sieber	$L_b = \frac{b}{a} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0,5} \frac{d_0 C_a^{0,5}}{\tan(\theta)} \sqrt{\left(\frac{2}{B} + 1 \right)^{0,5} - 1} ; \quad (1.19)$	[67, 68]

$$\tilde{S} = \left[\left(\frac{1}{\tilde{t}} \right)^n + \left(\frac{1}{\tilde{t}^{0,5}} \right)^n \right]^{\frac{1}{n}},$$

$$\tilde{S} = \frac{S}{x^+}$$

pénétration adimensionnée

$$\tilde{t} = \frac{t}{t^+}, \text{ temps adimensionné}$$

$$x^+ = \frac{C_a^{0,5} d_0 \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}}}{\tan(\theta)}, \text{ échelle de longueur du modèle}$$

$$t^+ = \frac{C_a^{0,5} d_0 \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}}}{\tan(\theta) V_{inj}}, \text{ échelle de temps du modèle}$$

$$L_b = C_s d_0 W_e^{0,25} M^{0,4} \rho_l^{-0,6}; \quad (1.20)$$

$$S = A_s \vartheta^{0,35} \exp \left[-0.2 \cdot \left(\frac{t}{t_b} \right) \right] \text{ pour } 0 < t < t_b$$

Modèle RK $S = B_s^2 t^{0,5}$ pour $t > t_b$ [11]

$$t_b = \frac{l_b^2}{B_s}$$

$$B_s = \frac{d_0 U_{om} W_e^{0,21} M^{0,16}}{D_s \sqrt{2} \rho}; \quad (1.21)$$

I.4.3.1.B. ANGLE OU DEMI-ANGLE DE JET

L'angle de spray est influencé par différentes propriétés du système du processus d'injection telles que les paramètres du système d'injection, les conditions thermodynamiques de la chambre de combustion ainsi que les propriétés du carburant injecté. Tout comme la pénétration du jet, l'angle du jet a été l'objet de plusieurs corrélations permettant de le caractériser. Le tableau ci-après présente les différentes corrélations existantes dans la littérature concernant les angles de jet :

Tableau 1-6 - synoptique des corrélations pour l'angle de jet θ

Dénomination du modèle	Corrélation pour la pénétration du jet liquide (L_b) et(ou) pénétration du mélange vapeur-liquide (S)	Référence bibliographique
Hiroyasu	$2\theta = 83,5 \left(\frac{l_0}{d_0} \right)^{-0,22} \left(\frac{d_0}{d_{sac}} \right)^{0,15} \left(\frac{\rho_g}{\rho_l} \right)^{0,26} ; (1.22)$	[66]
Siebers	$\tan(\theta) = C_\theta \left[\left(\frac{\rho_g}{\rho_l} \right)^{0,19} - 0,0043 \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0,5} \right] ;$ <p style="text-align: center;">(1.23)</p>	[68]
Modèle RK	<p style="text-align: center;">pour $0 < t < t_b$</p> $\theta = 2 \arctan \left(E_s W_e^{0,35} M^{-0,07} \Xi^{-0,12} \rho_l^{0,5} e^{0,07 \frac{t}{t_b}} \right) ;$ <p style="text-align: center;">(1.24)</p> <p style="text-align: center;">pour $t > t_b$</p>	[11]

I.4.3.1.C. FINESSE D_{32} (SMD - DIAMETRE MOYEN DES GOUTTELETTES PULVERISEES)

Une des fonctions importantes du système d'injection de carburant est de le pulvériser en gouttelettes très fines, en général autour de $10 \mu m$ de diamètre dans la taille.

L'atomisation augmente considérablement la superficie du combustible liquide et accélère le procédé de vaporisation. La mesure de la taille des gouttelettes dans les jets Diesel est très difficile parce qu'ils sont généralement denses et ainsi difficiles à quantifier grâce aux techniques optiques usuelles.

Le diamètre moyen de Sauter (SMD) représente la taille d'une goutte possédant en moyenne le même ratio volume sur surface que l'ensemble des gouttes du spray, et permet de caractériser la pénétration des gouttes dans l'air, qui est fonction du rapport entre l'inertie des gouttes et leur résistance aérodynamique.

La valeur du SMD est une quantité caractérisant la taille moyenne de gouttelette d'un jet de carburant pulvérisé. Il est utilisé en modélisation pour définir la durée moyenne de combustion du mélange dans la chambre de combustion, le tableau ci-après présente certaines corrélations issues de la littérature permettant de déterminer le SMD :

Tableau 1-7 - synoptique des corrélations définissant le diamètre moyen des gouttelettes pulvérisées

Dénomination du modèle	Corrélation pour la pénétration du jet liquide (L_b) et(ou) pénétration du mélange vapeur-liquide (S)	Référence bibliographique
Elkotb	$d_{32} = 3,08 \cdot 10^6 \nu^{0,385} \sigma^{0,737} \rho_l^{0,737} \rho_g^{0,06} \Delta P^{-0,54} ;$ <p style="text-align: center;">(1.25)</p>	[69]
Hiroyasu	$d_{32} = \max [d_{32LS}, d_{32HS}] ;$ <p style="text-align: right;">(1.26)</p> $d_{32LS} = 4,12 d_0 \text{Re}_l^{0,12} \text{We}_l^{-0,75} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g} \right)^{0,54} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0,18}$ $d_{32HS} = 0,38 d_0 \text{Re}_l^{0,25} \text{We}_l^{-0,32} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g} \right)^{0,37} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{-0,47}$	[66]
Modèle RK	$d_{32} = 1,7 d_0 M^{0,0733} (\text{We} \cdot \rho)^{-0,266} ;$ <p style="text-align: right;">(1.27)</p>	[11]

I.4.3.2. MODELES D'EVAPORATION

La concentration des vapeurs du carburant injecté et pulvérisé dans la chambre de combustion est proportionnelle à sa vitesse d'évaporation, ce qui a une influence décisive sur les performances moteurs. La distribution du jet de carburant, son aérodynamique, la

température ambiante ainsi que la composition des gaz dans la chambre de combustion ont une grande influence sur l'évaporation du carburant.

La description du processus d'évaporation des gouttelettes de carburant pulvérisé dans la chambre a fait l'objet de plusieurs travaux [70-74].

En général dans les modèles d'évaporation du carburant pulvérisé dans les moteurs à compression, les hypothèses suivantes sont généralement prises :

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

Une des premières et simples approches théoriques adoptées pour la résolution des problèmes de modélisation de l'évaporation des gouttelettes dans un moteur à compression a été proposée par Godsave [75] et Spalding[76]. Cette approche est connue sous le nom de « la loi des d^2 » (d^2 -law), car elle définit la variation du carré du diamètre de la gouttelette pulvérisée par rapport au temps. La variation du carré du diamètre d'une gouttelette de carburant pulvérisée par rapport au temps dans une chambre de combustion de moteur à compression est donnée par :

$$d_k^2 = d_0^2 - K\tau_i; \quad (1.28)$$

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 est le temps écoulé à partir du début de l'évaporation d'une gouttelette donnée jusqu'au moment d'observation. En se basant sur l'hypothèse d'homogénéité de la distribution des gouttelettes dans la chambre de combustion, on prend donc $d_0 = d_{32}$.

La constante d'évaporation est donnée par [11] suivant la formule suivante :

$$K = \frac{4 \cdot 10^6 N_{UD} \cdot D_p \cdot p_s}{\rho_l}; \quad (1.29)$$

où: N_{UD} est le nombre Nusselt pour la diffusion, D_p est le coefficient de diffusion des vapeurs de carburant dans les conditions d'une chambre de combustion, p_s est la pression des vapeurs saturée de carburant.

Pour [76] et [75] la constante K caractérise la vitesse de diminution des dimensions de la gouttelette initialement formée après pulvérisation. La relation (1.29) montre que cette constante est inversement proportionnelle à la masse volumique du carburant. Ce qui veut dire que plus la masse volumique d'un carburant est grande, moins vite ses gouttelettes s'évaporeront après pulvérisation dans une chambre de combustion de moteur à compression. Cette affirmation est d'une importance cruciale ; elle d'ailleurs confirmée par [77] qui a montré que durant la période d'injection du carburant dans une chambre de combustion de moteur à compression, la vitesse de combustion est définie principalement par la vitesse d'évaporation de ses gouttelettes.

1.4.3.3. DELAI D'AUTO INFLAMMATION

Le délai d'auto-inflammation est l'un des critères les plus importants, ayant une influence sur le processus de combustion dans les Diesels. Il a une influence sur les efforts mécaniques que subissent les différents organes mécaniques, les émissions polluantes ainsi que le bruit engendré dans le moteur.

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 est constitué 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 qui est attribué aux réactions de pré mélange (combustion pré mélangée). Il est généralement considéré que ces deux délais on lieu de manière simultanée, ce qui a amené plusieurs chercheurs à mettre sur pied des formulations empiriques permettant de déterminer ce délai comme étant une entité unique.

La tendance actuelle est à la réduction du délai d'auto-inflammation dans le but de permettre une réduction des émissions d'oxydes d'azote [62].

Les différentes corrélations existantes ont été développées dans des conditions expérimentales différentes, mais dégagent une caractéristique commune montrant que ce délai peut être exprimé de manière générale à l'aide d'une loi d'Arrhenius :

$$\tau_{id} = A \cdot P^{-m} \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right); \quad (1.30)$$

où A est généralement une constante caractérisant la fréquence de collision des molécules réactives, P est la pression dans la chambre, T est la température, R est la constante des gaz parfaits, m est une constante caractérisant la cinétique de combustion du carburant liquide, E_a est l'énergie d'activation en kJ/mol .

Le tableau (1.8) présente différentes corrélations existantes dans des recherches antérieures ainsi que pour certaines, les conditions expérimentales dans lesquelles elles ont été obtenues.

Tableau 1-8 - synoptique des corrélations de délais d'inflammation

Dénomination du modèle	corrélations de délais d'inflammation	Référence bibliographique
	$DI = AP^B \phi^C \exp\left(\frac{D}{T}\right) ; \quad (1.31)$ <p style="text-align: center;">DI en ms, P en atm, T en K</p> <p style="text-align: center;">Pour le carburant Diesel :</p> $A = 2,76 \cdot 10^{-2}, B = -1,23, C = -1,60, D = 7280$ <p style="text-align: center;">Pour le n-hexadécane :</p> $A = 8,72 \cdot 10^{-1}, B = -1,24, C = -2,10, D = 4050$	[78]
Ikura		
Conditions expérimentales		
Dans une chambre à volume constant et injecteur à un seul trou.		
$660 \leq T \leq 900K$ $6 \leq P \leq 31atm$ $0,5 \leq \phi \leq 1,0$		

$$DI = \left[0.36 + 0.22 \overline{U}_p \right] \exp \left[\frac{618840}{IC + 25} \cdot \left(\frac{1}{RT_{im} \varepsilon^{n_c - 1}} - \frac{1}{17190} \right) + \left(\frac{21.2}{P_{im} \varepsilon^{n_c} - 12.4} \right)^{0.63} \right];$$

(1.32)

Hardenberg

[79]

IC – Indice de cétane

T_{im}, P_{im} – Température (K) et pression (bar) à la tubulure
d'admission

\overline{U}_p - vitesse moyenne du piston en m/s

$$DI = AP^n \phi^{-1.9} \exp \left(\frac{5130}{T} \right); \quad (1.33)$$

DI en ms , P en atm , T en K

Pour le fioul lourd :

$$P \leq 40 atm, A = 1,37 \cdot 10^{-1}, n = -1,06$$

$$P \geq 40 atm, A = 2,97 \cdot 10^{-3}, n = 0$$

Fujimoto

[80]

Conditions expérimentales

Dans une chambre à volume constant et injecteur à 9 trous.

$$710 \leq T \leq 810 K$$

$$11 \leq P \leq 73 atm$$

$$0,71 \leq \phi \leq 1,0$$

I.4.3.4. SOUS-MODELE 0D THERMODYNAMIQUE

Les sous-modèles thermodynamiques sont généralement issus des modèles 0D thermodynamiques tels que ceux vus à la section précédente. Ils sont couplés aux sous-modèles d'injection et de pulvérisation ainsi qu'à ceux de délai d'auto-inflammation et d'émission. Les données d'entrée pour ces sous-modèles sont généralement les suivantes :

- La durée de combustion ;
- Le délai d'auto inflammation ;
- La quantité de gaz dans la chambre de combustion ;
- Angle de début de combustion ;
- Les différentes variables d'état thermodynamique dans le cylindre (énergie interne, enthalpie, chaleur massique, etc.).

I.4.3.5. SOUS-MODELE D'EMISSION

Les sous-modèles d'émission permettent de prédire les quantités de particules polluantes issues des gaz brûlés au cours de la combustion. Comme il a été vu plus haut, les principaux éléments polluants qui sont les plus soumis à des normes anti-polluants restrictives sont les émissions d'oxydes d'azote (NOx) et de particules de suie.

Pour ce faire, il a été nécessaire de proposer des modèles prédictifs permettant de manière précise de quantifier ces différentes particules à chaque instant du cycle de combustion dans un moteur à compression.

Les modèles d'émission s'appliquent généralement indifféremment du type de moteur à simuler (à allumage commandé ou par compression). Les principales données d'entrée pour ces modèles sont la température et la pression des gaz dans le cylindre à chaque instant donné. La difficulté de résolution de ce type de problème est le fait que ces modèles résultent souvent à des équations différentielles non linéaires dont la résolution est parfois fastidieuse.

Nous présenterons ici les principaux mécanismes théoriques de formation des particules de NOx et de suie, les méthodes numériques ayant trait à leur quantification seront abordées dans les chapitres 3 et 4 de cette thèse.

I.4.4. FORMATION DES OXYDES D'AZOTE (NOX)

L'oxyde nitrique est le composant principal des émissions de NOx dans les moteurs à combustion interne. Pendant la combustion, trois sources probables de formation des oxydes nitriques ont été identifiées [81]:

- NO thermique : Formé par oxydation de l'azote (moléculaire) atmosphérique à températures élevées dans les gaz brûlés post-flamme. ;
- NO précoce : Formé dans le front de flamme dans la zone de réaction ;
- NO du combustible : L'oxydation de l'azote contenu dans le carburant aux températures relativement basses.

I.4.4.1. NO THERMIQUE

L'oxyde nitrique thermique est la source dominante des NO dans des moteurs à compression [10, 81]. Le NO thermique est formé dans les gaz brûlés à haute température après le front de flamme. Le ratio de formation du NO thermique augmente exponentiellement avec la température des gaz brûlés bien qu'il soit plus lent comparés au ratio global de la combustion.

Les trois réactions suivantes, couramment désignées sous le nom de « mécanisme étendu de Zeldovich » régissent la formation du NO thermique [10].



où k_{+1} , k_{+2} et k_{+3} sont les constantes du taux de réaction pour les réactions directes et k_{-1} , k_{-2} et k_{-3} sont pour les réactions inverses.

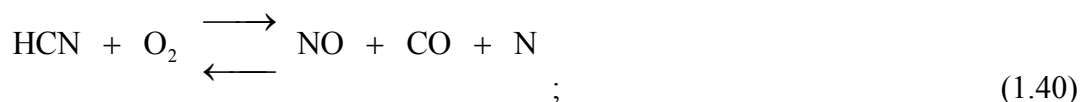
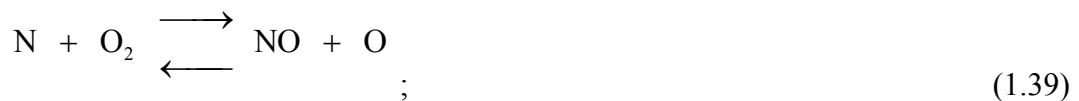
Le mécanisme de Zeldovich originel comprenait les deux premières réactions, la troisième réaction a été ajoutée par Lavoie [82]. Le terme à droite de la première équation et ceux à gauche des deux dernières pour les réactions inverses sont fortement endothermiques avec une énergie d'activation élevée ; ceci aboutit à une forte dépendance du processus de formation de NO par rapport à la température.

Les méthodes numériques de simulation des NO dans les moteurs Diesel seront abordées au chapitre 3.

I.4.4.2. NO PRECOCE

Les NO précoces contribuent en faible proportion à la formation des NO issue de la combustion dans les moteurs à compression. Leur formation a lieu en front de flamme par le biais de la réaction entre les radicaux de CH et de nitrogène N₂.

Ce mécanisme de formation des NO a une énergie d'activation inférieure à celle du mécanisme thermique, et tient place particulièrement dans le front de flamme, où des radicaux de courte durée de vie de CH apparaissent à des concentrations maximales de l'ordre de quelques parties par million. On a estimé que la contribution du mécanisme de NO précoce en flammes laminares et stœchiométriques est de l'ordre de 5 pour cent à 10 pour cent [83]. [84, 85] ont proposé des approximations pour prévoir la contribution du NO précoce dans les moteurs à combustion interne et ont conclu qu'elle devient importante dans les conditions de la dilution élevée (recyclage de gaz d'échappement, mélange pauvre), pour lesquelles la production de NO thermique est réduite. Les réactions suivantes régissent la formation du NO précoce :



I.4.4.3. NO DU COMBUSTIBLE

Le processus au cours duquel l'azote dans le carburant réagit avec l'oxygène contenu dans les gaz de combustion pour former du NO constitue la formation du NO du combustible. Les carburants gazeux contiennent une quantité relativement faible d'azote et produisent par conséquent de faibles quantités d'émission de NO par ce processus. Le charbon et les carburants liquides contiennent beaucoup plus d'azote, ainsi la formation de NO de combustible est constituée donc une partie importante de la quantité totale de NOx produite pour ces types de carburant comparés aux combustibles gazeux. Le mécanisme caractérisant le processus de formation de NO du combustible n'est pas entièrement compris, il est cependant décrit par les deux équations suivantes:



où X symbolise les autres produits formés au cours de la réaction et dont les constituants ne sont pas encore totalement définis à ce jour [81, 86].

I.4.5. DERNIERS DEVELOPPEMENT SUR LES MODELES 0D ET LEUR APPLICATION A LA SIMULATION DE LA COMBUSTION DES BIODIESEL

En termes de paramétrage du moteur, d'optimisation et de vitesse d'exécution, les modèles 0D phénoménologiques fournissent d'assez bons résultats. De nombreuses études et recherches sur les modèles 0D phénoménologiques de combustion des moteurs diesel ont été publiées récemment variant par leurs approches et leur complexité. Le modèle de Jung et Assanis [87] prédit le taux de dégagement de chaleur ainsi que les performances moteur, à l'aide d'une approche multizones, le modèle est limité en ce qui concerne la prédiction des émissions de NOx suivant un large éventail de conditions de fonctionnement et son coût de calcul est fortement tributaire du nombre de zones utilisées. Rakopoulos et al. [88] ont utilisé une approche de combustion à deux zones couplée à un modèle de jet multizone pour prédire les paramètres de cylindre ainsi que les émissions du moteur ; dans ce modèle, la vitesse de combustion est considérée comme proportionnelle à la vitesse d'évaporation des gouttelettes et les phases de combustion en pré mélange et diffusion sont considérées indiscernables, ce qui

limite ce modèle pour ce qui est de la description de la cinétique de combustion. Le modèle est très sensible à la sélection précise des constantes de réglage contenues à l'intérieur de ses différents sous-modèles.

Dulbecco et al. [89] ont proposé un modèle pour déterminer le dégagement de chaleur et la variation de la pression cylindre à l'aide de fonctions de densité de probabilité avec un temps d'exécution d'environ 10^2 à 10^3 fois la durée d'un cycle moteur réel. En utilisant la même approche que Dulbecco et al., Bordet et al. [12] ont présenté un modèle comportant un temps d'exécution beaucoup plus réduit d'environ 7 s pour un demi-cycle. Ces deux modèles ont été mis en œuvre pour prévoir le délai d'auto inflammation et le dégagement de chaleur afin de pouvoir gérer les stratégies d'injection multiple. Cependant, ces modèles sont limités au CO, CO₂ et H₂O comme espèces issues des réactions de combustion et ont tous deux été validés uniquement sur les données thermochimiques du n-heptane. En outre, ces modèles 0D utilisent de grandes données thermochimiques, ce qui les rend coûteux en termes de temps d'exécution si on les applique pour le calcul des émissions de polluants.

Le modèle de Catania et al. [90] permet aussi de déterminer le dégagement de chaleur et la pression cylindre avec une approche basée sur l'équilibre entre le taux de dégagement de chaleur et d'énergie associée à la masse de carburant accumulé dans la chambre de combustion. Le modèle à une zone unique est efficace en termes de temps d'exécution, mais contient de nombreux coefficients de réglage empirique et ne calcule pas les émissions polluantes des moteurs ainsi que les caractéristiques de pulvérisation du carburant.

Les travaux cités ci-dessus présentés couvrent un large aspect du cycle de combustion diesel, mais certains sont limités à des phénomènes spécifiques liés à ce cycle ou par leur coût et leur complexité d'exécution. L'utilisation de grande table thermochimique et la multiplication des zones sont quelques paramètres augmentant le coût en termes de temps d'exécution pour certains des modèles cités, tandis que d'autres posent des hypothèses simplificatrices pouvant conduire à des pertes en précision bien que le cout global en termes de temps d'exécution peut être réduit.

L'usage des modèles 0D phénoménologiques pour la simulation de la combustion des Biodiesels dans les moteurs diesel n'est pas très répandu dans littérature, bien que quelques travaux notables et récents en ont fait état [91, 92]. La méthode principale utilisée dans les travaux de simulation de la combustion du Biodiesel dans les moteurs Diesel consiste à substituer dans le modèle les propriétés physiques et chimiques du carburant diesel conventionnel par celles du carburant Biodiesel. Le problème ici réside donc dans la

détermination des paramètres du Biodiesel dont la combustion doit être simulée ; la précision des résultats est donc dépendante de la précision des données du carburant insérées dans le modèle.

La chimie tabulée est d'un apport non négligeable en termes de précision des simulations de la combustion des Biodiesel. Ces tables thermodynamiques ont cependant le défaut de contenir un très grand nombre de données tabulées dont le traitement numérique est très coûteux en termes temps d'exécution et mémoire [89, 93, 94]. Cette limitation en termes de temps d'exécution et de coût mémoire est souvent contournée par l'usage de mécanisme cinétiques chimiques réduits [95] ainsi que d'algorithmes de calculs plus simplifiés est un paramètre qui tend à accroître le processus de calcul.

CONCLUSION

L'analyse bibliographique présentée dans ce chapitre nous a montré les progrès réalisés dans la technologie des moteurs Diesel ainsi que leur modélisation. Les moteurs Diesel modernes sont soumis à des contraintes normatives sur les émissions polluantes de plus en plus drastiques et au même moment les besoins en termes de performance sont de plus en plus élevés. Ces contraintes ont poussé les chercheurs à mettre sur pied des modèles mathématiques permettant la prédiction des performances des moteurs Diesel et ainsi réduisant les coûts liés au prototypage et à l'expérimentation. Les chercheurs ont stratifié les modèles de prédiction des moteurs Diesel en trois types : 0D thermodynamiques ; 0D phénoménologiques ; modèles multidimensionnels. Le compromis entre vitesse et précision des calculs est une problématique d'envergure pour les chercheurs et les industriels. Dans ce chapitre nous avons constaté que les modèles 0D phénoménologiques répondent mieux à ce compromis et permettent un champ d'études assez large concernant la modélisation des phénomènes inhérents à la combustion dans les moteurs Diesel. Toutefois, nous avons également constaté la rareté des recherches sur les modèles 0D phénoménologiques appliqués au Biodiesel.

Dans la même foulée, nous avons également constaté que les modèles 0D thermodynamiques peuvent être intégrés comme sous-modèles des modèles 0D phénoménologiques. Dans la logique de conception d'un tel modèle, nous nous appliquerons dans le chapitre suivant à proposer une étude théorique sur les modèles 0D thermodynamiques appliqués à la combustion des Biodiesel, afin d'évaluer leurs limites et ainsi justifier notre approche phénoménologique.

CHAPITRE 2 :
MODELISATION 0D
THERMODYNAMIQUE DE LA
COMBUSTION DIESEL

II.1 INTRODUCTION

Ce chapitre s'inscrit dans la suite de l'étude théorique de cette première partie. L'objectif est de présenter la modélisation 0D thermodynamique des moteurs afin d'en ressortir les avantages et inconvénients. L'approche utilisée ici consiste en l'élaboration d'un modèle 0D thermodynamique et par la suite sa validation et son applicabilité pour la simulation de la combustion des Biodiesels dans un moteur Diesel. Le chapitre débute par la présentation du modèle de dégagement basé sur la fonction de Wiebe et ses différentes variantes. Un choix de modèle de dégagement de chaleur est effectué et est suivi par un choix de modèle de délai d'auto-inflammation. Par la suite on présente les différentes étapes et l'algorithme de calcul utilisé pour le modèle 0D thermodynamique. La suite du chapitre présente la validation du modèle 0D thermodynamique pour un moteur Diesel alimenté à un carburant traditionnel, suivi de la validation du modèle pour un moteur Diesel alimenté au Biodiesel. Le chapitre se conclut par une évaluation critique du modèle 0D thermodynamique et par la définition des paramètres à implémenter dans la conception du modèle 0D phénoménologique que nous voulons mettre sur pied.

II.2. MODELES DE DEGAGEMENT DE CHALEUR

Le modèle que nous avons élaboré dans ce chapitre est basé sur le modèle de Wiebe de calcul des performances des moteurs à combustion interne [96]. Ce modèle a été pendant des années le principal outil de simulation des moteurs à combustion interne et plus particulièrement des moteurs à allumage par compression. L'application de modèles basés sur l'approche de Wiebe exige un calibrage précis des coefficients expérimentaux sur les données expérimentales dépendantes du moteur étudié.

L'une des limites du modèle Wiebe est qu'il décrit la dynamique de combustion Diesel suivant une phase diffusive ; or des travaux plus récents ont démontré que la combustion Diesel peut être subdivisée en deux phases : une phase de pré mélange et une phase de diffusion comme il a été au chapitre précédent.

L'application de l'approche de Wiebe a fait l'objet de plusieurs adaptations pour la combustion Diesel, on parle notamment de notion de double fonction de Wiebe et de multifonctions de Wiebe.

II.2.1. APPROCHE DE COMBUSTION DE WIEBE ET ADAPTATION A LA DYNAMIQUE DE COMBUSTION DIESEL

II.2.1.1. DOUBLE FONCTIONS DE WIEBE

L'approche par double fonction de Wiebe est celle pour laquelle la fonction originelle de Wiebe est subdivisée en deux fonctions superposées l'une sur l'autre ; fonctions qui chacune décrit une phase de la dynamique de combustion Diesel.

II.2.1.1.A. APPROCHE DE POUGATCHEV

Parmi les approches les plus notoires de doubles fonctions de Wiebe on peut citer notamment l'approche de Pougatchev, où on utilise une fonction de distribution de loi gamma pour caractériser le dégagement de chaleur dans un moteur Diesel à injection directe. Cette méthode, élaborée au sein de l'Institut Polytechnique de Leningrad utilise une expression analytique comprenant deux fonctions de distribution de loi gamma modifiée [97, 98].

L'approche de Pougatchev se résume aux expressions suivantes respectivement pour le taux carburant brûlé et sa vitesse de combustion :

$$x = x_{1\max} \left[1 - \exp \left(-0,5 \left(\frac{\varphi}{\varphi_1} \right)^2 \right) \right] + x_{2\max} \left[1 - \exp \left(-0,5 \left(\frac{\varphi}{\varphi_2} \right)^2 \right) \right]; \quad (2.1)$$

$$\frac{dx}{d\varphi} = \frac{x_{1\max}}{\varphi_1} \left(\frac{\varphi}{\varphi_1} \right) \exp \left(-0,5 \left(\frac{\varphi}{\varphi_1} \right)^2 \right) + \frac{x_{2\max}}{\varphi_2} \left(\frac{\varphi}{\varphi_2} \right) \exp \left(-0,5 \left(\frac{\varphi}{\varphi_2} \right)^2 \right); \quad (2.2)$$

Dans cette équation, $x_{1\max}$ et $x_{2\max}$ représentent les fractions maximales de chaleur dégagée respectivement au cours des phases de prémélange et de diffusion φ_1 et φ_2 sont les angles au cours desquels ces maxima apparaissent. Ce modèle n'est pas entièrement prédictif, car il ne met pas en évidence des corrélations entre les paramètres moteurs et les coefficients précédemment cités ; de plus ce modèle ne peut être appliqué que pour des moteurs dont le diagramme indicatif a été préalablement établi.

II.2.1.1.B. APPROCHE DE GHOJEL

Les limites de prédictibilité du modèle de Pougatchev ont été contournées par l'approche de Ghojel afin de mettre au point un modèle plus prédictif [51], d'après ce modèle le taux de carburant brûlé en fonction de l'angle balayé est donné par :

$$x = A_1 \left[1 - \exp \left(\frac{m_1}{(m_1 + 1)} \left(\frac{\varphi}{\Delta\varphi_1} \right)^{m_1 + 1} \right) \right] + A_2 \left[1 - \exp \left(\frac{m_2}{(m_2 + 1)} \left(\frac{\varphi}{\Delta\varphi_2} \right)^{m_2 + 1} \right) \right]; \quad (2.3)$$

et la vitesse de combustion par :

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\varphi} = & \frac{m_1 A_1}{\Delta\varphi_1} \left(\frac{\varphi}{\Delta\varphi_1} \right)^{m_1} \left[\exp \left(\frac{m_1}{(m_1 + 1)} \left(\frac{\varphi}{\Delta\varphi_1} \right)^{m_1 + 1} \right) \right] ; \\ & + \frac{m_2 A_2}{\Delta\varphi_2} \left(\frac{\varphi}{\Delta\varphi_2} \right)^{m_2} \left[\exp \left(\frac{m_2}{(m_2 + 1)} \left(\frac{\varphi}{\Delta\varphi_2} \right)^{m_2 + 1} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.4)$$

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 prescrit la valeur de $\Delta\varphi$ étant égale 3° , les autres coefficients devant être déterminés expérimentalement.

II.2.1.1.C. APPROCHE DE MIYAMOTO

L'approche de Miyamoto [99] consiste à la combinaison de deux fonctions de Wiebe originelle, mais résolue en termes d'énergie dégagée et non de taux de carburant brûlé par rapport à l'angle de vilebrequin balayé. Le modèle de Miyamoto décrit donc le taux d'énergie dégagée par l'expression :

$$\begin{aligned} \frac{dq}{d\varphi} = & \frac{6,9Q_p (m_p + 1)}{\varphi_p} \left(\frac{\varphi}{\varphi_p} \right)^{m_p} \exp \left(-6,9 \left(\frac{\varphi}{\varphi_p} \right)^{m_p + 1} \right) \\ & + \frac{6,9Q_d (m_d + 1)}{\varphi_d} \left(\frac{\varphi}{\varphi_d} \right)^{m_d} \exp \left(-6,9 \left(\frac{\varphi}{\varphi_d} \right)^{m_d + 1} \right) ; \end{aligned} \quad (2.5)$$

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

II.2.1.1.D. APPROCHE DE WATSON

Le modèle de Watson [48] est une relation empirique permettant de décrire le dégagement de chaleur à l'aide de deux fonctions Wiebe. La relation est de la forme :

$$x_i = \beta \left(1 - \exp \left[-a_p \left(\frac{\varphi - \varphi_{comb}}{\Delta\varphi} \right)^{m_p+1} \right] \right) + (1 - \beta) \left(1 - \exp \left[-a_d \left(\frac{\varphi - \varphi_{comb}}{\Delta\varphi} \right)^{m_d+1} \right] \right); \quad (2.6)$$

où les coefficients a_p , m_p , a_d et m_d sont les coefficients de pondération du modèle, β est le rapport de quantité de carburant brûlé (proportionnelle à la masse injectée de carburant) au cours de la phase de prémélange par rapport à la quantité totale de carburant brûlée au cours du cycle complet.

Le modèle présente l'avantage de pouvoir prendre en compte les conditions ambiantes, les paramètres de suralimentation et autres paramètres moteurs ; de plus les coefficients de pondération préétablis permettent un lissage moins pénible du modèle par rapport à l'expérimental.

II.2.1.2. MULTIPLES FONCTIONS DE WIEBE

Les modèles à multiples fonctions de Wiebe sont principalement appliqués aux moteurs Diesel à systèmes de combustion non conventionnels. On peut citer parmi les systèmes de combustion non conventionnels la combustion homogène HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) et le PCCI (Premixed Charge Compression Ignition), qui permettent une diminution significative des émissions polluantes [51]. Parmi les modèles de multiples fonctions de Wiebe utilisés pour la simulation non conventionnelle de combustion Diesel, on peut citer les travaux de Bilcan [100] qui utilise une triple fonction de Wiebe pour simuler la combustion de moteurs Diesel alimentés au biogaz et au carburant liquide Diesel. Les trois fonctions de Wiebe décrivent successivement la phase de prémélange du jet liquide pilote, la phase de prémélange du jet gazeux, et la phase de combustion diffusive du carburant gazeux et du carburant liquide résiduel.

Pour les applications en HCCI, Canova[101] a développé un modèle constitué de trois fonctions de Wiebe pour la formation du mélange réactif à l'extérieur de la chambre de combustion. Les trois fonctions représentent successivement la première étape de la combustion

HCCI qui est la combustion dite de flamme lente, la deuxième caractérise la période principale de combustion avec un fort taux de réaction, enfin la troisième caractérise cette même période avec un faible taux de réaction. Le modèle nécessite la détermination expérimentale de 12 coefficients de pondération par la méthode d'optimisation des moindres carrés non linéaire.

II.2.1.3. CHOIX DE L'APPROCHE DU MODELE DE DEGAGEMENT DE CHALEUR ET JUSTIFICATION

Le choix final de l'approche s'est porté sur le modèle de Watson. Il est vrai que le modèle de Miyamoto présente un caractère attractif par le fait qu'il permet de calculer de manière directe l'énergie par la combustion en fonction de l'angle balayé par le vilebrequin. Cependant, nous avons trouvé ce modèle inapproprié pour la simulation Diesel, car ne prenant pas en compte la quantité de carburant injectée au cours des phases de combustion. L'injection étant un paramètre important de la combustion Diesel, nous avons opté pour un modèle le prenant en compte.

II.3. DESCRIPTION DU MODELE ET EQUATIONS GOUVERNANTES

Le modèle décrit dans ce chapitre est constitué de plusieurs sous-modèles, l'algorithme de résolution est présenté à la figure 1. Le modèle est constitué comme suit :

- **Les paramètres d'entrée qui sont :**

- a) Les caractéristiques du carburant (composition chimique, indice de cétane, pouvoir calorifique) ;
- b) Les caractéristiques moteurs (Nombre de cylindres, taux de compression, avance à l'injection, longueur de la manivelle, etc).

- **Les paramètres de la charge qui sont :**

- a) La quantité d'air dans le cylindre ;
- b) La richesse ;
- c) Le volume spécifique ;
- d) Température et pression en fin de compression ;

- **Les paramètres de combustion qui sont :**

- a) Le délai d'inflammation ;
- b) La durée de combustion ;

- c) Le dégagement de chaleur ;
- d) La variation des paramètres d'état thermodynamiques dans le cylindre (Température, pression, volume) ;
- e) Travail, énergie interne et puissance ;

Les sections suivantes présentent les principaux sous-modèles utilisés par le modèle.

II.3.1. SOUS MODELE DE DELAI D'INFLAMMATION

Le modèle originel de Wiebe ne prend pas en compte la période de délai d'auto inflammation lors du calcul du processus de combustion. Le modèle Wiebe calcule le dégagement de chaleur à partir de l'angle de début d'injection, alors qu'il a été démontré que l'auto inflammation se produit après un certain laps de temps après l'injection (délai d'auto-inflammation), en raison de processus de chimie complexe.

Dans notre modèle, nous avons utilisé le modèle proposé par Hardenberg et Hase[79] qui prend en compte l'une des principales propriétés du carburant qui est censé agir sur la période de délai de d'auto-inflammation, l'indice de cétane. Ce modèle a démontré un bon niveau de prédictibilité pour les carburants dotés d'un indice de cétane supérieur à 50, ce qui veut dire qu'il est applicable à la simulation des moteurs Diesels alimentés aux Biodiesels ainsi qu'aux carburants Diesels de dernière génération.

Le délai d'inflammation d'après ce modèle s'exprime selon la relation suivante :

$$ID = \left[0,36 + 0,22\overline{U}_p \right] \exp \left[\frac{618840}{CN + 25} \cdot \left(\frac{1}{RT_{im}\varepsilon^{n_c-1}} - \frac{1}{17190} \right) + \left(\frac{21,2}{p_{im}\varepsilon^{n_c} - 12,4} \right)^{0,63} \right] ; \quad (2.7)$$

Où \overline{U}_p est la vitesse moyenne du piston en m/s, R est la constante des gaz en J/kmol-K; ε est le rapport de compression du moteur; CN est l'indice de cétane; p_{im} et T_{im} sont la pression en bar et la température en degrés Kelvin à la tubulure d'admission, n_c est l'exposant polytropique pour la compression.

II.3.2. ÉTAPES DE CALCUL

Dans cette section on décrit les calculs effectués au cours du cycle complet du moteur; on détermine ici la pression à l'intérieur du cylindre à chaque angle balayé du vilebrequin

correspondant en tenant compte de l'avance à l'injection, du délai d'auto-inflammation, de la durée de combustion et autres paramètres. En définitive on sera en mesure ici de déterminer les différents paramètres caractérisant le rendement et l'efficacité du moteur. Le modèle calcule l'ensemble des processus se déroulant à l'intérieur du cylindre, les calculs étant faits pour chaque temps du cycle moteur.

II.3.2.1. TEMPS D'ADMISSION

La pression des gaz dans le cylindre à la fin du temps d'admission est donnée en Pascal par :

$$P_a = \frac{1}{\varepsilon} \left[(\varepsilon - 1) \eta_v \cdot P_{im} \cdot \frac{T_{im} + \Delta T}{T_{im}} + P_r \right]; \quad (2.8)$$

Où η_v est le coefficient d'admission, p_{im} en MPa, ΔT est le gradient de température dû à l'échauffement des éléments mécaniques du moteur en MPa, p_r est la pression des gaz résiduels en MPa.

La température des gaz dans le cylindre à la fin du temps d'admission est donnée en Kelvin par :

$$T_a = \frac{T_k + \Delta T + rT_r}{1 + r}; \quad (2.9)$$

r est le coefficient des gaz résiduels ; la quantité L'_0 théoriquement nécessaire (stœchiométrique) d'air pour la combustion de 1 kg de carburant est donnée par la formule ci-dessous et sa valeur dépend de la composition chimique du carburant utilisé

$$L'_0 = \frac{1}{0.23} \left(\frac{8}{3} C + 8H - O \right); \quad (2.10)$$

où C , H et O sont, respectivement, les titres de carbone, d'hydrogène et d'oxygène dans la composition chimique du carburant.

Le volume spécifique des gaz à la fin du temps d'admission est donné en m³/kg :

$$\nu_a = 0.008314 \frac{T_a}{\mu_{air} P_a}; \quad (2.11)$$

où μ_{air} est la masse moléculaire de l'air.

II.3.2.2. TEMPS DE COMPRESSION

Les paramètres thermodynamiques des gaz contenus dans le cylindre au cours du temps de compression sont déterminés en utilisant le principe de transformation polytropique.

À chaque instant après le temps d'admission, la pression des gaz dans le cylindre est donnée en MPa :

$$p = p_a \left(\frac{v_a}{v} \right)^{n_c} ; \quad (2.12)$$

où v est la valeur instantanée du volume spécifique est définie par :

$$v = \left(\frac{v_a}{\varepsilon} \right) \left(1 + \frac{\varepsilon - 1}{2} \sigma \right) ; \quad (2.13)$$

et celle du volume est :

$$V = \left(\frac{V_d}{\varepsilon} \right) \left(1 + \frac{\varepsilon - 1}{2} \sigma \right) \quad (2.14)$$

avec V_d étant le volume déplacé (en fin de d'admission).

σ est la fonction cinématique du mouvement du piston :

$$\sigma = 1 - \cos \varphi + \frac{1}{\lambda} (1 - \cos (\arcsin (\lambda \sin \varphi))) ; \quad (2.15)$$

où λ est le rapport de longueurs de la manivelle du vilebrequin bielle par rapport à la manivelle du vilebrequin φ est l'angle instantané balayé du vilebrequin.

Le travail spécifique de compression est alors déterminé en MJ/kg par :

$$l_{ay} = \frac{(p_a v_a - p_y v_y)}{n_c - 1} ; \quad (2.16)$$

Où v_y est le volume spécifique de la chambre en fin de compression, p_y est la pression des gaz en fin de compression.

II.3.2.3 TEMPS DE COMBUSTION

II.3.2.3.1 MODELE DE DEGAGEMENT DE CHALEUR

Les phases d'admission, de compression, et de délai d'inflammation étant calculées, la prochaine étape du modèle est le calcul de dégagement de chaleur. Notre modèle de dégagement de chaleur calcule deux phases du processus de combustion, la phase de prémélange et la phase de diffusion.

La fraction instantanée de carburant brûlé $x = f(\varphi)$ - où φ est l'angle de vilebrequin balayé à l'instant d'observation - est calculée en utilisant une double fonction Wiebe[27, 48], soit,

$$x = \beta x_p + (1 - \beta) x_d ; \quad (2.17)$$

avec x_p et x_d représentant la fraction de carburant brûlé dans chaque phase du processus de combustion, β représentant la fraction de carburant injectée pendant la phase de prémélange.

Pour chaque étape de la phase de combustion (équation 2.17), on peut écrire

$$x_i = 1 - \exp \left[-a_i \left(\frac{\varphi - \varphi_{comb}}{\Delta \varphi} \right)^{m_i+1} \right] ; \quad (2.18)$$

où a_i et m_i sont coefficients de pondération de la fonction de Wiebe; φ_{comb} est l'angle correspondant au début de l'angle de la combustion; $\Delta \varphi$ est la durée totale de combustion.

Le taux de combustion normalisé (1/deg) est calculé par dérivation de x par rapport φ .

II.3.2.3.2. MODELE DE COMBUSTION

a) Chaleur utile

La quantité de chaleur dégagée au cours du cycle de combustion sans perte peut être définie d'après Wiebe comme étant égale à

$$Q_{in} = x q_c H_l \delta ; \quad (2.19)$$

avec δ étant un coefficient prenant en compte les pertes dues à la combustion non complète du carburant au cours du cycle et q_c étant la quantité de carburant injecté par cycle en kg.

Si on désigne la quantité de chaleur utile pour la réalisation du travail fourni par le piston par Q alors on aura ;

$$Q = Q_{in} - Q_{pertes} ; \quad (2.20)$$

avec $Q_{pertes} = Q_w + Q_{hydr} + Q_{diss}$,

où Q_w - pertes vers les parois par convection forcée ;

Q_{hydro} - pertes issues de l'écoulement des gaz ;

Q_{diss} - pertes dues à la dissociation ;

Les valeurs de Q_w , Q_{hydro} et Q_{diss} évoluent par rapport au temps, les lois caractérisant ces évolutions sont données par [57-59, 61]. Néanmoins, d'après [25], en considérant le fait que les pertes constituent un très faible pourcentage par rapport à Q_{in} , de l'ordre de $Q_{pertes} = (0,08...0,15) \cdot Q_{in}$, l'erreur d'estimation ne serait pas très grande si on considérait que tout au long du processus de combustion la somme des pertes constituait un pourcentage constant de la quantité de chaleur dégagée au cours du cycle de combustion sans perte. On aura donc,

$$Q_{pertes} = Q_w + Q_{hydr} + Q_{diss} = (1 - \psi) Q_{in} ; \quad (2.21)$$

Le facteur ψ sera ainsi considéré d'après [25, 96] comme étant le coefficient d'exploitation de la chaleur émise.

On aura donc finalement en résolvant (2.20) et (2.21)

$$Q = \psi Q_{in} = \psi \delta x q_c H_l ; \quad (2.22)$$

$\xi = \psi \delta$ sera appelée efficacité de la combustion.

Ramenons la quantité globale de chaleur utile à un kilogramme du mélange réactif et appelons-la, chaleur utile spécifique, on encore :

$$q = \frac{Q}{G_{mr}} ; \quad (2.23)$$

où G_{mr} - masse du mélange réactif, ramenée à un kilogramme de carburant brûlé

$$G_{mr} = q_c (G_0 + G_r) = q_c (1+r) G_0 ; \quad (2.24)$$

avec G_0 - quantité de charge fraîche ramenée à un kilogramme de carburant brûlé ;

G_r - quantité de gaz résiduel pour un kilogramme de carburant ;

r – coefficient des gaz résiduels $r = \frac{G_r}{G_0}$

La chaleur utile spécifique de combustion est donc donnée pour les moteurs à compression en MJ/kg par :

$$q = \frac{Q}{q_c (1+r) \alpha L'_0} = \frac{\xi H_l}{(1+r) \alpha L'_0} x ; \quad (2.25)$$

ou encore :

$$q = q_z x ; \quad (2.26)$$

où α – est le coefficient d'excès d'air ; q_z - sera appelé la chaleur totale utile spécifique de combustion, se présentant comme la quantité de chaleur globale, ramenée à un 1 kilogramme de mélange réactif et participant à l'élévation de l'énergie interne et à l'accomplissement du travail effectif tout au long du processus de combustion.

Le tableau suivant présente les valeurs recommandées de ξ , l'efficacité de combustion dépendamment du type de chambre de combustion.

Tableau 2-1 - Valeurs recommandées de ξ , l'efficacité de combustion dépendamment du type de chambre de combustion

Type de chambre de combustion Diesel	ξ
Chambre unique	0,85... 0,90
Chambre équipée de dispositif de swirl	0,75... 0,80
Chambre équipée de préchambre de combustion	0,68... 0,72

Il est utile de noter que ξ est fonction du coefficient d'excès d'air, plus le mélange le mélange sera pauvre, plus ξ sera élevé. Les moteurs suralimentés auront donc une efficacité de combustion beaucoup plus élevée.

b) Modélisation de la dynamique de combustion

Si on discrétise le diagramme $p-v$ représentant la combustion Diesel en petits éléments représentant la transition d'un état thermodynamique 1 vers un autre état thermodynamique 2, pour chaque élément on pourra alors écrire la première loi de la thermodynamique suivant la forme :

$$q_{1-2} = C_{v1-2} (T_2 - T_1) + \int_{v_1}^{v_2} p dv ; \quad (2.27)$$

où: q_{1-2} est la chaleur spécifique utile à l'augmentation l'énergie interne du point de 1 au point 2 sur le diagramme $p-v$; C_{v1-2} est la chaleur spécifique moyenne du fluide de travail pour une pression constante du point 1 au point 2.

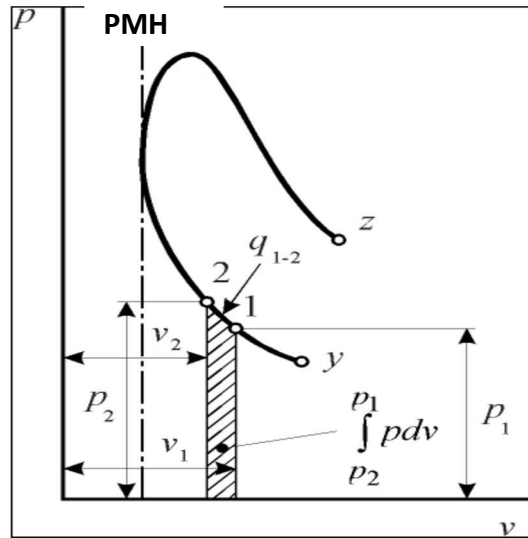


Figure 2-1 - Discretisation du diagramme p-v

Ainsi donc la chaleur spécifique utile d'un point (1) du diagramme $p-v$ à un autre point voisin (2) sera donnée par :

$$q_{1-2} = q_z (x_2 - x_1) = q_z \Delta x_{1-2}; \quad (2.28)$$

où Δx_{1-2} correspond à la fraction de carburant brûlé entre les point 1 et 2 ;

x_1 - fraction de carburant brûlé au point 1 du diagramme p-v ;

x_2 - fraction de carburant brûlé au point 2 du diagramme p-v.

À l'aide de la loi des gaz parfaits, l'équation (2.27) peut s'écrire :

$$C_{v1-2}(T_2 - T_1) = \frac{C_{v1-2}}{R_{1-2}}(p_2 v_2 - p_1 v_1); \quad (2.29)$$

La relation de Mayer nous donne

$$\frac{C_p}{C_v} - 1 = \frac{R}{C_v}$$

d'où :

$$\frac{C_v}{R} = \frac{1}{\gamma - 1}$$

avec $\gamma = \frac{C_p}{C_v}$ - rapport de chaleur massique ou encore indice adiabatique.

Ainsi la variation de l'énergie interne à l'intérieur du cylindre s'exprimera comme

$$C_{v1-2}(T_1 - T_2) = \frac{1}{\gamma_{1-2} - 1} (p_2 v_2 - p_1 v_1) ; \quad (2.30)$$

En considérant l'argument $(v_2 - v_1)$ suffisamment petit, on peut résoudre l'intégrale de la formule (2.27) à l'aide de la méthode des trapèzes. On peut donc poser :

$$\int_{v_1}^{v_2} p dv = \frac{p_2 + p_1}{2} (v_2 - v_1) ; \quad (2.31)$$

Les équations précédentes sont intégrées dans l'équation exprimant la première loi de la thermodynamique pour avoir l'expression :

$$q_z \Delta x_{1-2} = \frac{1}{\gamma_{1-2} - 1} (p_2 v_2 - p_1 v_1) + \frac{p_1 + p_2}{2} (v_2 - v_1) ;$$

En multipliant les membres de droite et de gauche par deux et en développant on obtient :

$$2q_z \Delta x_{1-2} = \frac{2p_2 v_2}{\gamma_{1-2} - 1} - \frac{2p_1 v_1}{\gamma_{1-2} - 1} + p_2 v_2 - p_2 v_1 - p_1 v_2 - p_1 v_1$$

qui donne par la suite:

$$\begin{aligned} 2q_z \Delta x_{1-2} &= \left(\frac{2v_2}{\gamma_{1-2} - 1} + v_2 - v_1 \right) p_2 - \left(\frac{2v_1}{\gamma_{1-2} - 1} + v_1 - v_2 \right) p_1 \\ &= p_2 \left[\left(\frac{2}{\gamma_{1-2} - 1} + 1 \right) v_2 - v_1 \right] - p_1 \left[\left(\frac{2}{\gamma_{1-2} - 1} + 1 \right) v_1 - v_2 \right] \end{aligned}$$

Étant donné que ce nous intéresse ici est l'évolution de la température tout le long du cycle, l'équation précédente est donc résolue pour p_2 , on obtient donc :

$$p_2 = \frac{2q_z \Delta x_{1-2} + p_1 \left(\left(\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \right) \cdot v_1 - v_2 \right)}{\left(\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \right) \cdot v_2 - v_1} ; \quad (2.32)$$

Δx_{1-2} est le rapport de carburant brûlé à partir du point 1 à 2.

L'équation (2.32) est résolue en prenant comme condition initiale l'état thermodynamique en fin de compression, correspondant à l'angle de début d'injection.

La température des gaz au temps de combustion est déterminée de la manière suivante :

À tout moment du processus de combustion on considère que le nombre de moles de gaz dans le cylindre varie. Ceci pris en compte, on pose l'équation d'état suivante :

$$pV = R(M_0 + M_r + \Delta M)T ; \quad (2.33)$$

où M_0 - est le nombre de moles de charge fraîche ; M_r - le nombre de moles des gaz résiduels ; ΔM - la variation du nombre de moles qui est définie par

$\Delta M = \Delta M_{\max} \cdot x$ à chaque pas de calcul, avec ΔM_{\max} qui est la variation maximale du nombre de moles pendant la combustion.

L'équation d'état au moment du début de la combustion peut être écrite comme :

$$p_{comb}V_{comb} = R(M_0 + M_r + \Delta M)T_{comb} ; \quad (2.34)$$

Alors en divisant (2.32) par (2.33) on obtient l'expression :

$$\frac{pV}{p_{comb}V_{comb}} = \frac{R(M_0 + M_r + \Delta M)T}{R(M_0 + M_r + \Delta M)T_{comb}} ; \quad (2.35)$$

Étant donné qu'en début de combustion, la fraction de carburant brûlé est nulle ($x=0$) alors l'expression (2.34) devient :

$$\frac{pV}{p_{comb}V_{comb}} = \frac{R(M_0 + M_r + \Delta M)T}{R(M_0 + M_r)T_{comb}} = \beta_c \frac{T}{T_{comb}} ; \quad (2.36)$$

d'où :

$$T = \frac{pVT_{comb}}{p_{comb}V_{comb}\beta_c} ; \quad (2.37)$$

$\beta_c = \frac{(M_0 + M_r + \Delta M)}{(M_0 + M_r)}$ - est appelé le coefficient de changement moléculaire [25, 96] au

cours du cycle de combustion.

Ainsi, si on considère la même discrétisation utilisée au cours du calcul de pression des gaz pendant le temps de combustion, on aura pour la variation d'un point (1) au point (2) du diagramme $p-v$ l'équation (2.37) qui deviendra

$$T_2 = \frac{pVT_{comb}}{p_{comb}V_{comb}\beta_{c1-2}} ; \quad (2.38)$$

où

$$\beta_{c1-2} = \frac{\beta_{c1} + \beta_{c2}}{2}$$

et $\beta_c = 1 + (\beta_{max} - 1)x$ - qui est la valeur du coefficient de changement moléculaire à tout instant du temps de combustion. β_{max} est la valeur maximale du coefficient de changement moléculaire. On a donc :

$$\beta_{max} = \frac{\beta_{0max} + r}{1 + r} ; \quad (2.39)$$

Avec $\beta_{0max} = 1 + \frac{\Delta M_{max}}{M_0}$ qui est la valeur théorique (chimique) du coefficient de changement moléculaire, qui est le rapport entre la quantité de moles de produits de combustion et la quantité de moles de charge fraîche. Cette valeur peut encore être calculée pour les diesels par la relation :

$$\beta_{0max} = 1 + \frac{\frac{H}{4} + \frac{O}{32}}{\alpha L_0} ; \quad (2.40)$$

Le travail spécifique des gaz pendant le temps de combustion est donné en MJ/kg par

$$L_{yz} = \sum_1^n \frac{p_1 + p_2}{2} (v_2 - v_1) ; \quad (2.41)$$

II.3.2.4. TEMPS DE DETENTE

Le temps de détente peut être également considéré comme un processus suivant une loi polytropique. Dans ce cas on peut poser les équations d'état suivantes pour la température et la pression :

$$pV^{n_e} = Cste ;$$

$$TV^{n_e-1} = Cste .$$

où n_e est l'exposant polytropique en détente.

Si on prend comme paramètres d'entrée l'état thermodynamique initial du milieu à la fin du temps de combustion, on aura donc à tout instant du processus de détente

$$p_z V_z^{n_e} = pV^{n_e} ;$$

et

$$T_z V_z^{n_e-1} = TV^{n_e-1}$$

de là on peut tirer :

$$p = p_z \left(\frac{V_z}{V} \right)^{n_e} ; \tag{2.42}$$

avec p_z et V_z la pression et le volume en fin de combustion.

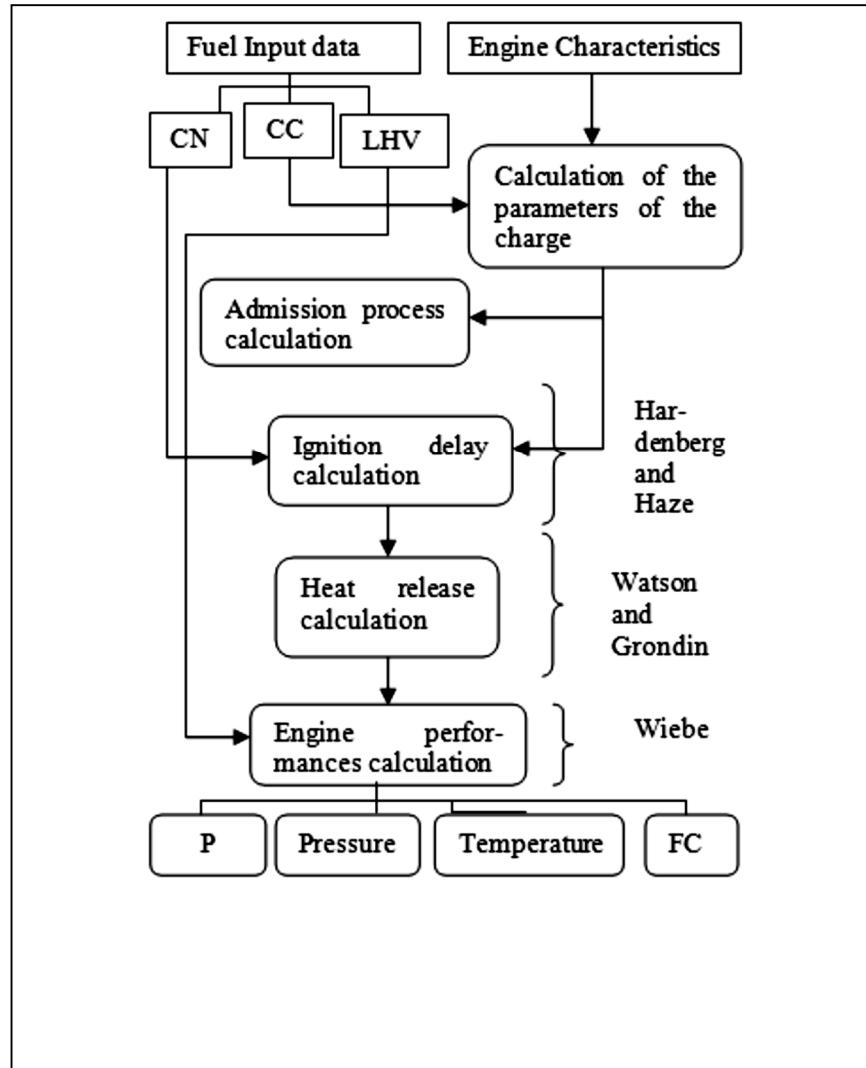


Figure 2-2 - Algorithme du modèle 0D thermodynamique; CN - Indice de cétane; CC - Composition chimique; P - Puissance; FC - La consommation de carburant; PCI - calorifique inférieur[102]

II.5. RESULTATS ET DISCUSSIONS

II.5.1. VALIDATION DU MODELE

La validation du modèle a consisté à comparer les résultats expérimentaux de recherches précédentes avec les résultats de la simulation à l'aide du modèle proposé ci-dessus. À cet effet, des données expérimentales obtenues par [2] à partir d'un moteur Diesel à un cylindre à vitesse nominale ont été comparées avec les résultats obtenus de la simulation du modèle. Pour approfondir l'investigation sur la validité du modèle, nous avons procédé à la simulation d'un

moteur Diesel à six cylindres à injection directe à différentes vitesses de rotation du vilebrequin. Les résultats ont été comparés avec les données expérimentales obtenues par[6].

La simulation a été effectuée sur un ordinateur équipé de 3 Go de mémoire vive et d'un processeur à double cœur. Le pas de temps de calcul utilisé pour la simulation était de 0,1 degré d'angle de vilebrequin balayé. Une simulation complète a pris environ 6 secondes. Les paramètres du modèle ont été lissés à l'aide de l'outil Matlab® (méthode des moindres carrés) pour correspondre de près aux résultats expérimentaux. La durée de combustion a été estimée à environ 75 et 60 degrés de rotation du vilebrequin, pour la première et la deuxième expérience respectivement.

II.5.2. DISPOSITIF EXPERIMENTAL

Les tableaux 2-2 et 2-3 présentent les spécifications des moteurs pour chaque expérience. Le calage de l'angle d'avance à l'injection pour la deuxième expérience a été déterminé à partir du diagramme indicatif expérimental de pression. La deuxième expérience a été réalisée pour différentes vitesses de rotation du vilebrequin - 1000, 1250, 1500, 1750 et 2000 tr/min. Le pouvoir valeur calorifique du carburant Diesel a été pris pour la deuxième expérience à 42,5 MJ/kg, les propriétés restantes le carburant restant inchangées pour les deux expérimentations. Pour effectuer la comparaison, nous avons utilisé les caractéristiques du carburant qui ont été mentionnées dans le travail de [2], mais en raison de l'absence de certaines informations pertinentes qui doivent être données en entrée comme paramètres de notre modèle, nous avons dû les ajouter selon les normes de carburant Diesel. Les spécifications du carburant Diesel utilisées pour la validation sont présentées au tableau 2-4.

Tableau 2-2 - Spécification du moteur pour la première expérimentation

No	Caractéristiques	Spécifications
1	Marque	Kirloskar Oil engine
2	Modèle	DAF 8
3	Puissance nominale (kW)	6
4	Vitesse nominale (tr/min)	1500
5	Nombre de cylindres	1
6	Alésage x Course (mm)	95 x 110
7	Rapport de Compression	17,5:1
8	Avance à l'injection	23°

Tableau 2-3 - Spécification du moteur pour la deuxième expérimentation

No	Caractéristiques	Spécifications
1	Marque	Ford
2	Modèle	6.0 Ford Cargo
3	Puissance nominale (kW)	81
4	Vitesse nominale (tr/min)	2600
5	Nombre de cylindres	6
6	Alésage x Course (mm)	104,8 x 114,9
7	Rapport de Compression	15,9:1
8	Avance à l'injection	20°

Tableau 2-4 - Spécifications du carburant Diesel utilisé pour la validation du modèle

No	Caractéristiques	Spécifications
1	Marque	Diesel
2	Pouvoir calorifique	44 MJ/kg
3	Teneur en carbone	87%
4	Teneur en hydrogène	12,6%
5	Teneur en oxygène	0,4%
6	Masse volumique (kg/m ³)	850
7	Viscosité à 40°C(Cst)	2,87
8	Indice de cétane	51

II.5.3. COMPARAISON DES RESULTATS EXPERIMENTAUX ET SIMULES

La figure. 2.3 montre la pression de cylindre pendant la phase de combustion pour l'expérience n° 1. On peut voir que la courbe simulée a une forme analogue à la courbe expérimentale, le pic de pression, les valeurs de pression en début et en fin de cycle sont sensiblement les mêmes. Le léger écart entre les courbes peut-être dû au fait que le modèle de délai d'auto-inflammation tend à sous-estimer le retard à l'allumage expérimental obtenu ou bien à un décalage dû à la méconnaissance des paramètres environnementaux initiaux au cours de l'expérimentation ou des conditions aux limites prises par [2].

Le tableau 2-5 montre une comparaison des résultats de simulation avec résultats expérimentaux. On peut voir que le pic de pression est estimé avec une bonne précision par le modèle. Cependant l'apparition du pic de pression est d'environ six degrés plus tôt pour le résultat simulé, comme vu plus haut. La puissance est estimée avec une précision de 95%, ce qui est plus qu'acceptable. Cela prouve que malgré le léger écart observé sur la courbe de pression notre modèle peut être utilisé pour estimer les performances globales de ce moteur.

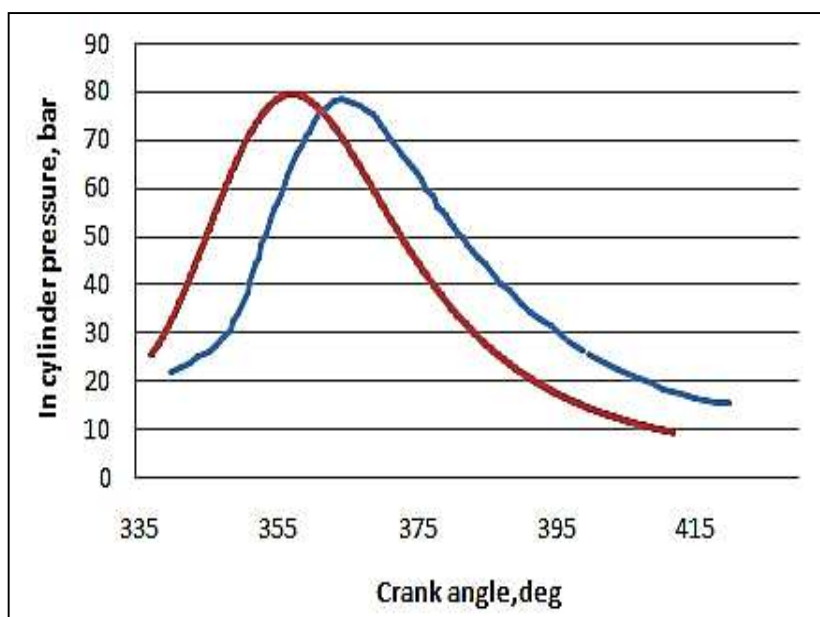


Figure 2-3 - Courbes expérimentale — et simulée — de la variation de pression dans le cylindre pour le premier essai

Tableau 2-5 - Comparaison des résultats pour la première expérimentation

	Résultats expérimentaux	Résultats simulés	Erreur relative
Délai d'auto inflammation (°V)	8,5	6,88	19,06%
Angle de début de la combustion avant le PMB (°V)	14,5	16,12	11,17%
Pression maximale des gaz dans le cylindre (bar)	78,7	79,412	0,90%
Position du vilebrequin correspondant à la pression maximale (°V)	5,8 après PMH	2,6 avant PMH	
Puissance (kW)	6	5,75	4,17 %

La deuxième expérimentation comporte une portée plus large, car elle permet d'évaluer le modèle suivant un spectre de paramètres plus grand. Cette expérimentation a consisté à déterminer les différents paramètres de performance moteur en mode transitoire, c.à.d. à différentes vitesses de rotation du vilebrequin. Le tableau 2-6 montre la comparaison des performances moteur obtenues expérimentalement et celle simulées à partir du présent modèle.

Comme observé pour le premier essai, le modèle prédit avec une bonne précision les puissances et pics de pression dans le cylindre du moteur indépendamment de la vitesse de rotation du vilebrequin.

La consommation spécifique est estimée avec une précision d'environ 18%, ce qui peut s'expliquer par le fait que le modèle ne prend pas en compte de manière précise, le processus d'injection de carburant, le débit de carburant, les pertes hydrauliques, la géométrie des injecteurs et leur nombre. Les paramètres tels que la durée de combustion et la distribution du mélange réactif sont supposés connus ou ajustés suivant les données expérimentales. Ces paramètres sont mieux pris en compte dans l'approche phénoménologique de la modélisation.

La valeur moyenne du délai auto ignition simulé correspond bien aux résultats expérimentaux contrairement au résultat obtenu au cours de la première expérimentation. Ceci peut être expliqué par le fait que les modèles de délai d'auto inflammation sont souvent dépendantes du dispositif expérimental dans lequel ils ont été déterminés[62], ce qui donne des résultats légèrement différents selon le contexte dans lequel ils sont utilisés. On peut voir sur la figure 2.4 que la courbe de pression des gaz dans les cylindres mieux adaptée par rapport à la première expérimentation. La motivation sur la sélection de notre modèle de délai d'auto inflammation a été discutée ci-dessus et la bonne précision de nos résultats est encourageante.

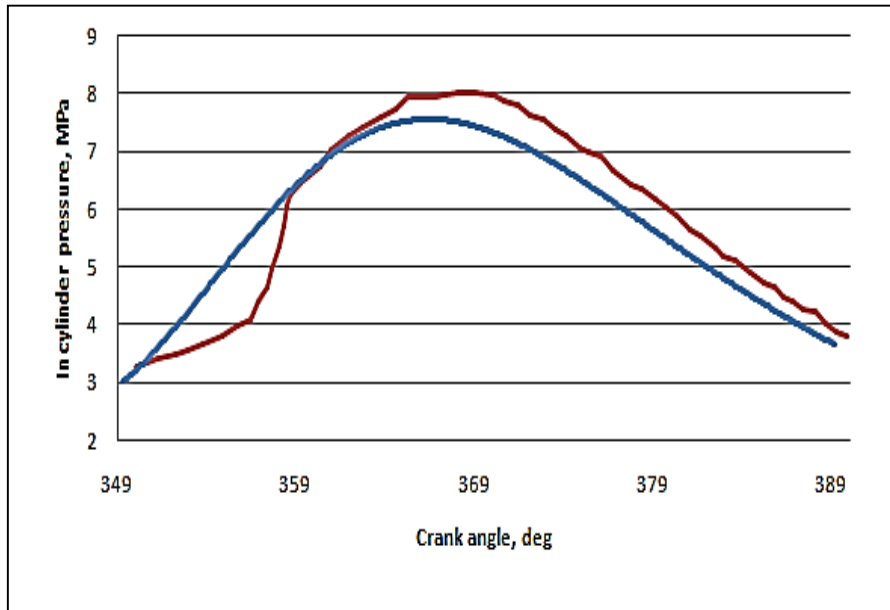


Figure 2-4 - Courbes expérimentale — et simulée — de la variation de pression dans le cylindre pour le second essai à 2000 tr/min

Ces résultats montrent que le modèle prédit assez bien les performances globales du moteur. Il est à noter que le modèle utilise beaucoup de coefficients expérimentaux tirés de [27, 96, 103, 104]. La sélection de la valeur de ces coefficients doit être adéquate afin d'améliorer le calibrage du modèle par rapport aux résultats expérimentaux.

La majorité des paramètres du modèle doivent être lissés afin d'obtenir une meilleure adéquation par rapport aux résultats expérimentaux.

Le modèle ayant été validé en le comparant à des données expérimentales pertinentes et ayant montré son efficacité pour la prévision des performances moteurs, il sera donc utilisé ci-dessous pour la combustion du Biodiesel. Ainsi il sera possible de juger de l'efficacité d'un modèle 0D thermodynamique à prédire les performances d'un moteur Diesel alimenté au Biodiesel.

Tableau 2-6 – Comparaison des résultats simulés à partir de la seconde expérimentation

Tr/min	Puissance			Pression maximale, MPa			Position du vilebrequin correspondant à la pression maximale °V après PMH		
	E	S	Erreur	E	S	Erreur	E	S	Erreur
1000	32,3	33,38	%3,34	8,04	7,89	%1,87	5,3	5,8	%9,43
1250	42,3	41,3	%2,36	8,6	7,92	%7,91	6,5	5,8	%10,77
1500	52,5	48,83	%6,99	7,95	7,85	%1,26	6,2	6	%3,23
1750	60,4	55,92	%7,42	8,1	7,71	%4,81	8,2	6,3	%23,17
2000	68,3	62,56	%8,40	8,04	7,56	%5,97	7,4	6,4	%13,51

Tr/min	Consommation spécifique, g/kWh			Délai d'auto inflammation, °V		
	E	S	Erreur	E	S	Erreur
1000	269,4	209,64	%22,18	8,15	7,27	%10,80
1250	265,104	211,84	%20,09	8,15	7,59	%6,87
1500	254,6	215,01	%15,55	8,15	8,09	%0,74
1750	267,9	219,03	%18,24	8,15	8,68	%6,50
2000	274,175	223,75	%18,39	8,15	9,32	%14,36

E – Experimentation, S – Simulation,

II.5.4. SIMULATION DES PERFORMANCES D'UN MOTEUR DIESEL ALIMENTÉ AU BIODIESEL

La dernière partie de ce chapitre porte sur la simulation d'un moteur Diesel à injection directe fonctionnant sous un Biodiesel à base d'huile de palme. Les propriétés du Biodiesel à base d'huile de palme sont tirées de [38] et sont présentées au tableau 2-7.

Tableau 2-7 - Spécification du carburant Biodiesel

No	Caractéristiques	Spécifications
1	Marque	Biodiesel
2	PCI	40 MJ/kg
3	Teneur en Carbone	76,5%
4	Teneur en hydrogène	12,3%
5	Teneur en oxygène	11,1%
6	Masse volumique (kg/m ³)	883
7	Viscosité à 40°C(Cst)	6,83
8	Indice de cétane	52

Les simulations ont été réalisées pour des paramètres du moteur constant correspondant à ceux de la première validation du modèle. Les résultats des simulations révèlent des pics de pression et de température dans le cylindre plus élevés pour le Biodiesel que pour le Diesel conventionnel (figure 2.5, figure 2.6). Ce résultat confirme ceux décrits dans les travaux de [6, 38, 105]. Ce phénomène peut s'expliquer par la forte teneur en oxygène des carburants Biodiesel, tendant à produire un taux de dégagement de chaleur plus élevé dans le cylindre et une plus grande vitesse de combustion.

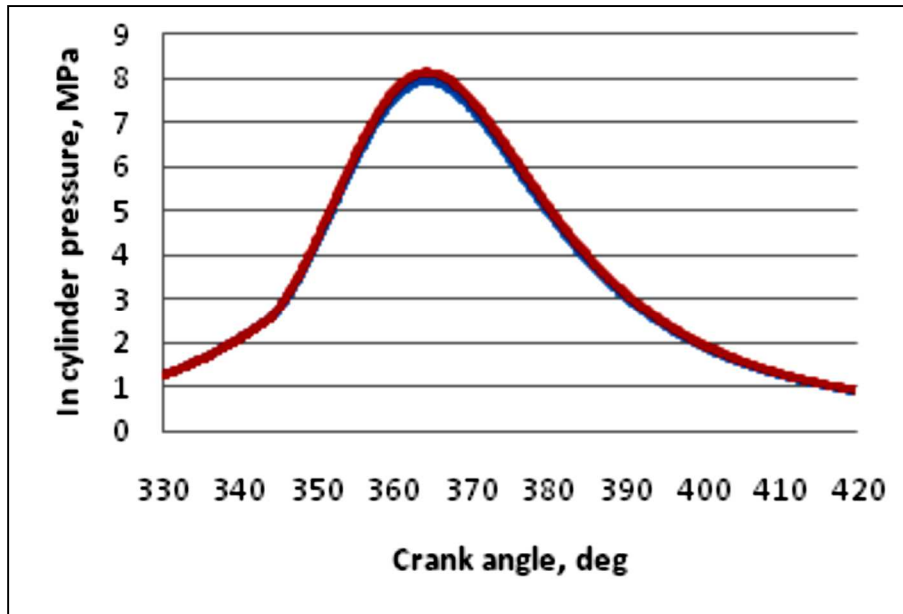


Figure 2-5 - Pression cylindre simulée pour le carburant Diesel — et le Biodiesel — à vitesse nominale

Le tableau 2.8 montre les résultats comparatifs des performances du moteur lors de son fonctionnement au Biodiesel et au carburant Diesel conventionnel. La valeur du délai d'auto inflammation pour les deux carburants est presque la même, ceci est dû à leurs indices de cétane qui sont sur la même valeur pour l'expérimentation ci-dessus décrite. Les puissances en sortie sont également similaires avec le Biodiesel donnant une valeur légèrement supérieure. La principale différence provient l'analyse de la consommation spécifique (Break Specific Fuel Consumption - BSFC); On peut voir que vu que le BSFC est 10% plus élevée pour le Biodiesel que pour le Diesel conventionnel. Ceci s'explique par la faible valeur du pouvoir calorifique du carburant Biodiesel. Cela signifie qu'à valeur égale de puissance désirée en sortie, le moteur alimenté en carburant Biodiesel doit consommer beaucoup plus de carburant que lorsqu'il est alimenté au Diesel conventionnel.

Globalement, le modèle 0D thermodynamique prédit bien les tendances observées dans différentes recherches antérieures, son développement devrait fournir un outil d'analyse du moteur de simulation, conception et de diagnostic assez fiable. Néanmoins, le modèle thermodynamique ci-dessus décrit présente les limitations suivantes :

- Le modèle ne simule pas les processus d'injection, pulvérisation et évaporation du combustible dans la chambre de combustion ;

- La cinétique de combustion est dépendante des données expérimentales, en effet la durée de combustion de diffusion doit être obtenue par lissage des paramètres expérimentaux ;
- Le modèle ne prédit pas les émissions polluantes du moteur ainsi que les différentes espèces émises lors de la combustion ;
- Certains paramètres d'état thermodynamique des gaz brûlés sont pris comme constants ce qui pourrait influencer sur la précision du modèle.

Les limitations ci-dessus présentées feront l'objet des travaux présentés dans la suite de la présente thèse.

Tableau 2-8 - Comparaison des performances moteurs simulées et expérimentales

	Biodiesel	Diesel
Délai d'auto inflammation (°V)	6,82	6,88
Pression maximale dans le cylindre (bar)	81,392	79,412
Rendement thermique	48,4%	48,0%
Puissance	5,748	5,747
Consommation spécifique (g/kWh)	185,73494	170,27237

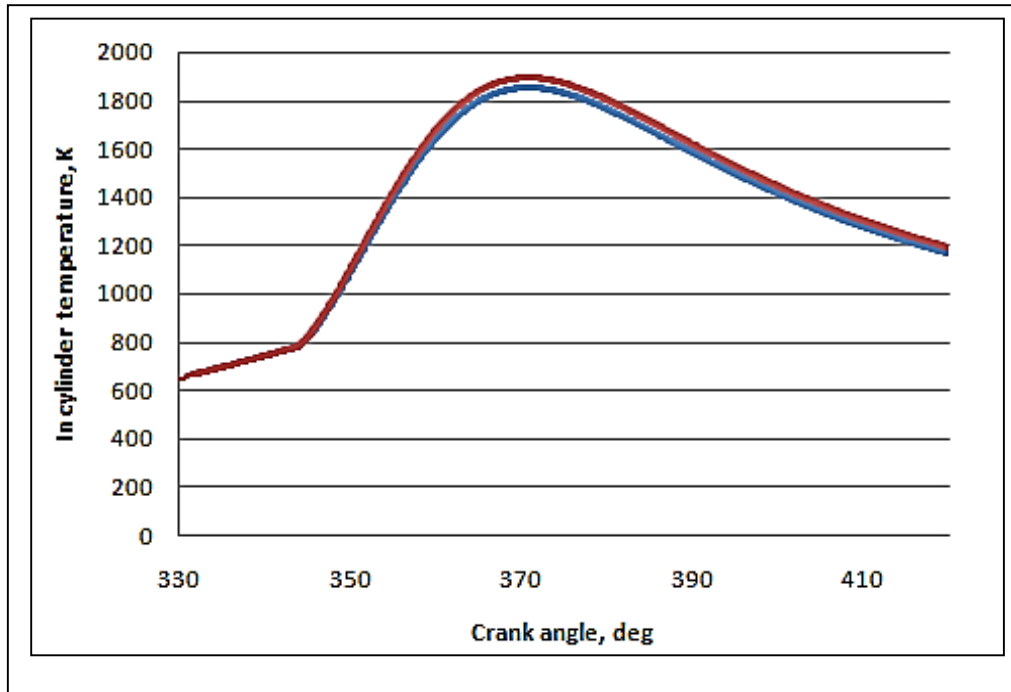


Figure 2-6 - Température cylindre simulée pour le carburant Diesel — et pour le Biodiesel — à vitesse nominale

CONCLUSION

Nous avons élaboré un modèle 0D thermodynamique classique basé sur la fonction de Wiebe et par la suite procédé à sa validation et la vérification de son applicabilité pour la simulation de la combustion des Biodiesels dans un moteur Diesel. Nous avons choisi une approche à double fonction de Wiebe afin de prendre en compte les phases de combustion de diffusion et de pré mélange spécifiques à la combustion Diesel. Le modèle a été validé à l'aide de résultats expérimentaux correspondant à la combustion Diesel conventionnelle. Les résultats de l'étude ont montré que, le modèle prédit de manière acceptable les paramètres expérimentaux globaux, tels que la pression, la température et la consommation spécifique. Les simulations du moteur fonctionnant au Biodiesel ont montré de bons résultats comparativement aux résultats obtenus expérimentalement lors de précédentes recherches sur la combustion des Biodiesel. La validation a montré certain écart lors du calcul du délai d'auto inflammation ainsi pour les courbes de pression et de température. D'autres limitations ont également été observées, concernant particulièrement le champ d'application du modèle 0D thermodynamique ; le modèle ne permet pas d'évaluer l'influence de l'injection sur la qualité de l'injection, les émissions ne peuvent être calculées de manière détaillée, le dégagement de chaleur nécessite un

lissage par rapport aux courbes expérimentales. De plus plusieurs hypothèses simplificatrices sont utilisées, notamment celles considérant le l'indice adiabatique et les coefficients de pertes comme constants, ce qui pourrait influencer la précision des résultats. Ces limitations forment donc l'ossature de la problématique qui sera traitée dans la deuxième partie de cette thèse, pour ce faire, le chapitre suivant aborde l'étude de sous modèles de combustion à base de la chimie tabulée qui permettront un calcul de l'évolution des paramètres thermodynamique plus détaillés ainsi que des émissions polluantes.

**PARTIE II :
MODELISATION 0D
PHENOMENOLOGIQUE DE LA
COMBUSTION DIESEL :
APPLICATION AU BIODIESEL**

CHAPITRE 3 :
ETUDE COMPARATIVE ET
CHOIX D'UN MODELE DE
COMBUSTION 0D
THERMODYNAMIQUE A BASE
DE CHIME TABULEE

III.1. INTRODUCTION

L'étude présentée dans ce chapitre porte sur le choix et la comparaison de modèles de combustion à partir à base de chimie tabulée. En effet, vues les limitations que présentent les modèles 0D thermodynamiques il est question ici d'équiper notre modèle phénoménologique d'un sous-modèle permettant le calcul des paramètres thermodynamiques des espèces en présence lors de la combustion Diesel. Pour ce faire nous décrivons dans un premier temps l'environnement d'implantation des deux modèles évalués en présentant un modèle de délai d'auto inflammation modifié et le choix d'un modèle de transfert thermique. Par la suite nous présentons la première approche en chimie tabulée qui est celle de Krieger et Borman qui est un modèle à une zone reposant sur la première loi de la thermodynamique et permettant de calculer l'énergie interne et le rapport de chaleur des produits de combustion d'un hydrocarbure en réaction avec l'air. La deuxième approche présentée est celle Ferguson qui elle est un modèle à deux zones (gaz brûlé et imbrûlé) qui permet de calculer l'énergie interne, l'enthalpie, l'entropie et la chaleur massique des produits de combustion au cours de la combustion Diesel suivant l'hypothèse d'équilibre chimique des réaction de dissociation des espèces. Les deux méthodes sont décrites de manière exhaustive afin que le lecteur puisse avoir une idée claire sur les différents algorithmes de calculs ainsi que les résultats qu'ils peuvent nous. En fin de chapitre nous faisons une comparaison des résultats obtenus pour la combustion du Diesel conventionnel et du Biodiesel par chacun des modèles tant sur le plan de la précision que celui de la vitesse de calcul. Un choix final est effectué en vue de son implantation dans le modèle final.

III.2. MODELES COMMUNS AUX DEUX SIMULATIONS

III.2.1. MODELE DE DELAI D'AUTO INFLAMMATION MODIFIE

Pour les deux modèles le délai d'auto inflammation est calculé à partir de la relation empirique de Hardenberg et Haze[106]

$$ID = \left[0.36 + 0.22 \overline{U}_p \right] \exp \left[E_a \cdot \left(\frac{1}{RT_{im} \varepsilon^{n_c - 1}} - \frac{1}{17190} \right) + \left(\frac{21.2}{P_{im} \varepsilon^{n_c} - 12.4} \right)^{0.63} \right]; \quad (3.1)$$

La valeur de l'énergie d'activation E_a dans cette relation est calculée par $E_a = \frac{618840}{CN + 25}$, cette corrélation est valable pour l'expérimentation au cours de laquelle elle a été établie mais a également montré une bonne applicabilité pour différents types de moteurs. Son applicabilité pour le Biodiesel a démontré certaines limites en termes de prédiction. Aghav et al[107] ont proposé une modification de la relation ci-dessus présentée pour les cas de correspondant à la combustion du Biodiesel, pour ce faire le numérateur joue donc le rôle de facteur de pondération de l'énergie d'activation et varie 618840 à 1310000 afin de caler le modèle par rapport au délai d'auto inflammation expérimental.

III.2.2. CHOIX D'UN MODELE DE TRANSFER THERMIQUE

Dans un moteur, une partie de la chaleur générée par la combustion est transmise aux parois du cylindre par convection forcée. Modélisation dans le processus de combustion du cylindre doit tenir compte de l'interaction avec la paroi du cylindre. Les transferts de rayonnement ne sont pas prises en compte dans cette étude, car il a été démontré qu'ils sont beaucoup moins au-dessous du transfert de gaz de combustion et la paroi[108]. Le transfert de chaleur est modélisée en utilisant l'approche proposée par Woschni [57, 103] où le coefficient de transfert de chaleur est calculée par

$$h_c = 3,26 \cdot D^{-0,2} p_{cyl}^{0,8} T^{-0,55} w^{0,8} ; \quad (3.2)$$

où D est l'alésage du cylindre, p_{cyl} est la pression dans le cylindre en kPa, T est la température dans le cylindre et w est la vitesse moyenne des gaz en m/s. Une description détaillée du modèle peut être trouvée dans [103] annexe A.

Le choix du modèle de Woschni a tout d'abord été motivé par sa popularité en tant que pionnier et surtout par le fait qu'elle décrit plus en détail les phénomènes de convection ayant lieu dans le moteur contrairement à ses modifications futures qui sont moins détaillés, bien que moins gourmand en mémoire [27, 109]. Il constitue une amélioration notable par rapport au modèle classique basé sur la méthode de Wiebe tel que présenté au chapitre 2

III.3. COMPARAISON DES MODELES DE COMBUSTION

Les deux modèles sont implémentés et couplés à un sous modèle de dégagement de chaleur à double fonction de Wiebe, correspondant à celui choisi au chapitre 2.

III.3.1. METHODE 1 – MODELE DE COMBUSTION DE KRIEGER ET BORMANN [47, 110]

Le modèle de Krieger et Bormann est un modèle à une zone basé sur la première loi de la thermodynamique, la conservation de masse et la loi des gaz parfaits. En effet, dus aux larges gradients de température dans les moteurs à combustion interne il est nécessaire de trouver un modèle décrivant l'état thermodynamique instantané des produits de combustion dans le cylindre. Le modèle de Krieger et Bormann calcule les variations de l'énergie interne dans le cylindre à l'aide de coefficients correctifs correspondant à la variation de température par rapport à une température de référence. A travers une série de dérivation, le rapport de chaleur spécifique est ainsi déterminé en fonction de la température à l'aide de polynômes lissés à partir de données tabulées expérimentales. Le schéma du modèle est présenté à la figure 3.1.

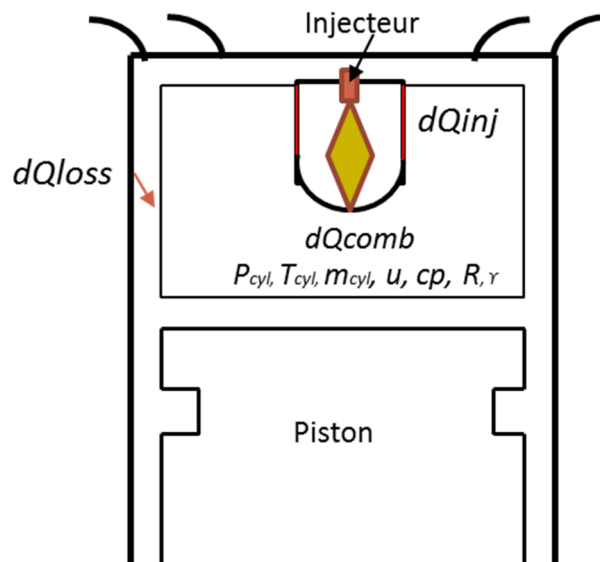


Figure 3-1 – Schéma du modèle de combustion à une zone de Krieger et Bormann

La première loi de la thermodynamique induit la relation suivante[10] liant la pression, le volume ainsi que la quantité d'énergie dans le cylindre

$$\frac{dQ_{inj} - dQ_{loss}}{d\theta} = \frac{\gamma}{\gamma-1} P \frac{dV}{d\theta} + \frac{1}{\gamma-1} V \frac{dP}{d\theta} ; \quad (3.3)$$

L'énergie interne des produits de combustion à l'équilibre pour la réaction entre un hydrocarbure de formule C_nH_{2n} et l'air peut être calculée par

$$u = \frac{A-B}{\phi + u_{corr}} ; \quad (3.4)$$

Les coefficients A et B sont déterminés par lissage des données expérimentales en fonction de la température et se calculent par

$$A = a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4 + a_5 T^5 ; \quad (3.5)$$

$$B = b_0 + b_1 T + b_2 T^2 + b_3 T^3 + b_4 T^4 ; \quad (3.6)$$

$u_{corr} = c_u \exp(D_\phi + E_\phi + F_{PT\phi})$ est le facteur de correction de l'énergie interne pour lequel les différentes constantes intervenant dans son expression s'expriment en fonction de la richesse ϕ , de la pression et de la température de la manière suivante

$$D_\lambda = d_0 + d_1 \cdot \phi^{-1} + d_3 \phi^{-3} ; \quad (3.7)$$

$$E_\lambda = \frac{(e_0 + e_1 \phi^{-1} + e_3 \phi^{-3})}{T} ; \quad (3.8)$$

$$F_{PT\phi} = \left[f_0 + f_1 \phi^{-1} + f_3 \phi^{-3} + \frac{(f_4 + f_5 \phi^{-1})}{T} \right] \log(f_6 \cdot P) ; \quad (3.9)$$

A chaque pas de temps la constante des gaz doit être calculée et s'exprime suivant l'expression

$$R = 0.287 + \frac{0.020}{\phi} + R_{corr} ; \quad (3.10)$$

où $R_{corr} = c_r \exp\left(r_0 \log \phi + \frac{r_1 + r_2 / T + r_3 \log(f_6 P)}{\phi}\right)$ est un facteur de correction de la constante des gaz prenant en compte l'état thermodynamique des gaz correspondant au pas de temps précédent.

Le rapport de chaleur spécifique est ainsi calculé comme :

$$\gamma = 1 + \frac{R}{c_v} ; \quad (3.11)$$

avec $c_v = \frac{\partial u}{\partial T}$.

Ainsi l'équation (3.11) est résolue à chaque pas de temps à partir de l'angle correspondant au début de l'auto inflammation jusqu'à la fin de la combustion. Il est nécessaire d'estimer une valeur initiale du rapport de chaleur massique, les valeurs initiales de température et de pression correspondent à celle en fin de compression. La variation du dégagement de chaleur est estimée à l'aide des doubles fonctions de Wiebe et les pertes à l'aide de la formulation de Woschni.

Les propriétés thermodynamiques des gaz brûlés telles que la température, la pression, l'énergie interne et le rapport de chaleur massique peuvent ainsi être calculées à chaque pas de temps correspondant à la période de combustion. L'algorithme de résolution correspondant à la méthode ci-dessus présentée est donné sur la figure suivante

Tableau 3-1 - Coefficients du modèle de Krieger et Borman

	0	1	2	3	4	5	6
<i>A</i>		0,692	3,917e-5	5,29e-8	-2,29e-11	2,7758e-17	
<i>B</i>	3049,33	-0,057	-9,5e-5	2,153e-8	-2e-12		
<i>c_u</i>	2,32584						
<i>c_r</i>	0,004186						
<i>D</i>	10,41066	7,85125		-3,71257			
<i>E</i>	-15001	-15838		9613			
<i>F</i>	-0,10329	-0,38656		0,154226	-14,763	118,27	14,503
<i>r</i>	-0,2977	11,98	-25442	-0,4354			

III.3.2. METHODE 2 – MODELE DE COMBUSTION DE FERGUSON ET OLIKARA AND BORMANN [111, 112]

Ce modèle est un modèle thermodynamique à deux zones; une zone de gaz brûlé et une zone gaz imbrulés. Les propriétés thermodynamiques des gaz de combustion sont calculées suivant les hypothèses d'équilibre chimique lors des réactions chimiques ayant cours 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 [113] ou JANAF[114]. La figure 3-2 présente une schématisation du modèle de combustion.

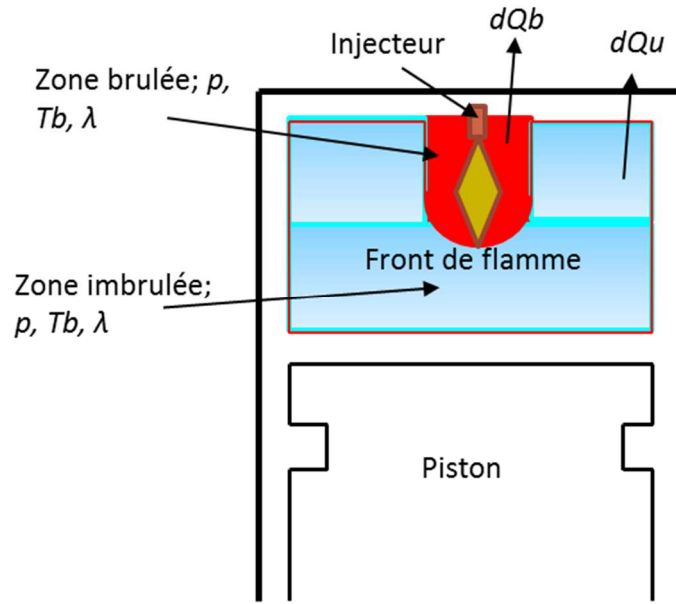


Figure 3-2 – Schématisation du modèle à deux zones de Ferguson et Olikara

Ce modèle suit les procédures de calcul suivantes :

III.3.2.1. CALCUL DES PROPRIETES DE L’AIR ET DES PRODUITS DE COMBUSTION

Les tables thermodynamiques Chemkin ou JANAF présentent les propriétés thermodynamiques des produits de combustion sous forme de fonctions polynomiales lissées par rapport à la température ; les produits de combustion incluent dans ces tables sont CO₂, H₂O, N₂, O₂, CO, H₂, H, O, OH, et NO. Les expressions sont de la forme

$$\frac{c_p}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 ; \quad (3.12)$$

$$\frac{h}{RT} = a_1 + \frac{a_2}{2} T + \frac{a_3}{4} T^2 + \frac{a_4}{4} T^3 + \frac{a_5}{5} T^4 + a_6 \frac{1}{T} ; \quad (3.13)$$

$$\frac{s}{R} = a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3}{2} T^2 + \frac{a_4}{3} T^3 + \frac{a_5}{4} T^4 + a_7 . \quad (3.14)$$

Les tables thermodynamiques correspondantes sont présentées en annexe.

III.3.2.2. CALCUL DES PROPRIETES DU CARBURANT

Les propriétés thermodynamiques des carburants peuvent également être calculées de manière similaire à celle des produits combustion, les équations y correspondantes sont les suivantes[10]

$$\frac{c_p}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 \frac{1}{T^2} ; \quad (3.15)$$

$$\frac{h}{RT} = a_1 + \frac{a_2}{2} T + \frac{a_3}{4} T^2 + \frac{a_4}{4} T^3 + \frac{a_5}{5} \frac{1}{T^2} + a_6 \frac{1}{T} ; \quad (3.16)$$

$$\frac{s}{R} = a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3}{2} T^2 + \frac{a_4}{3} T^3 + \frac{a_5}{4} \frac{1}{T^2} + a_7 ; \quad (3.17)$$

III.3.2.3. CALCUL DES PRODUITS DE COMBUSTION A L'EQUILIBRE

Si le mélange carburé n'est pas trop riche, ce qui est le cas du Diesel, on peut évaluer les produits de combustion sur la base de l'équilibre chimique en combustion à base de la méthode de Olikara et Borman mise en code sous Fortran par Ferguson.

Soit l'équation de combustion d'un hydrocarbure de formule $C_a H_b O_c N_d$ en prenant en compte les fractions molaires des produits de combustion issus des gaz résiduels y'_i , l'humidité relative ϖ , la richesse de l'air ϕ (notée ainsi conformément à Olikara) et la quantité de carburant par mole d'air $\varepsilon\phi$, avec $\varepsilon = 0,21 / (a + b/4 - c/2)$

$$\begin{aligned} & \frac{(1-y_r)}{1 + \varepsilon\phi + \varpi} \left[\varepsilon\phi \{ C_a H_b O_c N_d + f(H_2O) \} + 0,21 \cdot O_2 + 0,79 \cdot N_2 + \varpi H_2O \right] \\ & + y_r \left[\begin{array}{l} y'_1 CO_2 + y'_2 H_2O + y'_3 N_2 + y'_4 O_2 + y'_5 CO + y'_6 H_2 + y'_7 H + y'_8 O \\ + y'_9 OH + y'_{10} NO \end{array} \right] ; \quad (3.18) \\ & \rightarrow v_1 CO_2 + v_2 H_2O + v_3 N_2 + v_4 O_2 + v_5 CO + v_6 H_2 + v_7 H + v_8 O + v_9 OH + v_{10} NO \end{aligned}$$

y_r est la fraction de gaz résiduel et v_i représente pour chaque espèce issue de la combustion le nombre de mole divisé par le nombre de moles de mélange frais (imbrulés), la fraction massique des produits de combustion, f est la quantité de moles d'eau par mole de carburant.

On définit les variables suivantes par convenance de calcul

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{(1 - y_r)}{1 + \varepsilon\phi + \varpi} \\
 R_1 &= y_r (y'_1 + y'_5) \\
 R_2 &= y_r (2y'_2 + 2y'_6 + y'_7 + y'_9) \\
 R_3 &= y_r (2y'_1 + y'_2 + 2y'_4 + y'_5 + y'_8 + y'_9 + y'_{10}) \\
 R_4 &= y_r (2y'_3 + y'_{10}) \\
 T_{mole} &= \sum_{i=1}^{10} v_i
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

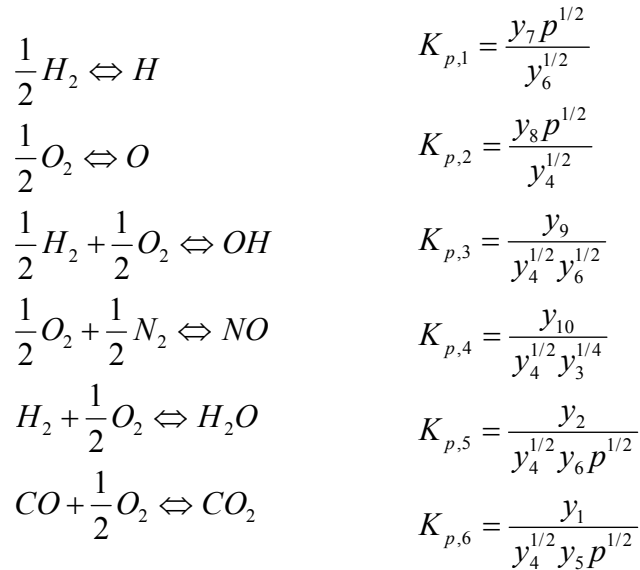
En posant la fraction molaire de chaque espèce comme étant égale $y_i = v_i / T_{mole}$ on a alors l'équilibre de la réaction de combustion donne pour chaque espèce :

$$\begin{aligned}
 [C] \quad N(y_1 + y_5) &= A[\varepsilon\phi a] + R_1 \\
 [H] \quad N(2y_2 + 2y_6 + y_7 + y_9) &= A[\varepsilon\phi(b + 2f) + 2\varpi] + R_2 \\
 [O] \quad N(2y_1 + y_2 + 2y_4 + y_5 + y_8 + y_9 + y_{10}) &= A[\varepsilon\phi(c + f) + 0,42 + \varpi] + R_3 \\
 [N] \quad N(2y_3 + y_{10}) &= A[\varepsilon\phi d + 1,58] + R_4
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

Sachant que $\sum_{i=1}^{10} y_i = 1$

On se retrouve avec un système de 5 équations à 11 inconnus, il nécessaire de trouver 6 équations supplémentaires susceptibles de résoudre le système d'équation. Pour cela on introduit six équations d'équilibre en phase gazeuse. Il s'agit des équations de dissociation de l'hydrogène, oxygène, eau, dioxyde de carbone et de formation du OH et NO à l'équilibre.

On a donc



où représente la pression à laquelle la réaction a lieu, en unité d'atmosphère. Les constantes d'équilibre sont tabulées en fonction de la température et retournées au logarithme décimal par

$$\log K_{p,i} = A \log \left(\frac{T}{1000} \right) + \frac{B}{T} + C + DT + ET^2 ; \quad (3.21)$$

Les coefficients A, B, C, D et E sont donnés au tableau 3-2.

Tableau 3-2 - Coefficients d'équilibre chimique du modèle de Olikara et Borman

	A	B	C	D	E
$K_{p,1}$	0,432168	$-0,112464 \times 10^5$	$0,267269 \times 10^1$	$-0,745744 \times 10^{-4}$	$0,242484 \times 10^{-8}$
$K_{p,2}$	0,310805	$-0,129540 \times 10^5$	$0,321779 \times 10^1$	$-0,738336 \times 10^{-4}$	$0,344645 \times 10^{-8}$
$K_{p,3}$	-0,141784	$-0,213308 \times 10^4$	0,853461	$0,355015 \times 10^{-4}$	$-0,310227 \times 10^{-8}$
$K_{p,4}$	$0,150879 \times 10^{-1}$	$-0,470959 \times 10^4$	0,646096	$0,272805 \times 10^{-5}$	$-0,154444 \times 10^{-8}$
$K_{p,5}$	-0,752364	$0,124210 \times 10^5$	$-0,260286 \times 10^1$	$0,259556 \times 10^{-3}$	$-0,162687 \times 10^{-7}$
$K_{p,6}$	$-0,415302 \times 10^{-2}$	$0,148627 \times 10^5$	$-0,475746 \times 10^1$	$0,124699 \times 10^{-3}$	$-0,900227 \times 10^{-8}$

Les constantes d'équilibre peuvent être réarrangées afin d'exprimer les fractions molaires de chaque espèce en fonction de y_3 , y_4 , y_5 et y_6 , soit celle des espèces N_2 , O_2 , CO et H_2 , on a donc

$$\begin{aligned} y_7 &= c_1 y_6^{1/2} & c_1 &= K_{p,1} / p^{1/2} \\ y_8 &= c_2 y_4^{1/2} & c_2 &= K_{p,2} / p^{1/2} \\ y_9 &= c_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} & c_3 &= K_{p,3} \\ y_{10} &= c_4 y_4^{1/2} y_3^{1/4} & c_4 &= K_{p,4} \\ y_2 &= c_5 y_4^{1/2} y_6 & c_5 &= K_{p,5} p^{1/2} \\ y_1 &= c_6 y_4^{1/2} y_5 & c_6 &= K_{p,6} p^{1/2} \end{aligned}$$

La première équation du système décrivant la balance des espèces en combustion est utilisée pour T , qui est ensuite remplacé dans les équations suivantes pour obtenir 3 nouvelles équations dépendantes des fractions y_3 , y_4 , y_5 et y_6 . Soit

$$\begin{cases} 2c_5 y_4^{1/2} y_6 + 2y_6 + c_1 y_6^{1/2} + c_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} - d_1 (c_6 y_4^{1/2} y_5 + y_5) = 0 \\ y_4^{1/2} (2c_6 y_5 + c_5 y_6 + c_2 + c_3 y_6^{1/2} + c_4 y_3^{1/2}) + 2y_4 + y_5 - d_2 (c_6 y_4^{1/2} y_5 + y_5) = 0 \\ 2y_3 + c_4 y_4^{1/2} y_3^{1/2} - d_3 (c_6 y_4^{1/2} y_5 + y_5) = 0 \end{cases}$$

avec :

$$\begin{aligned} d_1 &= \frac{A[\varepsilon\phi(b+2f)+2\varpi]+R_2}{A[\varepsilon\phi a]+R_1} \\ d_2 &= \frac{A[\varepsilon\phi(c+f)+0,42+\varpi]+R_3}{A[\varepsilon\phi a]+R_1} \\ d_3 &= \frac{A[\varepsilon\phi d+1,58]+R_4}{A[\varepsilon\phi a]+R_1} \end{aligned}$$

La quatrième équation du système ci-dessus est obtenue à partir de l'équation $\sum_{i=1}^{10} y_i = 1$,

qui donne en termes de y_3 , y_4 , y_5 et y_6 après développement

$$y_4^{1/2} (c_6 y_5 + c_5 y_6 + c_2 + c_4 y_3^{1/2}) + y_4^{1/2} (c_1 + c_3 y_4^{1/2}) + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 - 1 = 0$$

Les quatre équations ci-dessus décrites peuvent être résolues à l'aide de la méthode de Newton-Raphson en écrivant le système de quatre équations de la manière suivante

$$f_j(y_3, y_4, y_5, y_6) = 0; \quad j = 1, 2, 3, 4 ; \quad (3.22)$$

Et en posant

$$\Delta y_i = y_i^{k+1} - y_i^k, \quad i = 3, 4, 5, 6$$

Avec y_i^{k+1} et y_i^k correspondant aux valeurs de y_i pour l'itération suivante et la valeur actuelle respectivement. En développant l'équation (13) en série de Taylor et en négligeant les dérivées d'ordre supérieur ou égal à deux on peut obtenir

$$f_j + \frac{\partial f_j}{\partial y_3} \Delta y_3 + \frac{\partial f_j}{\partial y_4} \Delta y_4 + \frac{\partial f_j}{\partial y_5} \Delta y_5 + \frac{\partial f_j}{\partial y_6} \Delta y_6 \approx 0; \quad j = 1, 2, 3, 4 ; \quad (3.23)$$

Ou encore sous forme matricielle

$$[D][Y] = [F] ; \quad (3.24)$$

$$\text{Avec } [F] = -f_j, [Y] = \Delta y_j \text{ et } [D] = \frac{\partial f_j}{\partial y_i}$$

Les éléments de la matrice $[D]$ sont portés en annexe

Le calcul itératif résout l'équation (3.24) en utilisant les équations de constantes d'équilibre à chaque pas de calcul jusqu'à ce qu'un critère de convergence donné soit atteint.

L'équation (15) nécessitant une valeur initiale pour sa résolution, un modèle à basse température où seulement six espèces (CO_2 , H_2O , CO , H_2 , O_2 , N_2) sont considérées permet d'obtenir une bonne première estimation[115].

L'équation simplifiée devient alors

$$\frac{(1-y_r)}{1 + \varepsilon\phi + \varpi} \left[\varepsilon\phi \{ C_a H_b O_c N_d + f(\text{H}_2\text{O}) \} + 0,21 \cdot \text{O}_2 + 0,79 \cdot \text{N}_2 + \varpi \text{H}_2\text{O} \right] + y_r [y'_1 \text{CO}_2 + y'_2 \text{H}_2\text{O} + y'_3 \text{N}_2 + y'_4 \text{O}_2 + y'_5 \text{CO} + y'_6 \text{H}_2] \rightarrow \nu_1 \text{CO}_2 + \nu_2 \text{H}_2\text{O} + \nu_3 \text{N}_2 + \nu_4 \text{O}_2 + \nu_5 \text{CO} + \nu_6 \text{H}_2 ; \quad (3.25)$$

Dans le cas des moteurs Diesels pour lesquels $\phi < 1$, les espèces CO et H₂ peuvent être négligées, on a alors 4 équations à résoudre en considérant que les produits de combustion et ceux des gaz résiduels contiennent les mêmes espèces. Les équations de balance atomique donnent alors :

$$\begin{aligned}
 [C] \quad v_1 &= \frac{(1-y_r)}{1+\varepsilon\phi+\varpi} [\varepsilon\phi a] + y_r y'_1 \\
 [H] \quad 2v_2 &= \frac{(1-y_r)}{1+\varepsilon\phi+\varpi} [\varepsilon\phi(b+2f)+2\varpi] + 2y_r y'_2 \\
 [O] \quad 2v_1 + v_2 + 2v_4 &= \frac{(1-y_r)}{1+\varepsilon\phi+\varpi} [\varepsilon\phi(c+f)+0,42+\varpi] + y_r (2y'_1 + y'_2 + 2y'_4) \\
 [N] \quad 2v_3 &= \frac{(1-y_r)}{1+\varepsilon\phi+\varpi} [\varepsilon\phi d + 1,58] + y_r (2y'_3)
 \end{aligned}$$

La solution du système d'équation est donc pour la condition initiale est donc

$$\begin{aligned}
 v_1 &= \frac{(1-y_r)}{1+\varepsilon\phi+\varpi} [\varepsilon\phi a] + y_r y'_1 \\
 v_2 &= \frac{(1-y_r)}{1+\varepsilon\phi+\varpi} [\varepsilon\phi(b+2f)+2\varpi] + 2y_r y'_2 \\
 v_3 &= \frac{(1-y_r)}{1+\varepsilon\phi+\varpi} [\varepsilon\phi d + 1,58] + 2y_r y'_3 \quad ; \\
 v_4 &= \frac{(1-y_r)}{1+\varepsilon\phi+\varpi} [0,21(1-\phi)] + y_r y'_4 \\
 v_5 &= 0 \\
 v_6 &= 0
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

III.3.2.4. CALCUL DES PARAMETRES THERMODYNAMIQUES DU MELANGE REACTIF A L'EQUILIBRE

Le calcul des paramètres thermodynamiques du mélange carburé se fait à chaque pas de temps en fonction des fractions molaires et des paramètres thermodynamiques spécifiques à chaque espèce issue des produits de combustion déterminés plus haut.

Ainsi l'enthalpie molaire du mélange à l'équilibre est calculée par

$$\bar{h} = \sum y_i \bar{h}_i + \bar{h}_c y_c, \text{ (kJ/kmol)}$$

Et l'enthalpie à l'équilibre est telle que

$$h = RT \bar{h} ;$$

son entropie molaire à l'équilibre

$$\bar{s} = (s_c - \ln y_c) y_c + \sum (s_i - \ln y_i) y_i, \quad \text{kJ/kmol K}$$

Et l'entropie à l'équilibre

$$s = R \left(-\ln(P/P_0) + \bar{s} \right) ;$$

Sa capacité calorifique molaire à l'équilibre

$$\bar{c}_p = c_{p,c} y_c + \sum c_{p,i} y_i ;$$

Et sa capacité calorifique à l'équilibre

$$c_p = R \bar{c}_p$$

Sa masse moléculaire à l'équilibre est telle que

$$M_{mole} = M_{mole-car} y_{car} + \sum M_i y_i$$

Le volume spécifique et l'énergie interne du mélange à l'équilibre sont tels que

$$u = h - RT$$

$$v = R \frac{T}{P}$$

III.3.2.5. EQUATIONS DIFFERENTIELLES DECRIVANT L'EVOLUTION DES PARAMETRES THERMODYNAMIQUES PAR RAPPORT A L'ANGLE BALAYE PAR LE VILEBREQUIN

La détermination des paramètres précédents avec l'hypothèse d'équilibre permettent par la suite d'évaluer les paramètres tels que la pression et la température en fonction des paramètres d'état à l'équilibre calculés plus haut.

Les trois équations suivantes permettent de lier l'énergie interne, le volume spécifique et l'entropie à la température et la pression en fonction de l'angle balayé par le vilebrequin (Buttsworth, 2002; Ferguson C.R, 2000).

$$\frac{du}{d\theta} = \left(c_p - \frac{pv}{T} \frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right) \frac{dT}{d\varphi} - \left(v \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} + \frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right) \right) \frac{dp}{d\varphi} ;$$

(3.27)

$$\frac{dv}{d\theta} = \frac{v}{T} \frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \frac{dT}{d\varphi} - \frac{v}{p} \frac{\partial \ln v}{\partial \ln p} \frac{dp}{d\varphi} ;$$

(3.28)

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

(3.29)

avec $\left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p = c_p .$

La variation de pression et de température (des gaz brulés et imbrulés) dans le cylindre se détermine suivant la relation suivante [110, 111](Buttsworth 2002; Ferguson C.R 2000)[110, 111].

$$\frac{dp}{d\varphi} = \frac{A + B + C}{D + E} ;$$

(3.30)

$$\frac{dT_b}{d\varphi} = \frac{-h \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) x^{1/2} T_b - T_w}{vmc_{pb}x} + \frac{v_b}{c_{pb}} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right) \left(\frac{dp}{d\varphi} \right) + \frac{h_{cu} - h_{cb}}{xc_{pb}} \left[\frac{dx}{d\varphi} - x - x^2 \frac{C}{\omega} \right];$$

(3.31)

$$\frac{dT_u}{d\varphi} = \frac{-h \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) x^{1/2} T_u - T_w}{vmc_{pu}x} + \frac{v_u}{c_{pu}} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right) \left(\frac{dp}{d\varphi} \right) + \frac{h_{cu} - h_{cb}}{xc_u} \left[\frac{dx}{d\varphi} - x - x^2 \frac{C}{\omega} \right];$$

(3.32)

avec

$$A = \frac{1}{m} \left(\frac{dV}{d\varphi} + \frac{VC_{blowby}}{\omega} \right); \quad (3.33)$$

$$B = h \frac{\left(\frac{dV}{d\varphi} + \frac{VC_{blowby}}{\omega} \right)}{\omega m} \left[\frac{v_b}{c_{pb}} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} x^{1/2} \frac{T_b - T_w}{T_b} + \frac{v_u}{c_{pu}} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} (1 - x^{1/2}) \frac{T_u - T_w}{T_u} \right]; \quad (3.34)$$

$$C = -v_b - v_u \frac{dx}{d\varphi} - v_b \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{h_{cu} - h_{cb}}{c_{pb} T_b} \left[\frac{dx}{d\varphi} - \frac{(x - x^2) C_{blowby}}{\omega} \right]; \quad (3.35)$$

$$D = x \left[\frac{v_b^2}{c_{pb} T_b} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + \frac{v_b}{P} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \right]; \quad (3.36)$$

$$E = 1 - x \left[\frac{v_u^2}{c_{pu} T_u} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + \frac{v_u}{p} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln p} \right]. \quad (3.37)$$

où h_{cb} et h_{cu} expriment coefficient de transfert thermique pour les zones brûlés et imbrûlés respectivement. x exprime la fraction de carburant brûlée, m la masse du mélange carburé, v exprime le volume spécifique, ω est la vitesse du moteur en rad/s, C_{blowby} est le coefficient prenant en compte les fuites de « blowby ».

Les équations non linéaires (3.27 - 3.37) sont résolues simultanément à l'aide d'une méthode Runge-Kutta explicite de quatrième ordre (Dormand-Prince) à partir de l'outil ode45 de Matlab.

III.4. RESULTATS ET DISCUSSION

III.4.1. PRECISION DES CALCULS

Dans le but de valider les deux modèles, ils ont été implémentés et comparés aux résultats expérimentaux de [104], dont les caractéristiques du moteur sont données plus haut au chapitre 2 et rappelées au tableau 3 – 3 .

En ce sens, deux tests ont été effectués sur les deux modèles ici implémentés, l'un pour la simulation de la combustion Diesel, le deuxième pour la simulation de la combustion du Biodiesel.

La méthode de Krieger et Borman a été implémentée en utilisant les caractéristiques physiques des carburants Diesel et Biodiesels issues de [104] et [116].

Pour la méthode de Ferguson et Olikara, il est nécessaire de renseigner les paramètres thermochimiques du combustible utilisé. Ces données ont été trouvées dans les tables thermodynamique des combustibles présentées dans [10] pour ce qui concerne le carburant Diesel, et concernant les paramètres du Biodiesel, nous avons utilisé les propriétés thermo-chimiques du butanoate de méthyle comme substitut au Biodiesel [113].

Pour une meilleure exploitation des résultats issues de l'expérimentation il était nécessaire de procéder au calcul de la pression moyenne indicative (imep) expérimentales qui n'était pas spécifiée dans les travaux de [104]. Pour ce faire, nous avons à l'aide de la courbe de pression expérimentale procéder à l'intégration de la surface en dessous du diagramme $P-V$ expérimental à l'aide de la méthode des trapèzes. Nous avons donc

$$imep = \int_{V_s}^{V_f} \frac{P dv}{V_d} = \sum_{i=1}^n \frac{(v_{i+1} - v_i)(P_i + P_{i+1})}{2} ; \quad (3.38)$$

Les simulations ont été effectuées pour une vitesse de rotation du vilebrequin correspondant à la vitesse nominale du moteur, les courbes expérimentales de pression ont été comparées aux courbes simulées pour les deux modèles (Figure 3.1, Figure 3.2, Figure 3.3., Figure 3.4).

Les durées de combustion sont de 72 et 87 degrés de rotation du vilebrequin pour le carburant Diesel et le Biodiesel respectivement.

Tableau 3-3 - Spécification du moteur d'essai

No	Particularité	Spécifications
1	Marque	Kirloskar Oil engine
2	Modèle	DAF 8
3	Puissance nominale (kW)	6
4	Vitesse nominale (tr/min)	1500
5	Nombre de cylindre	1
6	Alésage x course (mm)	95 x 110
7	Pression	17,5:1
8	Avance à l'injection	23°

Les courbes de pression obtenues à partir des deux modèles montrent que ceux-ci reproduisent bien la pression de cylindre pour les deux types de carburants dans la configuration de moteur donné. Les deux simulations présentent une diminution du pic de pression pour le Biodiesel, ce qui correspond bien aux observations antérieures sur la combustion des Biodiesels dans les moteurs [7, 36, 105, 117]. Une autre tendance observée au niveau des courbes de pression, est la sous-estimation de cette dernière au temps d'échappement, en particulier pour le Biodiesel, ceci pourrait s'expliquer par l'incertitude sur certains paramètres et conditions expérimentales. Les valeurs des paramètres calculés sont données au tableau 3, où sont présentés l'imep, la pression maximale, l'angle correspondant à la pression maximale et le délai d'auto inflammation. Nous avons calculé l'erreur relative moyenne de chacun des modèles pour les quatre paramètres présentés plus haut; il a été observé que le modèle de Krieger et Borman présente une erreur relative de 18% tandis que le modèle d'Olikara et Ferguson en présente une de 11%.

En plus, il est visible que le modèle de Krieger et Borman ne se limite qu'à la détermination de la variation du rapport de chaleur massique, tandis que celui de Ferguson et Olikara permet non seulement de pouvoir calculer les presque totalité des paramètres thermodynamiques des produits de combustion, mais aussi la fraction massique des espèces. Il est question dans la suite d'évaluer la vitesse de calcul de chacun des modèles en vue d'évaluer leur adéquation avec notre objectif de faible temps de calcul.

Tableau 3-4 - Comparaison des performances de combustion des moteurs simulées à l'aide des modèles de Krieger et Borman et de Ferguson et Olikara avec les données expérimentales

	Diesel			Biodiesel		
	Krieger et Borman	Olikara et Borman	Exper iment ation	Krieger et Borman	Olikara et Borman	Experi mentat ion
Pression maximale (MPa)	7,948	7,87	7,87	8,37	8,73	8,53
Pmi (MPa)	0,52	0,47	0,6	0,522	0,6	0,7
Angle d'apparition de la pression maximale (°V après le PMH)	4	3	5,8	3	3	5
Délai d'auto inflammation (°V)	8,69	8,69	8,5	4,37	4,37	4,3

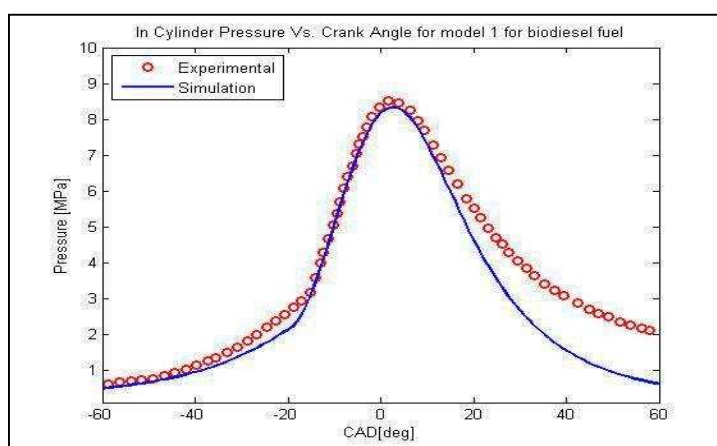


Figure 3-3 - Superposition des courbes de pression cylindre expérimentales et simulées grace à la méthode de Krieger et Borman pour le carburant Biodiesel

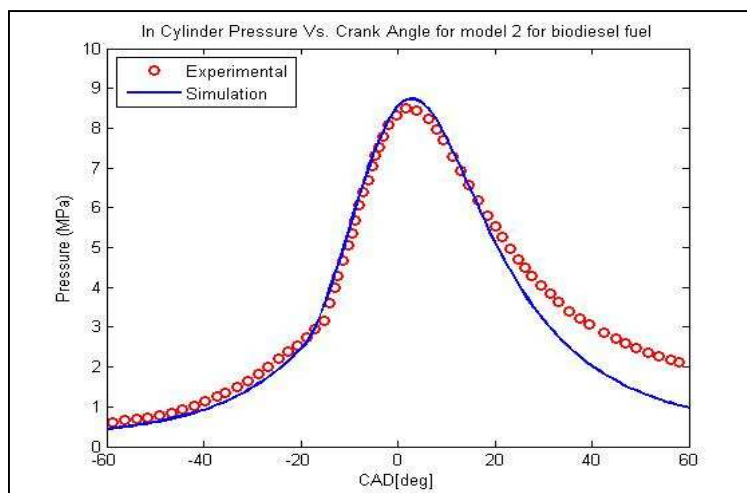


Figure 3-4 - Superposition des courbes de pression cylindre expérimentales et simulées grace à la méthode de Ferguson et Olikara pour le carburant Biodiesel

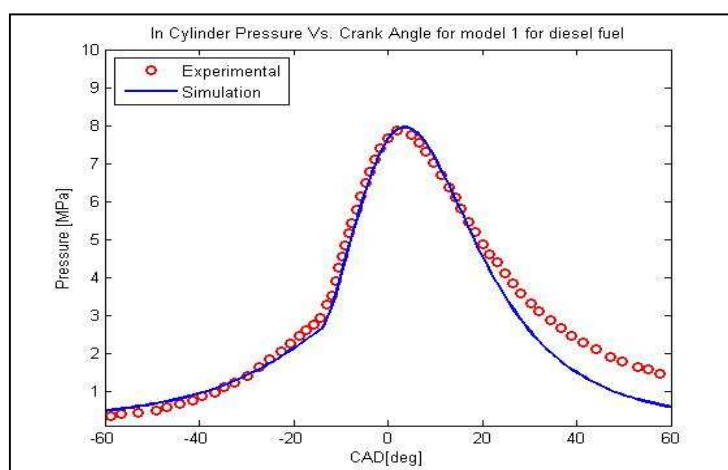


Figure 3-5 - Superposition des courbes de pression cylindre expérimentales et simulées grace à la méthode de Krieger et Borman pour le carburant Diesel

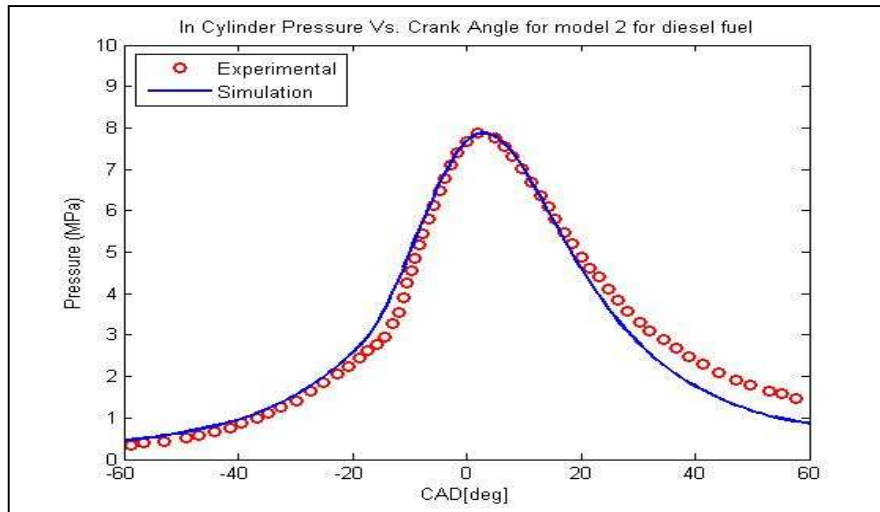


Figure 3-6 - Superposition des courbes de pression cylindre expérimentales et simulées grâce à la méthode de Ferguson et Olikara pour le carburant Diesel

III.4.2. VITESSE DE CALCUL

La deuxième évaluation comparative effectuée sur les deux modèles a consisté à déterminer la vitesse de calcul d'un cycle complet. Les calculs ont été effectués sur ordinateur à processeur double cœur Pentium ® de 2 GHz de fréquence chacun. Le modèle de Krieger et Borman a calculé en moyenne un cycle complet correspondant à la vitesse nominale en 75 fois le temps réel d'un cycle tandis que le modèle de Ferguson et Olikara correspond à environ 150 fois le temps d'un cycle réel. Il est visible donc de cette évaluation que les deux modèles ne peuvent calculer un cycle à vitesse proche du cycle réel, ce qui les place dans la catégorie des modèles d'usage pour l'optimisation et le dimensionnement des moteurs Diesel. La vitesse de calcul correspondant à l'implémentation du modèle de Ferguson et Olikara, bien qu'étant deux fois supérieure à celle du modèle de Krieger et Borman est assez faible comparativement à d'autres modèles 0D. Ceci nous a fait pencher la balance entre vitesse de calcul et précision des résultats de simulation sur le modèle de Ferguson et Olikara pour la poursuite de nos travaux.

CONCLUSION

Le but de la présente étude était de développer et mettre en œuvre deux modèles de simulation des moteurs Diesel alimentés au Biodiesel basés sur le principe de la chimie tabulée. Le premier modèle était celui de Krieger et Borman, tandis que le second était celui de Ferguson

et Olikara. Les deux modèles ont montré une bonne prévisibilité des performances du moteur, le second donnant une meilleure précision de calcul ainsi que plus de détails sur les paramètres thermodynamiques caractéristiques des gaz de combustion dans le cylindre. Le premier modèle testé a montré une plus grande vitesse de calcul comptant pour environ 75 fois le temps réel d'un cycle complet à régime nominal. Le second modèle a quant à lui présenté une vitesse de calcul d'environ le double du premier modèle.

Le choix final du sous modèle thermodynamique à implémenter dans notre modèle 0D phénoménologique s'est porté sur le modèle de Ferguson et Olikara, ceci dû au fait qu'en terme de précision des calculs et quantité d'informations susceptibles d'être obtenues, il est plus satisfaisant. Sa relative faible vitesse de calcul comparativement au modèle de Krieger et Borman n'est que marginale si on tient compte de l'applicabilité finale du modèle.

**CHAPITRE 4 : MODELE 0D
 PHENOMENOLOGIQUE :
VALIDATION ET APPLICATION
 AU NEEM METHYL ESTER**

IV.1. INTRODUCTION

L'étude présentée dans ce chapitre porte sur la modélisation 0D phénoménologique de la combustion Diesel. Pour cette modélisation on prend en compte la description détaillée du spray Diesel dans les conditions moteur, la modélisation des réactions chimiques impliquant les espèces chimiques intervenant dans la combustion Diesel ainsi que la formation des oxydes d'azote comme émissions polluantes. Notre approche 0D phénoménologique permettra une description détaillée de la formation du spray, de sa pulvérisation et de sa vitesse de combustion. Elle permettra en d'autres termes un couplage entre la phase de liquide et gazeuse caractéristique des cycles Diesel.

Le développement du modèle sera élaboré dans ce chapitre de la manière suivante : la première partie présentera les sous modèles de pulvérisation et d'évaporation du carburant suivant le modèle proposé par kuleshov. Elle sera suivie de la présentation du sous modèle d'émission d'oxydes d'azote appliqué au modèle. Nous présentons par la suite l'algorithme de couplage des différents sous modèles implantés dans le modèle, nommément les sous modèles de spray, de combustion, de transfert thermique, de délai d'auto inflammation ainsi que d'émission.

La validation du modèle ainsi que son applicabilité à la simulation de la combustion Diesel sous Biodiesel sont présentés dans ce chapitre tout d'abord à l'aide de la description du dispositif expérimental. Une présentation détaillée des procédures expérimentales utilisée est ensuite faite en présentant notamment la méthode d'obtention du Biodiesel à base de Neem.

Ce chapitre se terminera sur une application du modèle au carburant Biodiesel en mettant l'accent sur l'utilisation des carburants de substitution pour cette approche phénoménologique à base de chimie tabulée.

IV.2. MATERIELS ET METHODES

IV.2.1. EQUATIONS GOUVERNANTES DU MODELE

IV.2.1.1. MODELE DE PULVERISATION ET DE VAPORISATION DU CARBURANT

Cette partie du modèle est mise en place pour la détermination des paramètres caractérisant l'évaporation du carburant pulvérisé, le délai d'auto inflammation ainsi que la durée de combustion

IV.2.1.1.1. SOUS MODELE DE PULVERISATION

La méthode utilisée pour la modélisation des processus d'injection et de dynamique de pulvérisation est basée sur la théorie décrite par Lyshevsky[118] et perfectionnée par Razleytsev[11, 119, 120]. D'après cette théorie, le jet de combustible est constitué de deux phases, une phase dite initiale et une deuxième dite principale. Ces deux phases sont séparées par une phase dite transitoire caractérisée par sa longueur caractéristique l_b et par la durée mise par le jet pour l'atteindre cette longueur t_b . La longueur caractéristique de la phase transitoire ainsi que sa durée sont calculées suivant les formules semi empiriques suivante (4.1).

$$L_b = C_s d_n W_e^{0,25} M^{0,4} \rho_l^{-0,6} ; \quad (4.1)$$

$$t_b = \frac{l_b^2}{B_s} \quad (4.2)$$

où C_s est un coefficient de pondération, d_n est le diamètre de la buse de l'injecteur, W_e est le nombre de Webber qui dépend de la vitesse initiale du jet, M est un critère adimensionné [11] caractérisant le ratio entre les forces de tension surfacique et la viscosité, ρ_l est la masse volumique du carburant.

Le nombre de Webber se calcule suivant la relation suivante

$$W_e = U_0^2 \rho_f d_c / \sigma_f ; \quad (4.3)$$

Où U_0 est la vitesse initiale du jet de combustible qui s'exprime par

$$U_0 = \frac{24q_c RPM}{0.75 \rho_f \pi d_c^2 \varphi_{inj}} ; \quad (4.4)$$

où : q_c est le débit massique de carburant par cycle en Kg/cycle; RPM est la vitesse de rotation du vilebrequin en tour/min; ρ_f est la masse volumique du carburant en kg/m³; d_c est le diamètre des trous d'injecteur en mm; φ_{inj} est la durée de l'injection donnée en degré de rotation du vilebrequin.

Le critère M se calcule par

$$M = \mu_f^2 / (d_c \rho_f \sigma_f) ; \quad (4.5)$$

avec μ_f étant la viscosité dynamique du carburant à 323 K en Pa·s; σ_f étant le coefficient de tension surfacique du carburant à 323 K en N/m.

La longueur du jet liquide est alors calculée pour chaque phase suivant les formules suivantes

pour $0 < t < t_b$

$$S = A_s \vartheta^{0,35} \exp \left[-0.2 \cdot \left(\frac{t}{t_b} \right) \right]; \quad (4.6)$$

pour $t > t_b$

$$S = B_s^2 t^{0,5} . \quad (4.7)$$

A_s est une constante empirique et ϑ est un critère servant à la caractérisation des processus non stationnaires.

On peut assimiler ce modèle à celui de Hiroyasu[65, 66], où la phase de transition est comparable au break-up (ou phase de détachement du jet liquide en minuscule gouttelettes).

La variation de l'angle de cône du jet en fonction du temps est donnée comme suit

pour $0 < t < t_b$

$$\theta = 2 \arctan \left(\frac{E_s W_e^{0,35} M^{-0,07}}{\vartheta^{-0,12} \rho_l^{0,5} e^{0,07 \frac{t}{t_b}}} \right); \quad (4.8)$$

pour $t > t_b$

$$\theta = 2 \arctan \left(\frac{F_s W_e^{0,32} M^{-0,07}}{\vartheta^{-0,12} \rho_l^{0,5}} \right); \quad (4.9)$$

avec $E_s = 0.932 F_s W_e^{-0.03} \vartheta^{0.12}$ et F_s étant des constantes empiriques.

IV.2.1.1.2. SOUS MODELE D'EVAPORATION

Le carburant injecté se disperse en fines particules après le passage par la zone de transition, ces fines gouttelettes subissent une évaporation à une vitesse donnée. Razlejtsev[119, 120] ont suggéré la procédure suivante permettant de déterminer le taux d'évaporation des gouttelettes issues de l'injection du carburant pour un moteur Diesel.

Razlejtsev[119, 120] proposent la description de la vapeur du jet de carburant en deux zones; la première zone où les gouttelettes inhibées sont concentrées en forme de nuage derrière la surface de front de flamme, la seconde zone où les gouttelettes ont atteint le front de flamme et où l'évaporation revêt un caractère turbulent.

Le but du calcul dans ce sous modèle est la détermination des paramètres de finesse du carburant pulvérisé ainsi que ceux de la distribution des gouttelettes dans la vapeur de jet du combustible. Ces paramètres par la suite permettront de calculer la vitesse moyenne d'évaporation des gouttelettes pulvérisées et par conséquent la durée de combustion pour un cycle.

La finesse du jet pulvérisé est déterminée à l'aide du diamètre de Sauter¹, qui se calcule pour chaque zone suivant la formule suivante

$$d_{32} = 1,7d_n M^{0,0733} (We \cdot \rho)^{-0,266} ; \quad (4.10)$$

où $\rho = \frac{\rho_a}{\rho_l}$ est le rapport de masse volumique entre l'air sec et le carburant liquide.

L'évaporation des gouttelettes suit la loi des d^2 [76] pour laquelle l'évolution d'une gouttelette en pleine évaporation au cours du temps est donnée par

$$d_i^2 = d_0^2 - Kt ; \quad (4.11)$$

avec d_0 étant pris comme le diamètre de la gouttelette après la dispersion du jet en fines gouttelettes suivant l'équation (4.10) and d_i le diamètre de la gouttelette à l'instant d'observation. K est la constante d'évaporation de la zone qui est donnée par

$$K = 10^6 \cdot 4 N_u D_p p_s / \rho_l ; \quad (4.12)$$

avec Nu le nombre de Nusselt pour les processus de diffusion et D_p le coefficient de diffusion pour la vapeur de carburant et p_s la pression de vapeurs saturante du carburant.

Il est nécessaire de caractérisé le nombre de Nusselt et par conséquent la constante d'évaporation dans les deux zones de la vapeur de carburant.

La pression de vapeur de saturante se calcule selon la formule suivante en fonction de la température de la vapeur T_f

¹ Il s'agit du diamètre de la goutte dont le rapport volume/surface est le même que le rapport volume/surface calculé sur toutes les gouttes de l'échantillon. Très utilisé pour caractériser la distribution de taille des gouttelettes et pris comme diamètre moyen de ces dernières.

$$p_S = Ae^{-B/T_f} ; \quad (4.13)$$

Les coefficients A et B sont déterminés suivant deux points [119, 120]; pour $p_S = p_{atm}$ avec $T_f = T_{ebull}$ et pour $p_S = p_{cr}$ avec $T_f = T_{cr}$.

Le coefficient de diffusion des vapeurs de carburant peut être calculé en fonction de la température et de la pression suivant la formule suivante

$$D_p = D_{p0} \left(T_f / T_{atm} \right)^m \left(p_{atm} / p \right)^n ; \quad (4.14)$$

avec $D_{p0} = 0,031 \cdot 10^{-8} s$, qui est le coefficient de diffusion des carburants de type Diesel pour les conditions telles que $T_{atm} = 273 K$; $p_{atm} = 0,1 MPa$. Les coefficients m et n sont pris égaux à l'unité.

Le nombre de Nusselt et la température T_f varient également dépendamment des conditions d'évaporation du carburant et des processus non stationnaires.

Pour la première zone, les gouttelettes s'évaporent principalement dans des conditions de transfert thermique de conduction et de diffusion moléculaire et le nombre de Nusselt peut ainsi être pris égal 2. La température des vapeurs est de l'ordre de $T_f \approx (0,95...0,98) T_{cr}$.

Pour la seconde zone, du au caractère turbulent du jet de vapeur de carburant le nombre de Nusselt se calcule selon la formule suivante

$$N_u = 2 \left(1 + 0,3 Re^{1/2} Sc^{1/3} \right) ; \quad (4.15)$$

où Re exprime le nombre de Reynolds et Sc le nombre de Schmidt.

La température de la vapeur se calcule pour cette zone par,

$$T_f = (T_c + T_{cr}) / 2 ; \quad (4.16)$$

Avec T_c étant la température de la chambre en fin de compression avant le PMH

Il est ainsi possible la constante d'évaporation pour chaque zone de la vapeur de carburant. L'étude de la cinétique de combustion nous impose l'utilisation de la plus grande valeur de cette constante dans les deux zone afin d'évaluer la durée relative d'évaporation complète du jet de combustible dans la chambre de combustion.

soit $K = \max(K_1, K_2)$,

avec K_1, K_2 étant les constants d'évaporation pour chaque des zones.

La durée relative de combustion pour le cycle se calcule en seconde suivant la relation suivante

$$\tau_{ev} = A_z / (b_{it} \lambda^{0,6}) , \quad (4.17)$$

avec $b_{it} = K / d_{32}^2$ qui est la constante relative d'évaporation des gouttelettes.

Le coefficient A_z est un coefficient empirique de pondération servant au lissage de la courbe de pression par rapport à l'expérimental, sa valeur varie de 4 à 12 [120].

La durée de combustion du cycle est enfin convertie en degré de rotation du vilebrequin suivant la formule

$$\varphi_z = \varphi_{inj} - ID + 6RPM \tau_{ev} . \quad (4.18)$$

IV.2.1.2. MODELE D'EMISSION DES OXIDES NITRIQUES (NOX)

Les moteurs Diesel sont plus susceptibles de produire de fort d'émission d'oxydes nitriques, ceci à cause des forts gradients de température y tenant place et aussi à leur faible rendement thermique. Les oxydes d'azote (NOx) sont très dangereux pour l'environnement , ainsi plusieurs normes ont été mises en place afin de limiter leurs émissions dans les moteurs Diesel[29].

Etant donné, comme présenté au chapitre 1, que les quantités prédominantes de NOx sont influencées par la température émise au cours de la combustion, nous choisissons donc comme modèle d'émission le modèle de NO thermique. Pour cela nous implémentons dans notre modèle le mécanisme étendu de Zeldovich [82, 103] qui est caractérisé par les réactions chimiques suivantes:

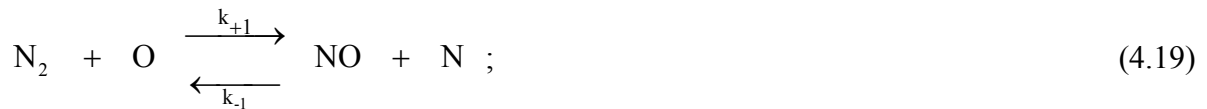


Tableau 4-1 - Constante d'équilibre pour les réactions du mécanisme de Zeldovich

Constante d'équilibre pour les réactions du mécanisme de Zeldovich			
Réaction	Constante d'équilibre Cm ³ /mol·s	Température de validité, K	Erreur absolue ou relative (%)
(1) O+N ₂ → NO+N	7,16·10 ¹³ exp[-38000/T]	2000 – 5000	2
(-1) N+NO → N ₂ + O	1,6·10 ¹³	300 - 5000	±20% à 300 K
(2) N+O ₂ →NO+O	6,4·10 ⁹ exp[-3150/T]	300 – 3000	± 30% 300 – 1500 K
(-2) O+NO → O ₂ +N	1,5·10 ⁹ exp[-19500/T]	1000 - 3000	2 à 3000 K
(3) N+OH →NO+H	4,1·10 ¹³	300 – 2500	± 80 %
(-3) NO + H → N + OH	2,0·10 ¹⁴ exp[-23650/T]	2200 - 4500	2

Le taux de formation des oxydes d'azote est ensuite calculé sous la forme de l'équation différentielle non linéaire donnée ci-dessous

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{2C_1 \left[1 - \left(\frac{[NO]}{[NO]_e} \right) \right]}{1 + \left[\frac{[NO]}{[NO]_e} \right] C_2}; \quad (4.22)$$

où $C_1 = K_{f,1} [O]_e [N_2]_e$, et:

$$C_2 = \frac{C_1}{K_{r,2} [NO]_e [O]_e K_{r,3} [NO]_e [H]_e}; \quad (4.23)$$

[X] exprime la concentration de l'espèce X et [X]_e la concentration de cette même espèce X à l'équilibre.

L'équation 2.19 peut être simplifiée suivant l'hypothèse selon laquelle $\frac{[NO]}{[NO]_e} \ll 1$ dû à la grande dépendance à la température de la formation de NO [10, 62], ainsi l'équation (4.22) peut s'écrire comme

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2K_{f,1}[O]_e[N_2]_e ; \quad (4.24)$$

Cette simplification est effectivement attrayante par simplicité, mais il a été démontré que la perte en précision est conséquente en termes de prédiction des émissions de NO [30, 31].

Nous avons donc opté pour la résolution directe de l'équation 4.22. Celle-ci doit être résolue simultanément avec les équations (3.27 - 3.37).

IV.2.2. ALGORITHME D'IMPLEMENTATION DU MODELE ET COUPLAGE DES SOUS MODELES

Les sous modèles ci-dessus présentés doivent être couplés les uns aux autres pour pouvoir effectuer la simulation complète du cycle. L'algorithme présenté sur la figure décrit la procédure de calcul implémentée dans notre code de simulation.

La première étape de l'algorithme correspond aux paramètres d'entrée du calcul, en d'autres termes :

- les paramètres physiques et thermodynamiques du carburant injecté ;
- la durée et l'angle d'avance de l'injection ;
- Les paramètres du moteur
- Les paramètres environnementaux

La deuxième étape de l'algorithme correspond au calcul des caractéristiques du jet liquide et à la distribution des gouttelettes pulvérisées, ces paramètres serviront de données d'entrée à l'étape suivante qui décrit la cinétique de combustion du cycle. Il est utile de noter que la compression et l'expansion sont décrites ici suivant le même modèle cinétique et thermodynamique, pour ces deux temps les équations différentielles décrites seront simplifiées en tenant compte du fait qu'en compression seuls les gaz imbrulés interviennent, et en expansion seul les gaz brulés interviennent. Le dégagement de chaleur n'intervenant pas dans ces deux temps le terme X décrivant la fraction de carburant brulé est donc nul. Le calcul du dégagement, décrivant la fraction de carburant de brulé à chaque pas est accomplie à l'aide d'une double fonction de Wiebe telle que décrite au chapitre 2.

L'étape de calcul cinétique du cycle permet de déterminer les durées des différents temps du cycle ; ainsi le temps de compression est délimité par l'angle correspondant à la fin du cycle précédent et l'angle de combustion. L'angle de début de combustion est déterminé comme celui de l'avance à l'injection auquel délai d'auto inflammation est ajouté. La durée du temps de combustion est calculée à partir des constantes d'évaporation calculées.

Le calcul permettant de déterminer l'état thermodynamique des gaz dans la chambre de combustion se fait suivant une boucle qui est conditionnée par le pas de temps et les durées décrites plus haut.

Le couplage des sous modèles ainsi conçu, il est possible de calculer les performances moteur à chaque pas de temps dont la valeur est choisie au préalable.

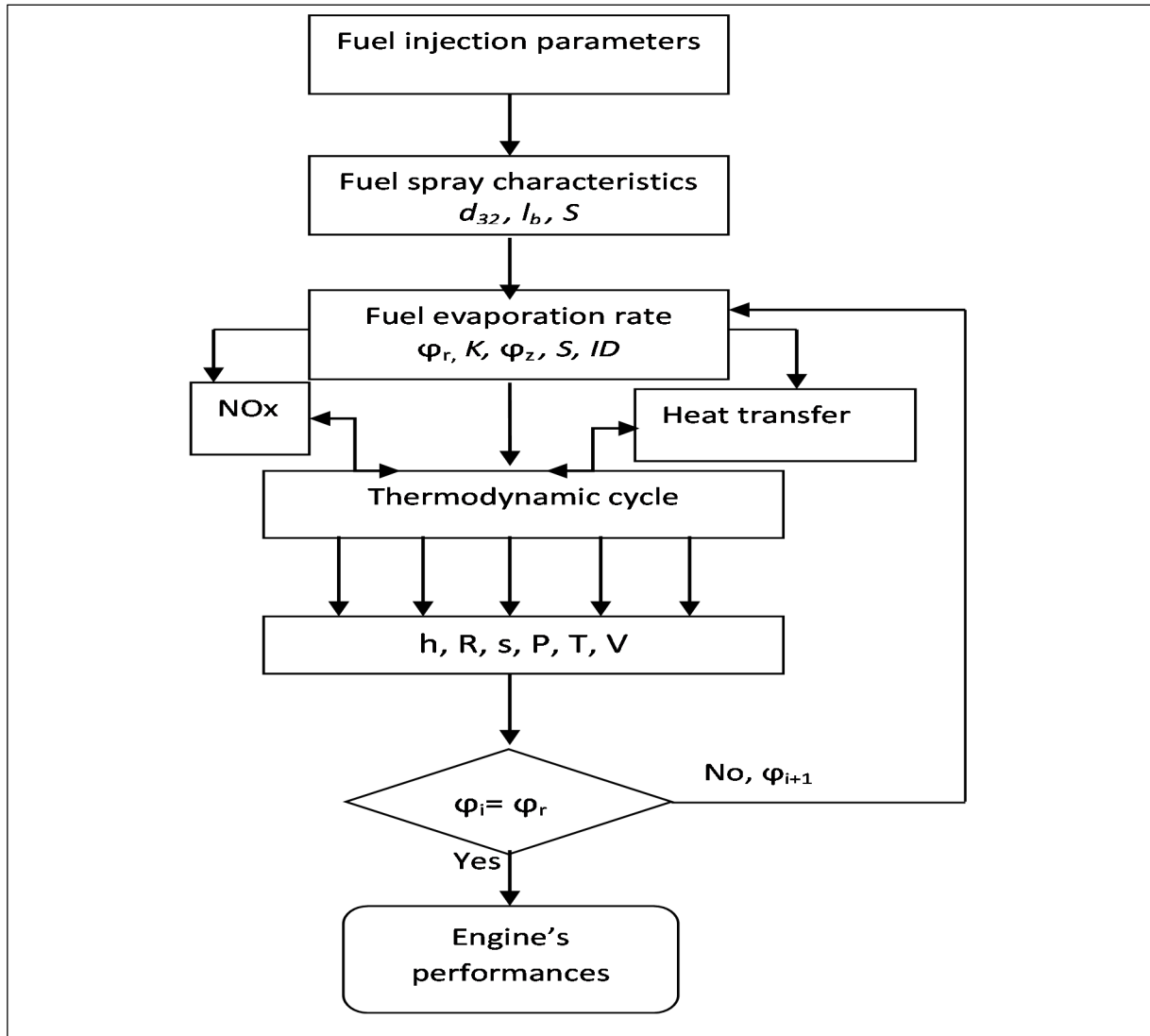


Figure 4-1 - Algorithme d'implémentation du modèle 0D phénoménologique

IV.3. DISPOSITIF ET EQUIPEMENTS EXPERIMENTAUX

Les travaux présentés dans les chapitres précédents ont permis une évaluation des sous modèles qui seront implantés dans notre modèle. Pour une meilleure appréciation de l'efficacité du modèle que nous mettons ici en œuvre et aussi par un souci de l'application de notre recherche à un cas local, nous avons mis sur pied une série d'expérimentations.

Les essais qui sont ici décrits portent sur trois volets :

- 1- Des essais moteurs pour l'évaluation du modèle sur un plan macroscopique des paramètres du moteur (puissance, NOx, en fonction du régime) ;
- 2- Des essais issus des paramètres calibrés du moteur étudié sur un logiciel de simulation Diesel Rk ;

- 3- La caractérisation du Biodiesel à base d'huile de Neem, et l'introduction de ses propriétés dans le code de calcul.

IV.3.1. DESCRIPTION ET INSTRUMENTATION

IV.3.1.1. DISPOSITIF EXPERIMENTAL

L'équipement expérimental utilisé pour les essais moteurs a été mis à disposition par le Centre de Formation des techniques armées (CFTA) d'Ekounou à Yaoundé au Cameroun.

Le dispositif expérimental est constitué de:

- un moteur Mercedes OM 352 ;
- Un banc d'injection Bosch ;
- un testeur Diesel Souriau 1549 pour les mesures et calage des systèmes d'injection ;
- Un pistolet stroboscopique branché au testeur Diesel Souriau pour le calage de l'avance à l'injection et la lecture de la vitesse de rotation.

Le moteur est monté sur un banc dynamométrique fixe couplé à un alternateur et une batterie assurant son démarrage. Le testeur Diesel est monté sur la batterie qui assure son alimentation en énergie tout au long de l'essai. Le pistolet stroboscopique est branché au testeur Diesel pour permettre une lecture en temps réelle de la vitesse de rotation de l'arbre moteur.

Les gaz d'échappement sont évacués par un conduit prévu à cet effet et disposé à l'arrière du moteur. La figure représente un plan schématique du dispositif expérimental mis en place pour les essais moteurs.

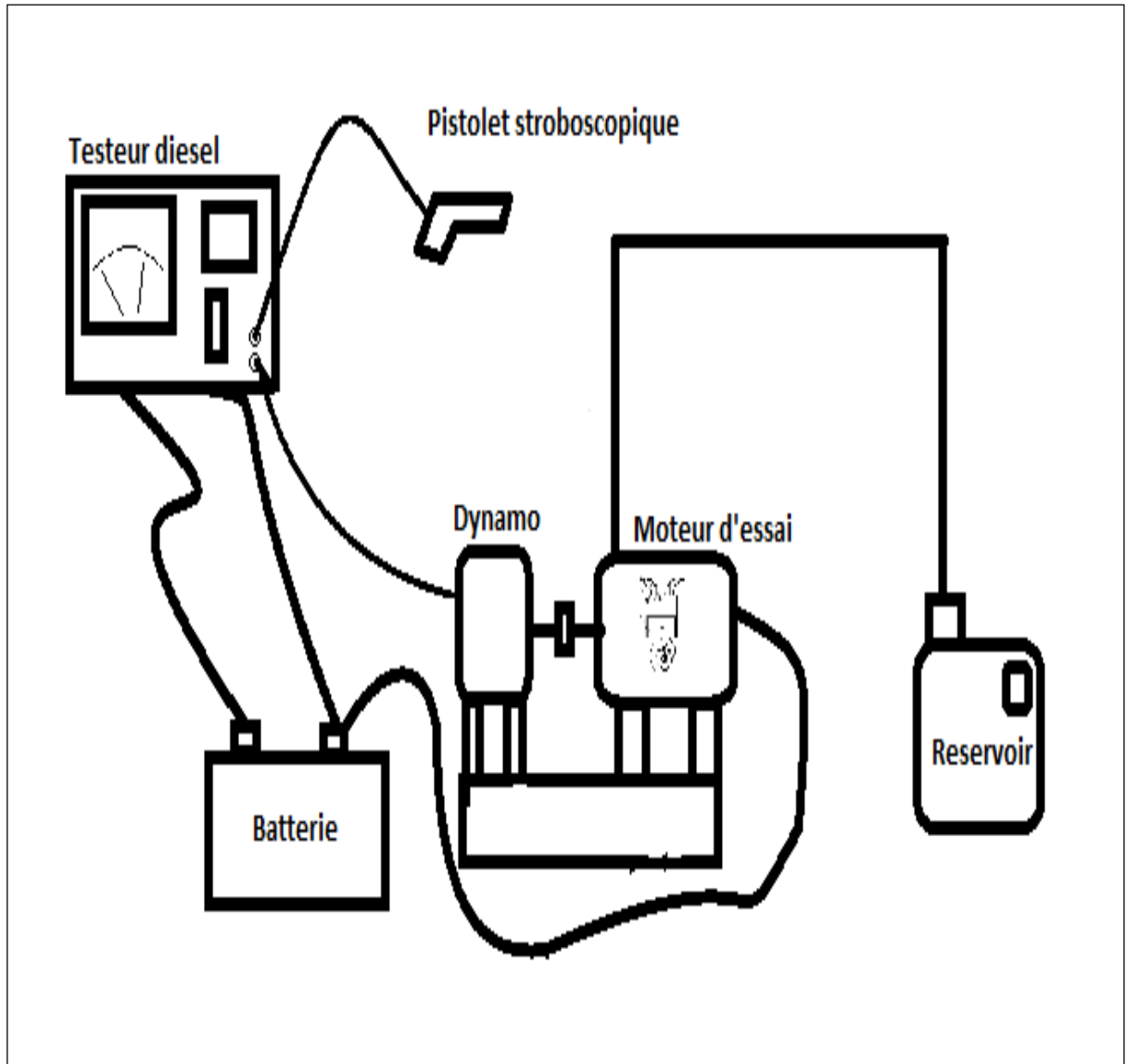


Figure 4-2 - Structure et équipements du banc d'essai de recherche.

Moteur expérimental

Le moteur expérimental utilisé est un moteur de marque Mercedes à six cylindres à injection directe monté sur un banc dynamométrique. Ce type de moteur est principalement utilisé pour les camions et autres gros porteurs. Ses principales caractéristiques sont reportées au tableau 4.1.



Figure 4-3 - Vue du moteur expérimental

Tableau 4-2 - Paramètre du modèle expérimental utilisé pour la validation du modèle 0D phénoménologique

Données	Valeurs
Mercedes	OM 352
Système de combustion	Quatre temps à injection directe
Nombre de cylindre et leur disposition	6, en ligne verticale
Alésage	97 mm
Course	128 mm
Cylindrée totale	5657 cm ²
Rapport de Compression	17:1
Puissance nominale	96 kW (130 hp) @ 2800 tr/min
Couple nominal	363 N·m (267 ft·lbf) @ 1700 tr/min
Vitesse au ralenti	700 tr/min
Avance à l'injection	18 degré avant le PMH

Banc d'essai d'injecteur Bosch

Le banc d'injection permet le calibrage des injecteurs avant leur utilisation sur le moteur. Il permet notamment d'effectuer des mesures de débit et de pression d'injection.

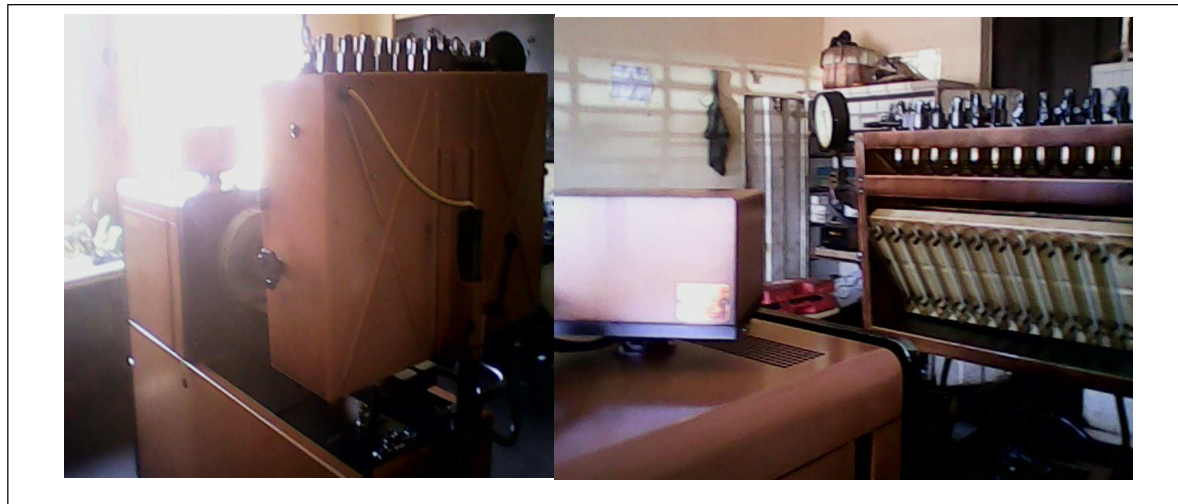


Figure 4-4 - Vue du banc d'injection expérimental

Testeur Diesel Souriau



Figure 4-5 - testeur Diesel Souriau

Pistolet stroboscopique



Figure 4-6 - Pistolet stroboscopique

IV.3.1.2. PROCEDURE EXPERIMENTALE ET TRAITEMENT DES DONNES

Le calibrage de la pression d'injection a été effectué à l'aide du banc d'injection Bosch. Il était nécessaire de garder une pression d'injection sensiblement égale à celle en sortie usine afin de minimiser les écarts dus à une variation ce paramètre d'entrée.

Le calage de l'angle d'avance à l'injection a été effectué grâce au pistolet stroboscopique connecté au testeur Diesel. Cette avance à l'injection a été gardée à 18 degrés avant le PMH pour tous les essais. Le testeur diesel permet de contrôler les paramètres du système d'injection et permet de lire avec précision les paramètres suivants :

- La vitesse de rotation ;
- L'angle de came ;
- L'avance à l'injection ;

Chaque valeur mesurée peut être mise en mémoire aussi longtemps que nécessaire à l'aide du commutateur à curseur du pistolet stroboscopique.

Les données de couple ont été relevées pour des valeurs différentes de vitesse de rotation du vilebrequin à l'aide du dynamomètre. La puissance délivrée par le moteur est déduite du couple mesuré et de la vitesse de rotation du vilebrequin mesuré. La vitesse de rotation a été

variée de 1000 à 2800 tr/min. les valeurs présentées sur les tableaux des résultats sont moyennées car la variation de régime pour le banc moteur ici utilisé est manuelle.

Le tableau 4 - 3 présente la matrice d'expérience ici utilisée

Tableau 4-3 – Matrice d'expérience

Nº essais	Vitesse de rotation vilebrequin (tr/min)	Angle d'avance (°V)	Couple mesuré (N·m)	Puissance calculée (kW)
1	1000	18	C ₁	$2\pi \cdot RPM \cdot C_1$
2	1400	- -	C ₁	$2\pi \cdot RPM \cdot C_2$
4	1600	- -	C ₁	$2\pi \cdot RPM \cdot C_3$
5	2000	- -	C ₁	$2\pi \cdot RPM \cdot C_4$
6	2800	- -	C ₁	$2\pi \cdot RPM \cdot C_5$

IV.3.2. ESSAIS NUMERIQUES A PARTIR DU LOGICIEL DIESEL RK

Notre modèle ne se limitant pas à la détermination des paramètres macroscopiques des performances moteurs, il était nécessaire de le valider sur le plan de sa précision des calculs des paramètres thermodynamiques inhérents au cycle Diesel. Le banc moteur mis à disposition par le CFTA ne permettant pas d'effectuer une lecture en temps réelle de la température et de la pression, ainsi que de l'évolution des paramètres d'injection et de pulvérisation du carburant dans la chambre de combustion, nous avons opté pour une deuxième série de validation couplée à celle sur banc moteur à l'aide du logiciel Diesel – RK.

Les données calibrées du moteur utilisé lors des essais moteurs ont été fournies par le Professeur Kuleshov, créateur du logiciel Diesel – RK de l'Université d'Etat Technique de Moscou, Baumann.

Les données calibrées ont été utilisés comme données expérimentales pour l'étude des phénomènes thermodynamiques ayant cours à l'intérieur du cylindre. Nous avons donc été en mesure de tester la précision de notre modèle pour l'évaluation de paramètres tels que la pression cylindre, la température, la pénétration du jet de carburant et les émissions de NOx.

Les données obtenues à partir du logiciel ont été stockées dans les sous-routines Matlab® permettant le tracé des évolutions des paramètres moteurs. Ce qui nous a permis de faire ainsi une superposition des résultats de notre modèle avec les résultats calibrés du moteur expérimental.

Le logiciel de simulation thermodynamique de moteur DIESEL-RK est conçu pour la simulation et l'optimisation des processus de combustion des moteurs à combustion interne à deux ou quatre temps de tout type. Le programme peut être utilisé pour modéliser les moteurs à compression, à allumages commandé et à gaz.

Une vue de l'interface du logiciel est présentée à la figure suivante et un descriptif de son mode d'emploi est présenté en annexe.

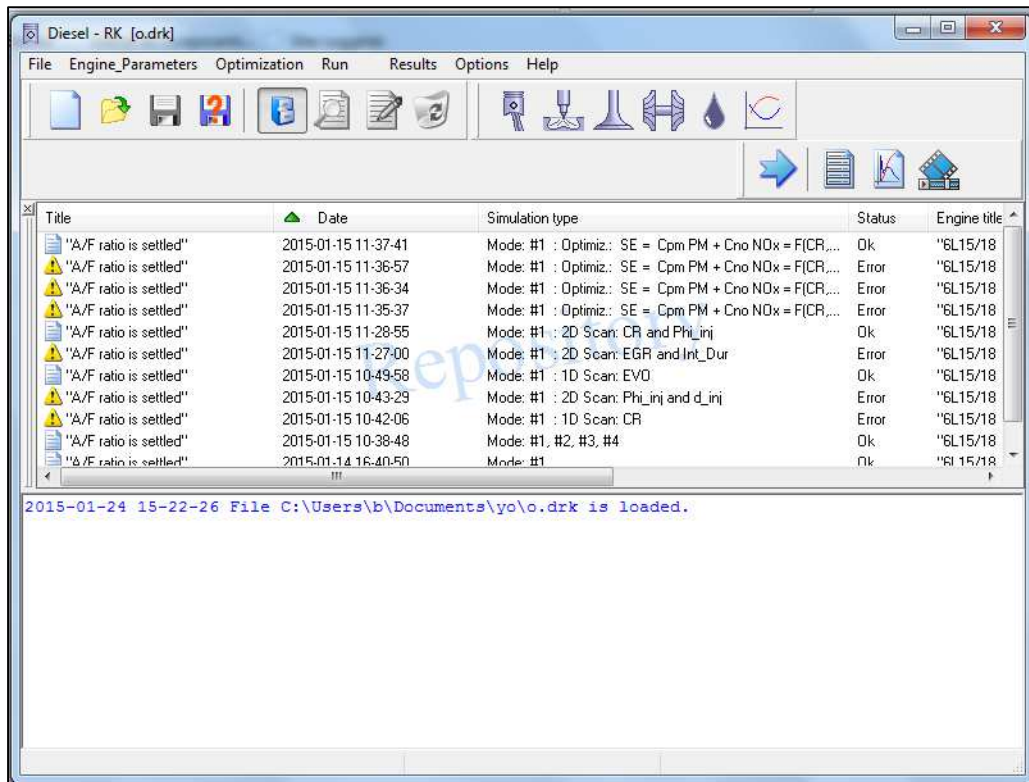


Figure 4-7 - Interface du logiciel Diesel - Rk

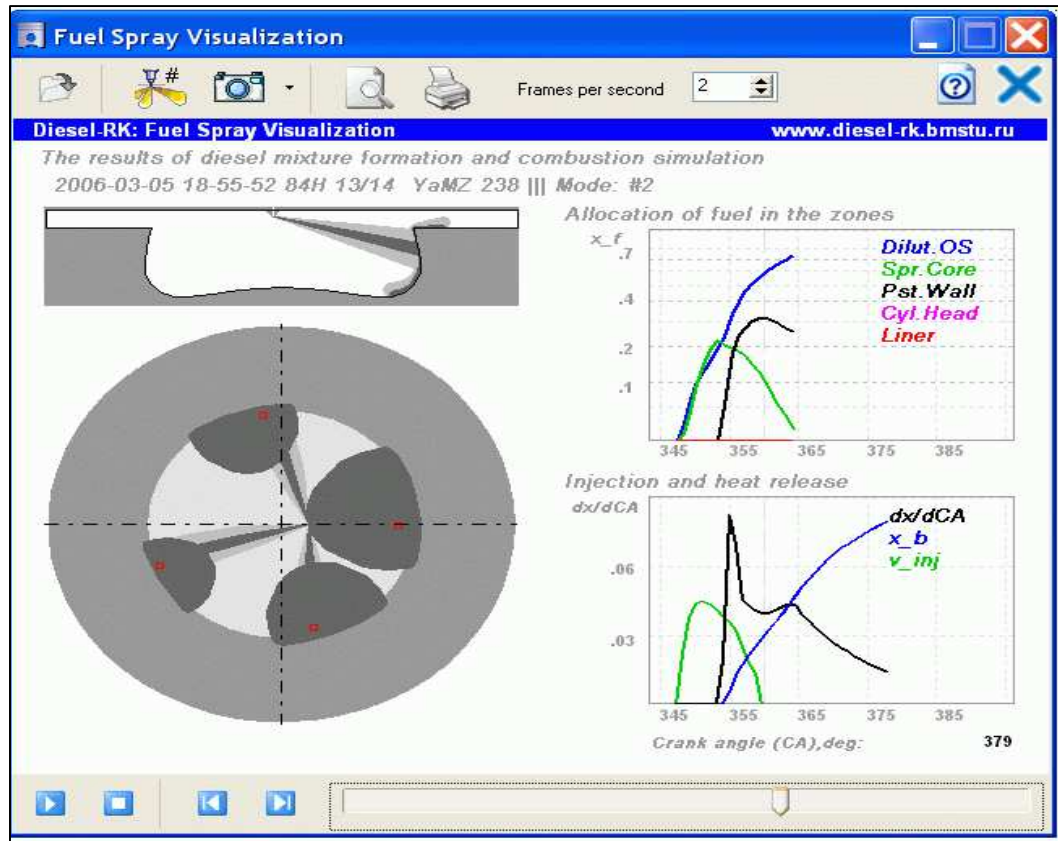


Figure 4-8 - Interface « visualisation » du logiciel Diesel-Rk

IV.3.3 – CARACTERISTIQUES DES CARBURANTS UTILISES

Les carburants utilisés pour cette étude étaient le gazole classique (Diesel N ° 2) et Biodiesel à base d'esther de méthyl. Les propriétés des carburants sont présentées dans au tableau 2.2.

Le carburant Diesel a été fourni par le CFTA et a été utilisé uniquement pour la validation du modèle. La combustion du Biodiesel à base de Neem n'a pas été effectuée expérimentalement, seules les caractéristiques de ce carburant ont été utilisées dans le modèle présent comme données d'entrée. La caractérisation et l'évaluation des performances du Biodiesel à base Neem ont effectuées au sein du Groupement Camerounais de Combustion avec l'appui de la société HYDRAC(Ayissi et al.) [121]. Bien que ne faisant pas partie des résultats obtenus au cours de cette thèse, nous présentons plus bas les méthodes de caractérisation et d'obtention du biodiesel à base de Neem pour une meilleure compréhension de leur importance dans le modèle.

IV.3.3.1. DESCRIPTION DE LA METHODOLOGIE DE CARACTERISATION DU BIODIESEL DE NEEM

IV.3.3.1.1. OBTENTION DU BIODIESEL

Le Biodiesel à base de Neem est issu d'une plante dont le nom scientifique est *Azadirachta indica* appelée aussi Margousier de la famille des méliacées. Le Neem est produit par un arbre pouvant atteindre 30 m de haut. Le Neem pousse principalement dans la région de l'Extrême-Nord Cameroun mais on peut aussi le trouver dans le littoral. L'utilisation principale de son huile est comme répulsif pour insecte et antidermite. L'huile de Neem n'est pas comestible, son utilisation comme Biodiesel n'est donc pas préjudiciable à la disponibilité alimentaire du pays.

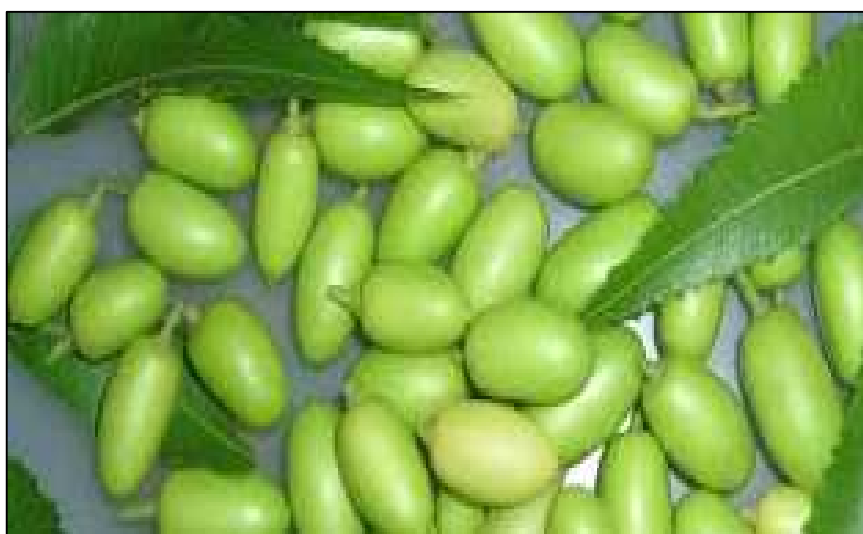


Figure 4-9 - graines de Neem

Le Biodiesel est obtenu par transestérification par le méthanol CH_3OH de l'huile de Neem avec comme catalyseur l'hydroxyde de potassium (KOH). La quantité de KOH utilisée correspondait à 20 g pour 200 g d'huile de Neem pure. La réaction de transestérification s'est effectuée à 60°C .

Tableau 4-4 – Comparaison des propriétés du gazole à celles de l’ester de méthyl de Neem(Ayissi et al.) [121]

Propriétés		Diesel N°2	EMN
Composition	C	0,87	0,771
	H	0,126	0,118
	O	0,004	0,109
Teneur en soufre (%)		0,005	0
Masse volumique (kg/m3) à 323K		830	879
Indice de cétane		48	51,3
Viscosité dynamique à 323 K (Pa·s)		3×10^{-3}	463×10^{-5}
PCI, MJ/kg		42,5	39,7

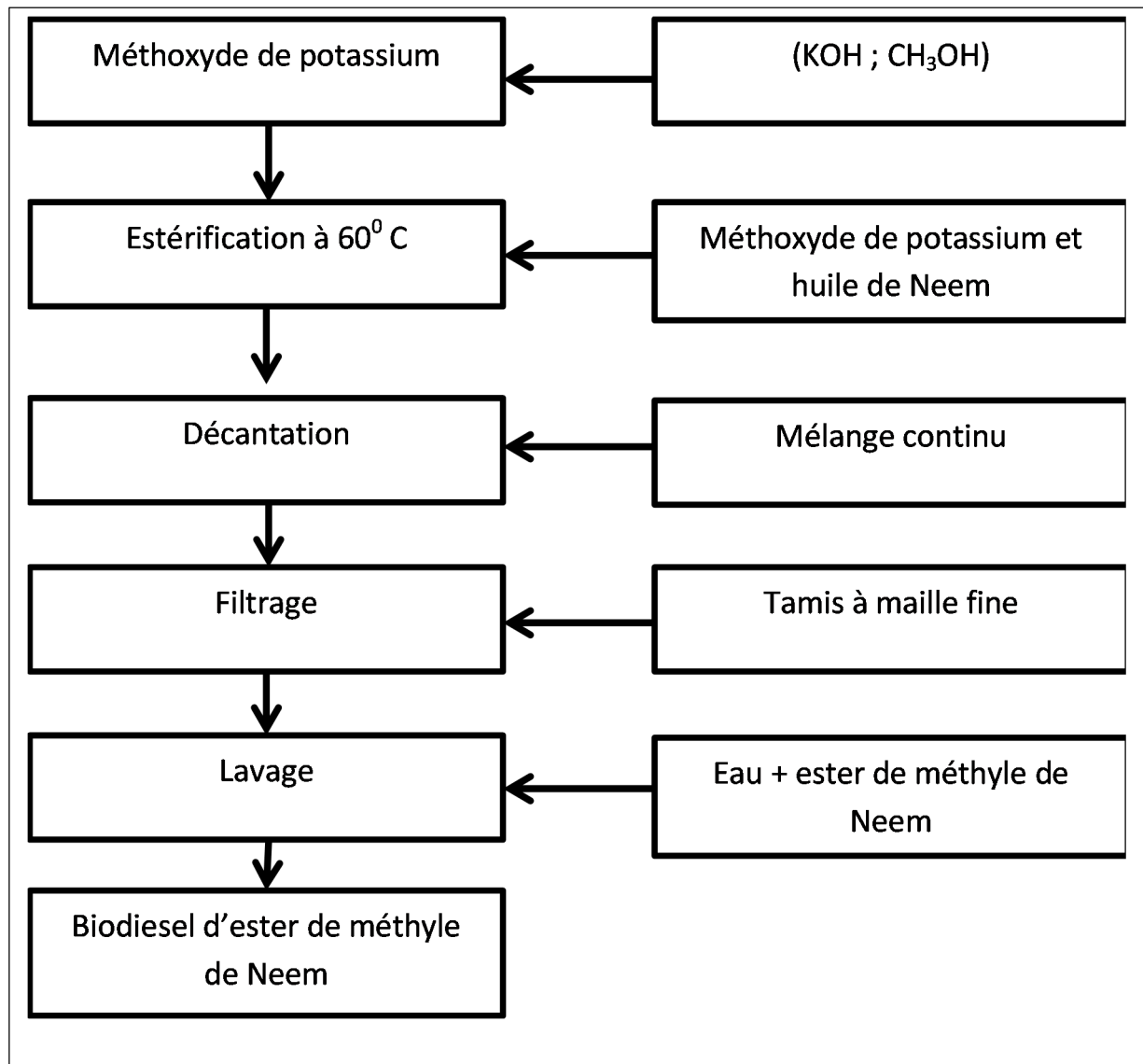


Figure 4-10 - Processus de fabrication du Biodiesel à base d'huile de Neem[121]

IV.3.3.1.1. CARACTERISATION DU BIODIESEL A BASE DE METHYLE ESTER DE NEEM

Le Biodiesel à base de méthyle ester de Neem a été caractérisé par (Ayissi et al.) [121] pour la détermination des propriétés suivantes :

- La masse volumique a été déterminée par la méthode ASTM D1298,
- La capacité calorifique a été déterminée d'une bombe calorimétrique Parr Instrument,
- Le point éclair a été déterminé à l'aide la méthode pensky – Martens suivant la norme ASTM D93
- La viscosité est déterminée selon la norme D473 à l'aide d'un viscosimètre

IV.4. VALIDATION DU MODELE

IV.4.1. MODELES THERMODYNAMIQUES DES CARBURANTS

Le modèle ici validé nécessite les données thermodynamiques tabulées des carburants utilisés. La recherche dans le domaine de la combustion a montré que l'utilisation de données thermodynamiques tabulées d'hydrocarbures simple comme substituts permet d'avoir de bon résultats. Pour le carburant Diesel dont la complexité de la composition rend difficile la simulation dû à une grande variabilité en terme de procédé de production, le n – heptane (C_7H_{16}) et le n – dodécane ($C_{12}H_{26}$) sont le plus souvent utilisé comme carburant de référence [26, 93].

La Biodiesels étant issues de sources hétérogènes leur composition chimique est encore plus complexe. Des carburants de substitution ont été également mis sur pied afin de simuler la combustion des notamment le méthyle butanoate et le methyl butyrate. Ces données thermodynamiques sont issues des tables thermodynamiques compilées à partir du code CHEMKIN[122, 123].

IV.4.2. VALIDATION EXPERIMENTALE

Les simulations du moteur ont été effectuées pour l'ensemble de variantes précédemment énoncés. Les figures suivantes (figure 3 - Figure 8) présentent les courbes comparatives de pénétration de jet, de pression, de température, d'émission de NOx calculées et expérimentales pour des vitesses de rotation du vilebrequin allant de 1000 à 2800 tr/min.

Le tableau 3.1 rapporte les paramètres macroscopiques (Puissance, diamètre des gouttelettes pulvérisées, émission de NOx) du moteur calculées et expérimentales.

Afin de mieux tester le niveau de prédictive de notre modèle, une subroutine a été programmée pour le traçage de la géométrie globale du jet de carburant pulvérisé, les résultats sont présentés sur la Fig. 7 et 8.

L'évolution globale montre que le modèle prédit assez bien les paramètres de combustion pour le moteur Diesel. Cependant, des commentaires peuvent être apportés par rapport à la précision du modèle.

On peut voir sur les figures 7 et 8 que la forme du jet est similaire celle du jet expérimental jusqu'à la zone de transition; la pénétration est similaire, mais l'angle de dispersion du jet pulvérisé tend à être réduit par le modèle, après la zone de transition. Ceci peut être expliqué par le fait que le modèle assimile le jet de carburant pulvérisé à un ensemble homogène pour chaque zone, ensemble pour lequel les propriétés physiques sont conservées en tout point

quelconque du jet contrairement à la réalité où chaque zone du jet revêt ses propriétés physique intrinsèques.

La pression dans le cylindre est globalement bien estimée pour chaque scénario d'étude. Le modèle a cependant tendance à surestimer la pression dans le cylindre pour ceux-ci. Les émissions de NOx sont également estimées avec une bonne précision bien que les de petits écarts sont également observables. Cette légère imprécision est explicable par le caractère hétérogène de la composition du carburant Diesel au cours de sa fabrication. En effet les tables thermodynamiques utilisées ici, comme dit plus haut, sont issues d'hydrocarbures de substitution, on s'attend donc à un léger écart des résultats simulés par rapport à l'expérimentation. Les conditions initiales des expérimentations pourraient également être des paramètres spécifiques qui influencent la précision du modèle.

Une voie à suivre pour l'amélioration de la précision du modèle pourrait être son étude de sensibilité par rapport aux coefficients de pondération présentés dans les équations (2,10) et (2,14).

Les tableaux 3.1. - 3.3 présentent les paramètres de la combustion dans le cylindre et les écarts entre les résultats mesurés et ceux simulés.

On peut voir que les erreurs globales sont respectivement de 10% pour le diamètre des gouttelettes pulvérisées, de 12% pour celle de la pénétration maximale du jet, de 9,8% pour une les pics de pression, 7,38% pour les pics de température, 10,7% pour les émissions de NOx et de 13,7% pour la puissance en sortie du moteur.

En moyenne, le modèle prédit les paramètres ci-dessus cités du moteur avec des erreurs moyennes inférieur à 15% ce qui est acceptable pour les études de prédiction des moteur et leur simulation[28, 62, 88, 91, 92].

IV.4.3. TEMPS DE CALCUL

La durée moyenne pour la simulation complète d'un cycle est d'environ 26 secondes, soit environ 200 fois le temps réel d'un cycle. La routine résolvant les équations non linéaires décrites dans le code prenant en moyenne 25 secondes, soit 96% du temps total de simulation.

Nous avons mené une étude sensibilité du modèle par rapport à la valeur du pas de temps et par rapport à l'applicabilité d'un pas de temps variable pour les différents temps correspondant au cycle de combustion.

Tableau 4-5 - Evaluation des performances du modèle 0D phénoménologique par rapport au pas de temps de calcul

Essais	Pas de temps (degré)	Durée de calcul	Remarque
1	Constant à 1 degré	26 secondes	
2	Constant à 0,5 degrés	26,151 secondes	
3	Constant à 2 degrés	Estimation impossible	Apparition de singularité dans la matrice $[D]$
4	Variable : 2 degrés pour les temps de compression et de détente et 1 degré pour le temps de combustion	Estimation impossible	Apparition de singularité dans la matrice $[D]$
5	Variable : 1 degré pour les temps de compression et de détente et 0,5 degré pour le temps de combustion	25 secondes	

Les résultats ci-dessus présentés montrent que le modèle est stable pour un pas de temps variant entre 1 et 0,5 degré de rotation du vilebrequin. Le modèle peut être à la fois utilisé avec un pas de temps variable dépendamment des temps du cycle ou un pas de temps constant tout au long du cycle. Un pas de temps supérieur à 2 degrés de rotation du vilebrequin entraîne l'apparition de singularités dans la matrice qui intervient dans la résolution de l'équation (3.24). La variation du pas de temps entraîne une faible variation du temps de calcul et n'a aucune conséquence sur les résultats et la précision des simulations.

Nous avons opté pour un pas de temps constant correspondant à un degré de rotation du vilebrequin par soucis d'homogénéité de la simulation. La durée de calcul implique que le modèle peut bien être utilisé pour le paramétrage et les problèmes d'optimisation liés à la conception la modernisation des moteurs Diesel.

La section suivante présente l'application du modèle à la combustion du carburant Biodiesel à base d'huile de Neem.

Tableau 4-6 - Comparaison des valeurs simulées et expérimentales des diamètres moyens et de pénétration de jet de liquide pulvérisé à partir du modèle 0D phénoménologique

Vitesse vilebrequin, tr/min	Diamètre moyen, μm			Pénétration maximale, mm		
	S	E	Erreur relative, %	S	E	Erreur relative, %
2800	12,76	11,34	11,1	103,9	114,2	9,9
2000	11,62	10,54	9,3	75,08	85,76	14,2
1600	13,05	11,85	9,2	69,28	80,87	16,7
1400	14,20	12,71	10,5	71,1	77,79	9,4
1000	16,88	15,21	9,9	65,47	71,89	9,8
Moyenne			10,00			12,01

Tableau 4-7 - Comparaison des valeurs simulées et expérimentales de pics de pression et de température à partir du modèle 0D phénoménologique

Vitesse vilebrequin, tr/min	Pression maximale, MPa			Température maximale, K		
	S	E	Erreur relative, %	S	E	Erreur relative, %
2800	12,06	10,3	14,6	2489	2124	14,7
2000	23,21	22,24	4,17	2441	2295	5,9
1600	21,56	22,81	5,8	2435	2313	5,0
1400	21,08	23,16	9,9	2454	2322	5,37
1000	20,63	23,62	14,4	2485	2339	5,87
Moyenne			9,8			7,38

Tableau 4-8 - Comparaison des valeurs simulées et expérimentales d'émissions de NOx et de puissance à partir du modèle 0D phénoménologique

Vitesse vilebrequin, tr/min	NOx, ppm			Puissance, kW		
	S	E	Erreur relative, %	S	E	Erreur relative, %
2800	2039	1999	1,9	176,36	155,3	11,9
2000	1007	844,7	16,11	201,64	150,6	25,3
1600	976	1150	17,8	139,19	117,6	15,5
1400	1240	1341	8,14	109,17	100,5	7,94
1000	1592	1740	9,4	71,37	65,7	7,9
Moyenne			10,7			13,7

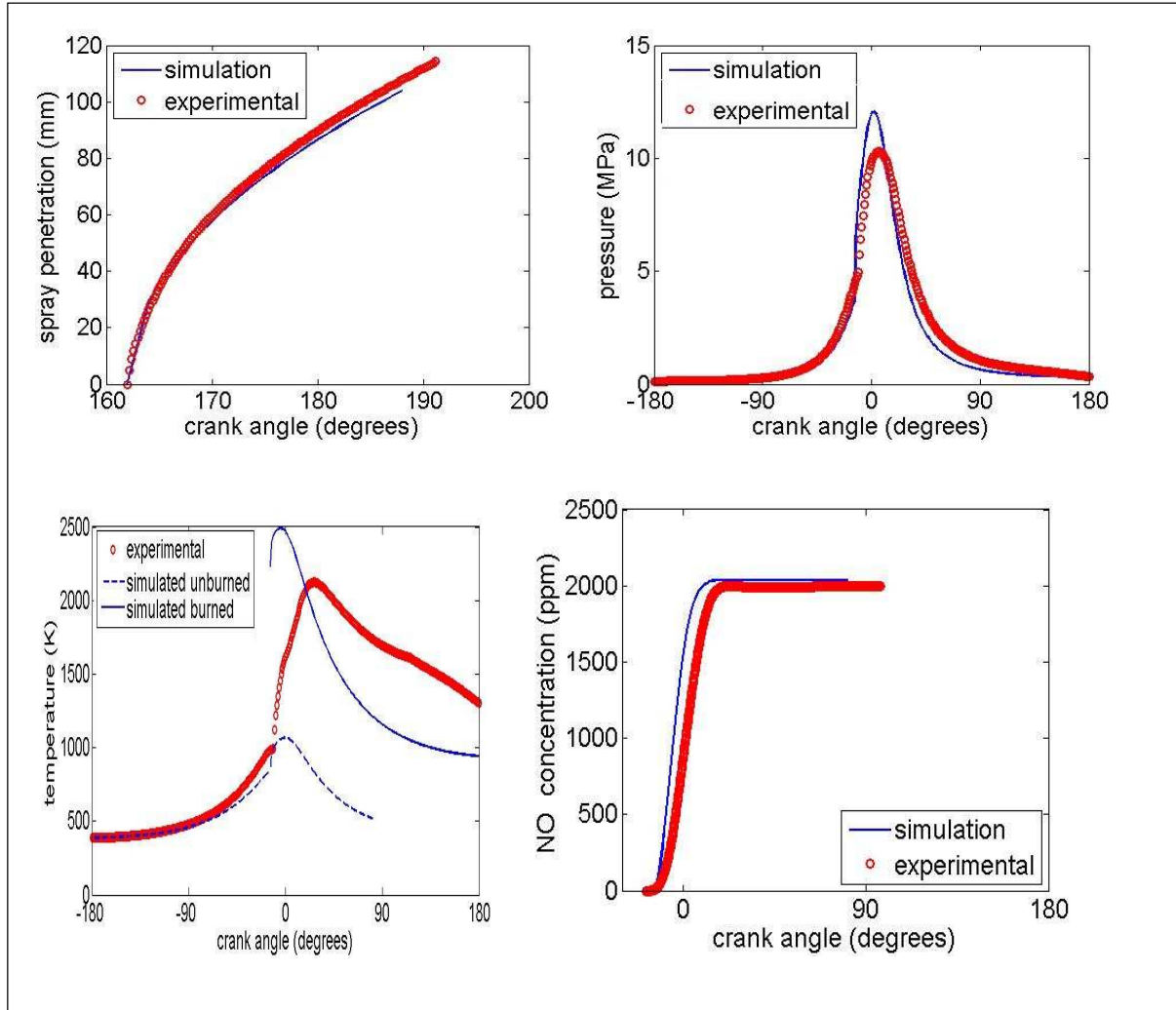


Figure 4-11 - courbes simulées et expérimentales (calibrées Diesel-Rk) de pénétration de jet liquide, pression dans le cylindre, température dans le cylindre et émission de NOx à 2800 tr/min

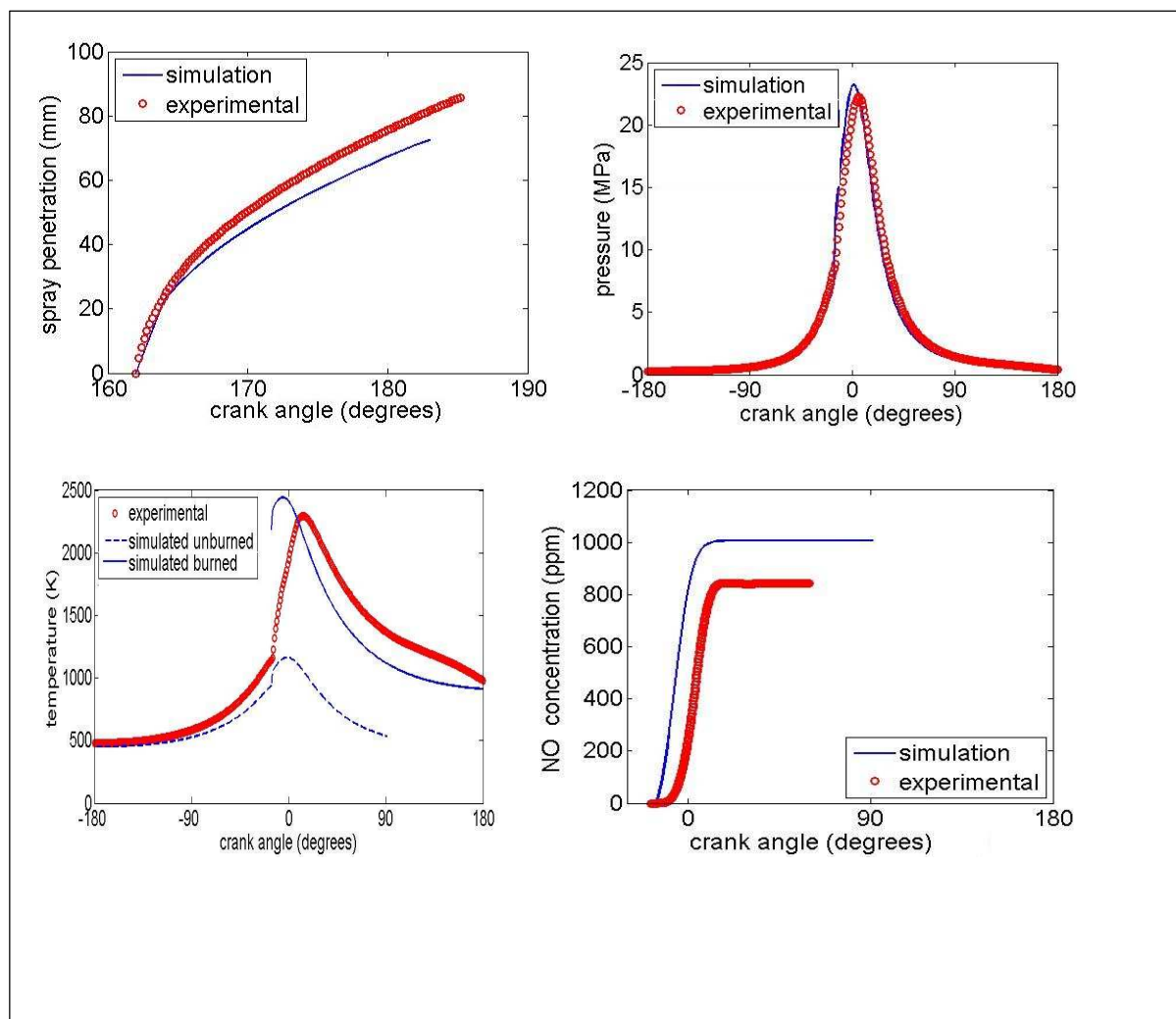


Figure 4-12 - courbes simulées et expérimentales (calibrées Diesel-Rk) de pénétration de jet liquide, pression dans le cylindre, température dans le cylindre et émission de NOx à 2000 tr/min

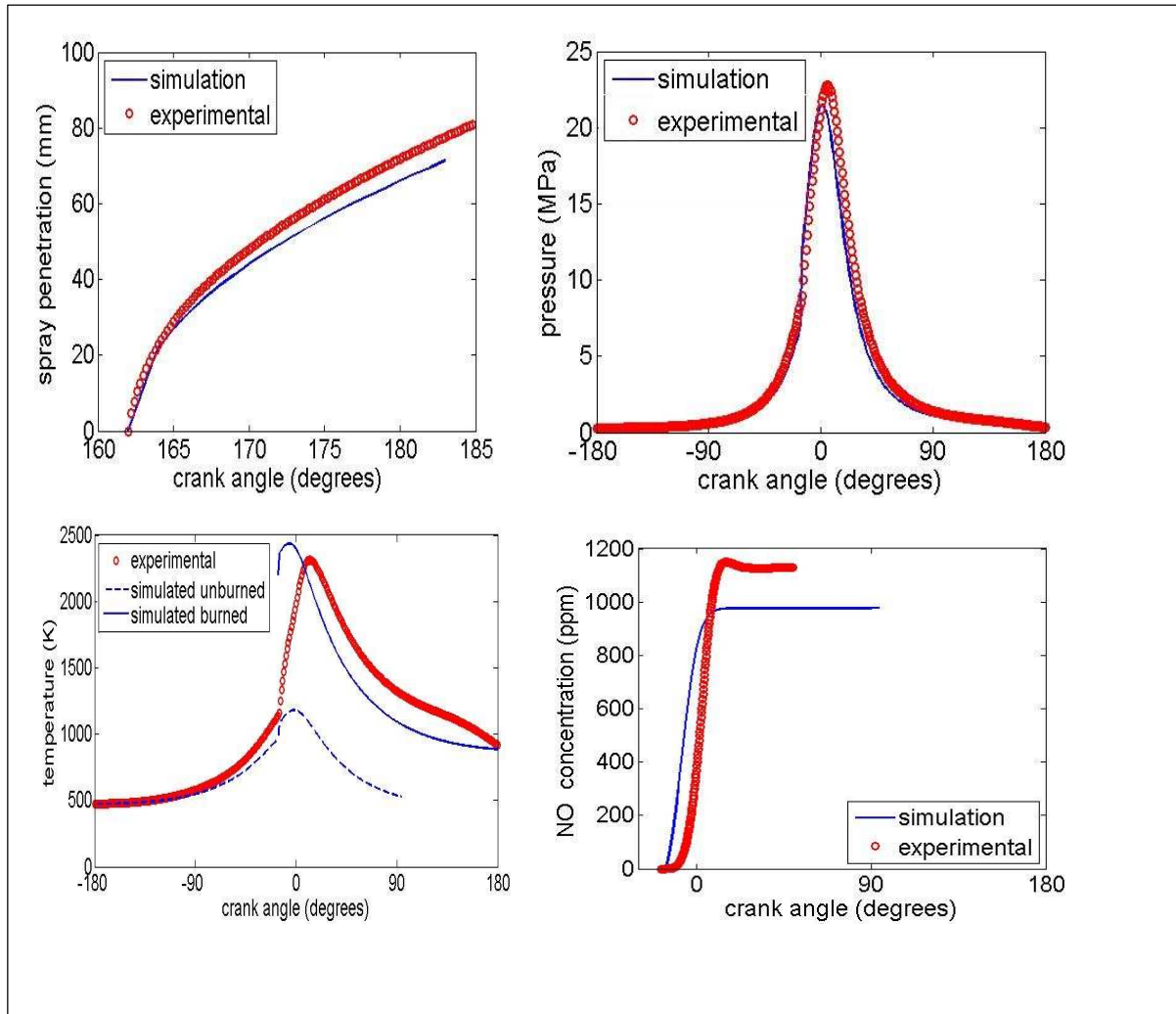


Figure 4-13 - courbes simulées et expérimentales (calibrées Diesel-Rk) de pénétration de jet liquide, pression dans le cylindre, température dans le cylindre et émission de NOx à 1800 tr/min

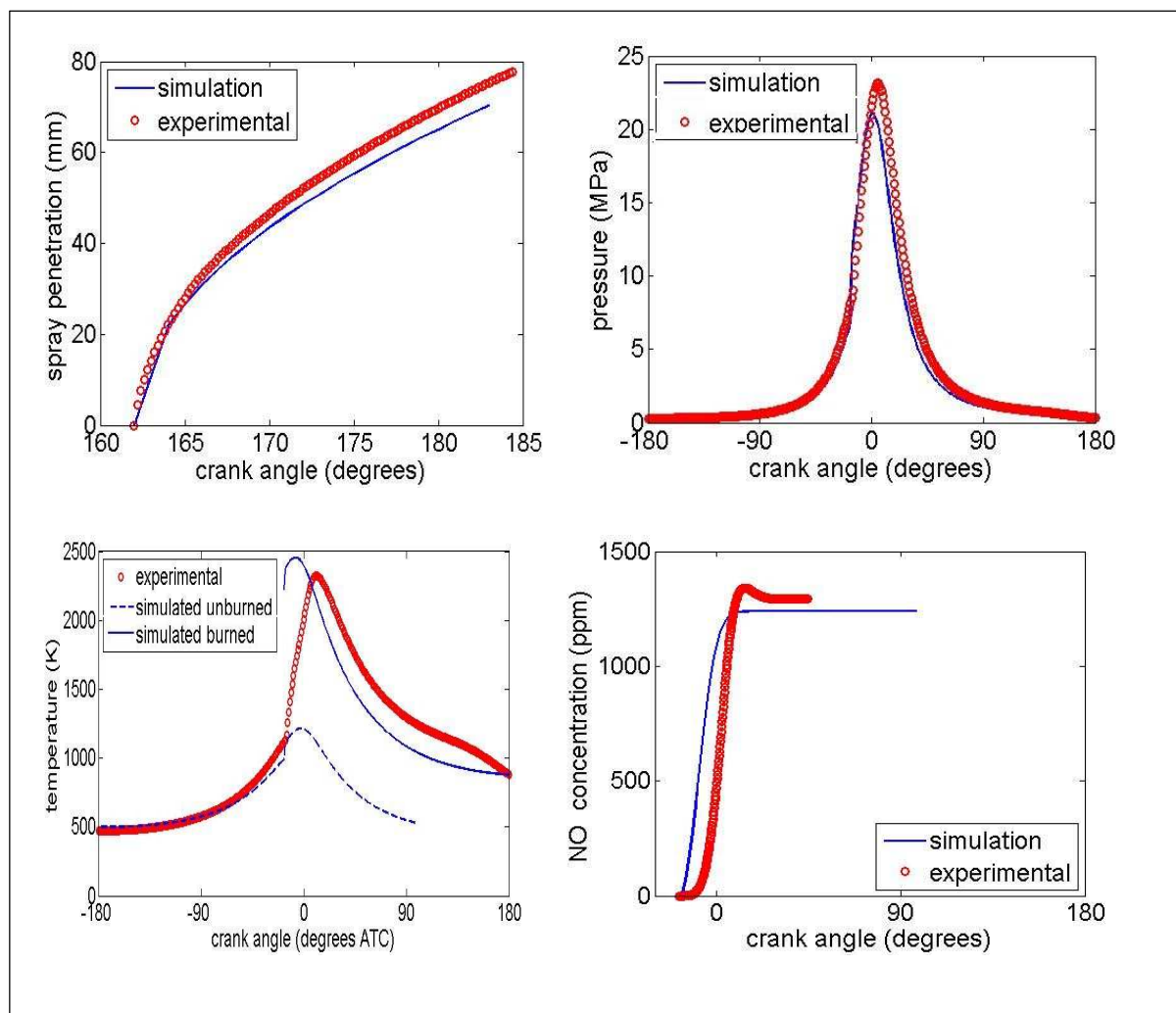


Figure 4-14 - courbes simulées et expérimentales (calibrées Diesel-Rk) de pénétration de jet liquide, pression dans le cylindre, température dans le cylindre et émission de NOx à 1400 tr/min

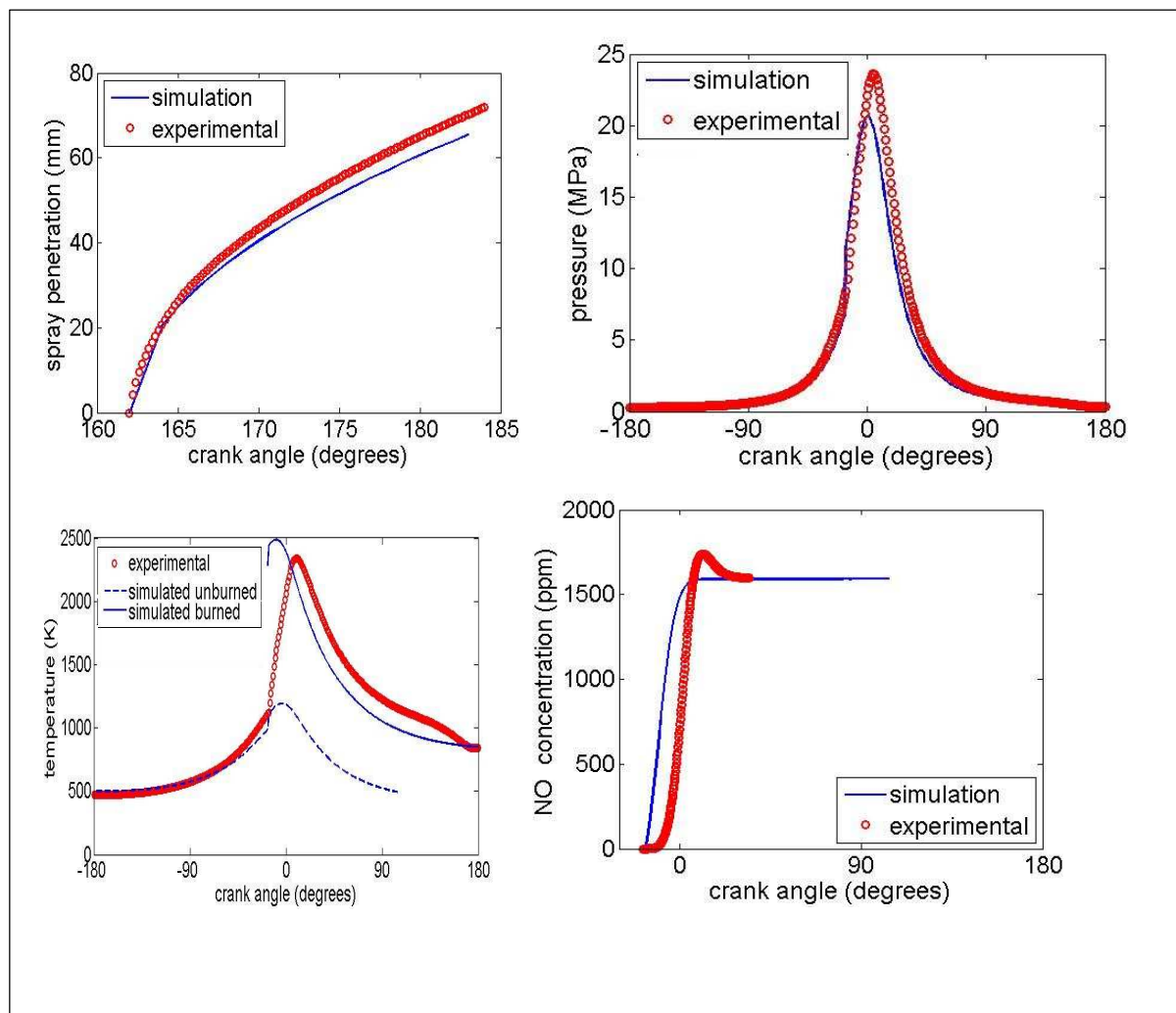


Figure 4-15 - courbes simulées et expérimentales (calibrées Diesel-Rk) de pénétration de jet liquide, pression dans le cylindre, température dans le cylindre et émission de NOx à 1000 tr/min

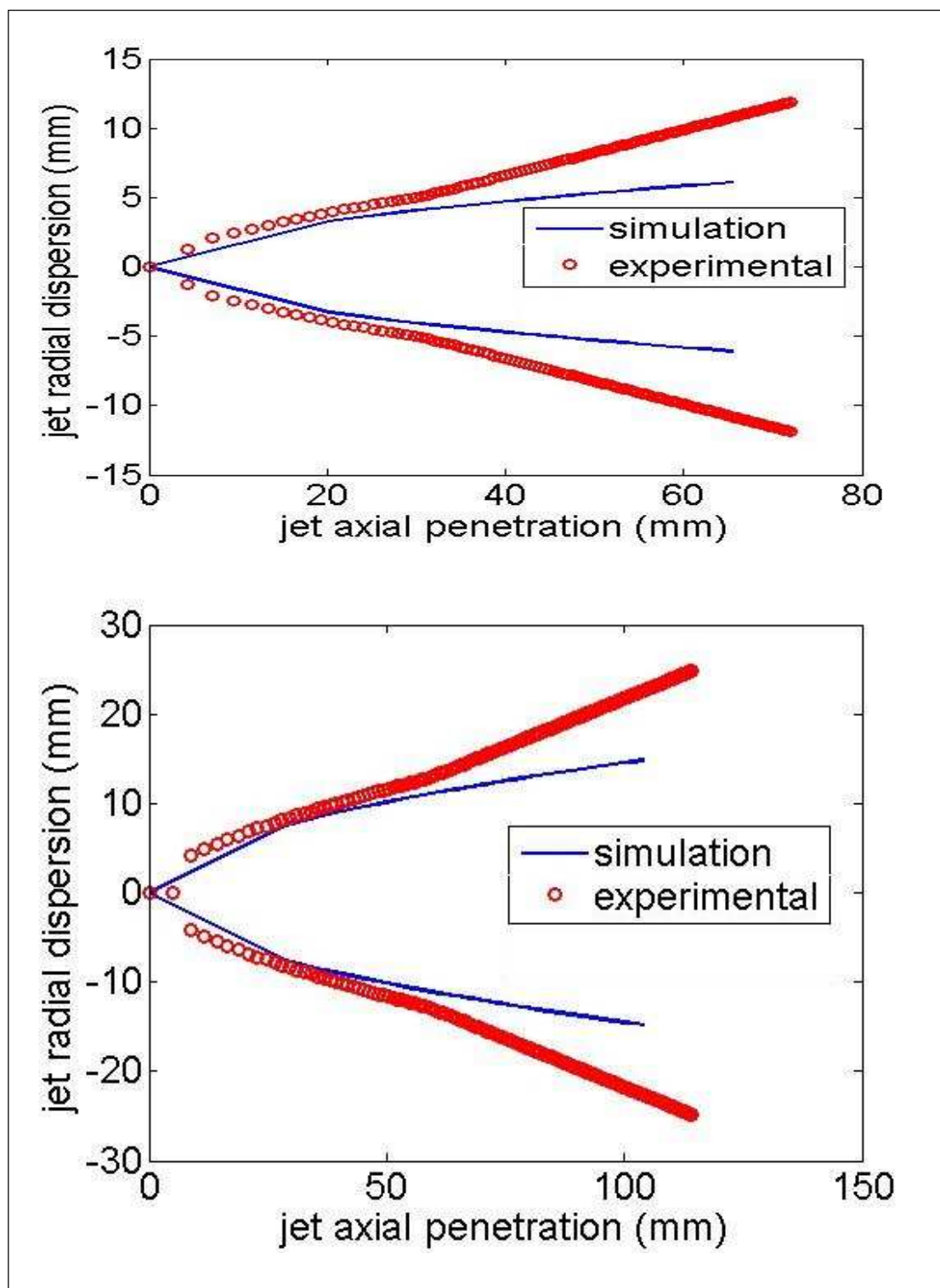


Figure 4-16 - Visualisation du spray à 1000 et 2800 tr/min

IV.5. SIMULATION DE LA COMBUSTION DU BIODIESEL A BASE D'ESTER DE METHYL DE NEEM DANS UN MOTEUR DIESEL

Dans cette partie, nous avons simulé le processus de combustion dans un moteur Diesel alimenté au Biodiesel à base de méthyle ester de Neem. Les simulations ont été effectuées à des vitesses de rotation du vilebrequin correspondant à 2000 et 1000 tr/min. Les conditions d'entrées, atmosphérique et d'injections sont les mêmes que celle indiquées pour la validation du modèle au carburant Diesel.

Les données thermochimiques du Biodiesel ont été substituées en première instance par celle correspondant au butanoate de méthyle issues des travaux de [122] et en deuxième instance à celle correspondant au butyrate de méthyle issues des travaux de [124]. Les résultats des simulations sont présentés aux tableaux 3.3. et 3,4.

Comme décrit plus haut, la caractérisation physique du Biodiesel issu d'huile de Neem a été effectuée au sein de la société HYDRAC par le Groupement camerounais de Combustion.

IV.5.1. RESULTATS DE LA SIMULATION

Les calculs montrent que le modèle prévoit un plus grand diamètre moyen de Sauter ainsi qu'une plus grande pénétration du jet pour l'ester de méthyle à base d'huile de Neem. Ceci s'explique par la viscosité, la masse volumique et le coefficient de tension superficielle plus élevés pour le Biodiesel tel que remarqué dans [8, 9, 125].

Le modèle prédit une température maximale supérieure pour le Biodiesel par rapport à celle émise par le Diesel conventionnel; le Biodiesel étant un carburant oxygéné, le mélange carburé tend à s'appauvrir ce qui entraîne un accroissement du taux de combustible brûlé x , la racine carrée de ce dernier étant proportionnel à la variation de température cette dernière sera d'autant plus grande que cette fraction de carburant brûlé s'accroisse.

Le modèle d'émission de NOx ici utilisé étant le NO thermique, il était prévisible que le modèle prédirait une plus grande émission de NOx pour la combustion du Biodiesel. L'augmentation des émissions de NOx lors de la combustion des Biodiesel est une tendance observée dans de nombreuses recherches [4, 91, 126, 127].

IV.5.2. EVALUATION DES CARBURANTS DE SUBSTITUTION

Les tableaux ci-dessous présentent les résultats des simulations dépendamment des deux carburants de substitution utilisés, nommément le butanoate de méthyle et le butyrate de méthyle. Le constat qui peut être fait est que les données calculées sont pratiquement identiques indépendamment du substitut utilisé et du régime de fonctionnement.

Analysons les coefficients expérimentaux $a_1 - a_7$ correspondant aux tables thermodynamiques de ces deux substituts tels que présentés dans leur table CHEMKIN correspondants.

On remarque une similarité des coefficients a_1 , a_2 et a_6 , et la différence entre les autres coefficients n'excède pas 40%. De plus les compositions chimiques des deux substituts ne sont pas très différentes l'une de l'autre ; la teneur en oxygène est identique.

Nous avons procédé au tracé de l'évolution des paramètres thermodynamiques (h/R , C_p/R , s/R) de ces carburants par rapport à la température conformément aux équations 3.15 – 3.17.

Les figures 4.17, 4.18 et 4.19 montrent que l'évolution des paramètres thermodynamiques des carburants de substitution au Biodiesel à base Neem ici utilisés est pratiquement identique pour les deux substituts. On peut également voir que les erreurs relatives des paramètres calculés sont relativement faibles. En se référant l'hypothèse d'équilibre thermodynamique utilisée lors de l'étude de combustion suivant l'algorithme de Ferguson il est donc compréhensible que la similarité de ces paramètres thermodynamiques entrainera également une similarité lors du calcul des paramètres thermodynamiques du mélange. Les données d'entrées correspondant à la composition du mélange lors de la résolution des équations différentielles non linéaires présentées aux formules 3.27 – 3.37 seront donc pratiquement identiques.

On peut donc conclure que l'utilisation du butanoate de méthyle ou du butyrate de méthyle donne des résultats similaires. L'un ou l'autre est donc adéquat à l'étude de combustion des Biodiesels dans les moteurs Diesels.

Tableau 4-9 - tables thermodynamiques CHEMKIN pour le butanoate et le butyrate de méthyle

Substitut	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅	a ₆	a ₇
Butanoate de méthyl C₅H₁₀O₂	1,90094 725E+0 1	2,3650 3722E- 02	- 8,229784 52E-06	1,29246265 E-09	- 7,55862836 E-14	- 6,34989152E+ 04	- 7,32469099E +01
Butyrate de méthyle C₆H₁₂O₂	1,48730 879E+0 1	3,7665 6586E- 02	- 1,390067 16E-05	2,27853312 E-09	- 1,37692123 E-13	- 6,36313780E+ 04	- 4,63993258E +01

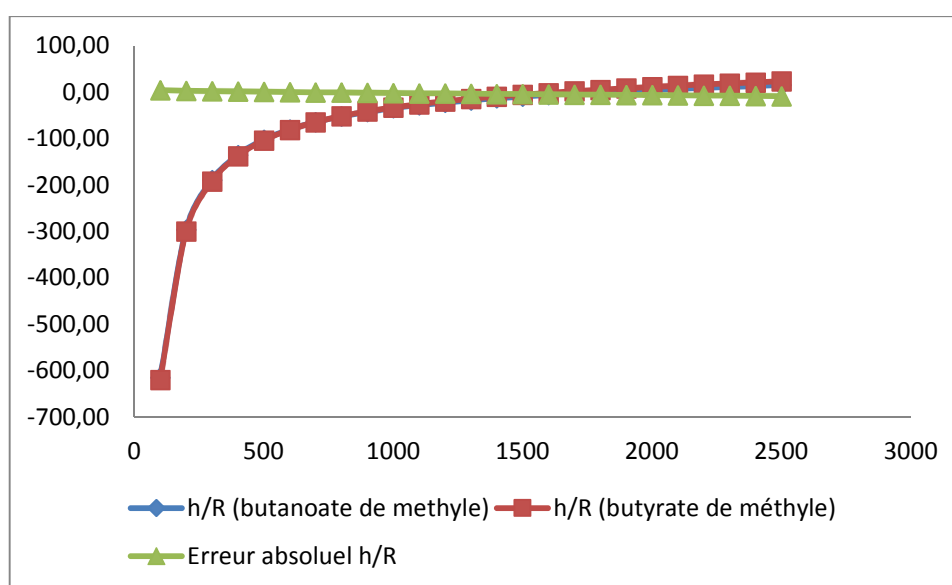


Figure 4-17 - Comparaison de la variation de l'enthalpie par rapport à la température pour le butanoate et butyrate de méthyle

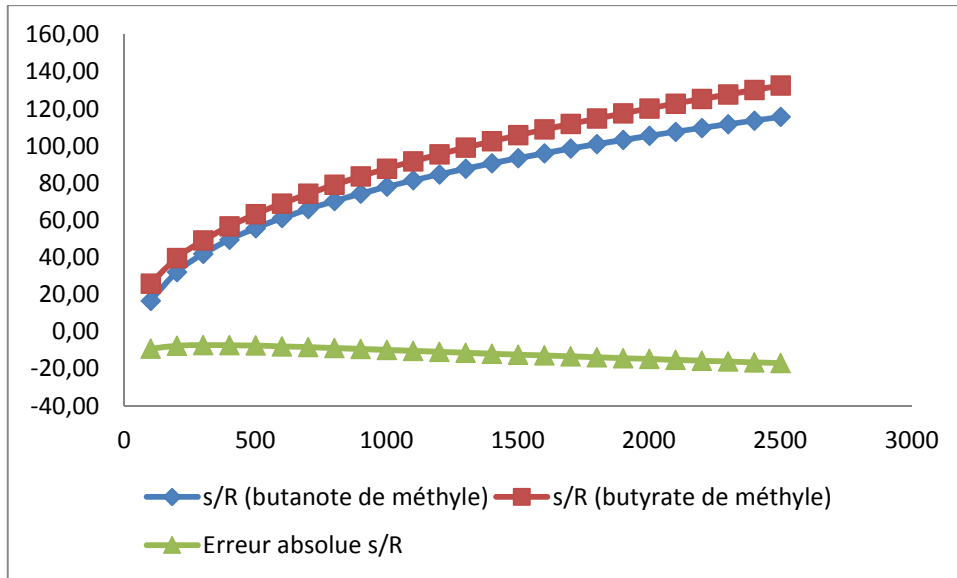


Figure 4-18 - Comparaison de la variation de l'entropie par rapport à la température pour le butanoate et butyrate de méthyle

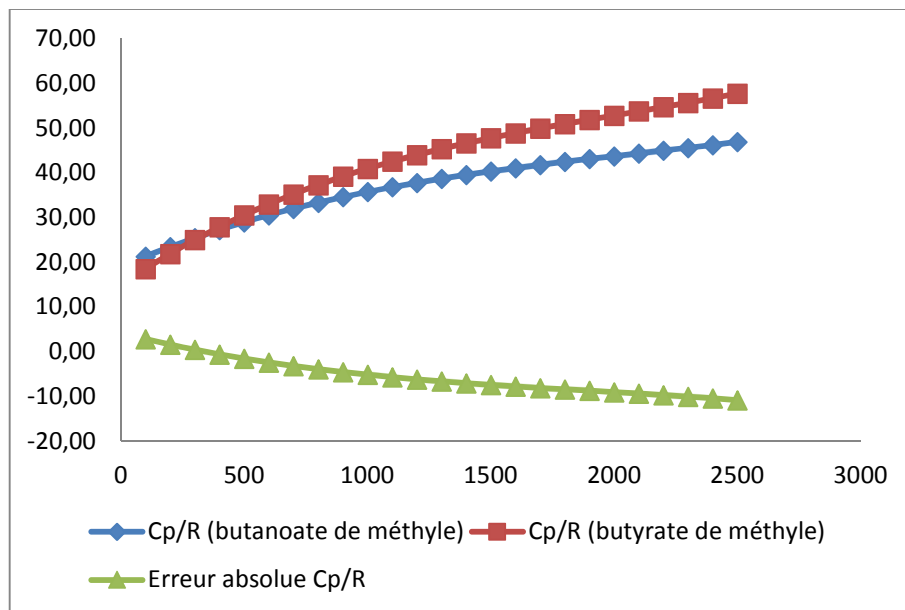


Figure 4-19 - Comparaison de la variation de la chaleur massique par rapport à la température pour le butanoate et butyrate de méthyle

Tableau 4-10 - Performances calculées du Biodiesel à base de Neem à 2800 tr/min à partir du modèle 0D phénoménologique

Paramètres calculés	Butanoate de méthyle comme substitut [113]	Butyrate de Méthyle comme substitut [123]
NOx, ppm	1843	1818
Température maximale, K	2518	2543
Pression maximale, Mpa	23,53	22,71
Diamètre moyen des gouttelettes, μm	5,6	5,6
Pénétration maximale du jet, mm	110,1	110,1
Puissance, kW	262,60	261,9

Tableau 4-11 - Performances calculées du Biodiesel à base de Neem à 2000 tr/min à partir du modèle 0D phénoménologique

Paramètres calculés	Butanoate de méthyle comme substitut [113]	Butyrate de Méthyle comme substitut [123]
NOx, ppm	1082	1218
Température maximale, K	2444	2453
Pression maximale, Mpa	20,63	20,71
Diamètre moyen des gouttelettes, μm	12,83	12,83
Pénétration maximale du jet, mm	110,1	110,1
Puissance, kW	182,28	181,9

Tableau 4-12 - Performances calculées du Biodiesel à base de Neem à 1000 tr/min à partir du modèle 0D phénoménologique

Paramètres calculés	Butanoate de méthyle comme substitut [113]	Butyrate de Méthyle comme substitut [123]
NOx, ppm	2188	2470
Température maximale, K	2529	2541
Pression maximale, Mpa	20,73	20,81
Diamètre moyen des gouttelettes, μm	18,45	18,45
Pénétration maximale du jet, mm	69,37	69,37
Puissance, kW	80,63	79,98

IV.6. ETUDE DE SENBILITE DU MODELE POUR 4 DIFFERENTS SUBSTITUTS

Les carburants de substitut au biodiesel utilisés dans cette partie sont respectivement le butanoate de méthyle, le butyrate d'éthyle, le décanoate de méthyle et le 9-décénoate de méthyle. Ces quatre substituts ont été choisis tout d'abord en raison de la grande quantité de travaux sur leur cinétique de combustion et leur étude comme substituts au biodiesel [128-131], et d'autre part pour la large disponibilité de données validées concernant leur mécanismes de combustion. Les données thermodynamiques pour chaque substitut sont issues respectivement des travaux de Liu et al. [132] pour le butanoate de méthyle, Herbinet et al. pour le décanoate de méthyle [133], Luo et al. [134] pour le 9-décénoate de méthyle et de Goos et al. [124] pour le butyrate de méthyle.

IV.6.1 SPECIFICATIONS DU MOTEUR ET CARACTERISTIQUES DES BIODIESEL

L'étude expérimentale utilisée pour notre analyse, a été réalisée par Sanli et al. [135]. Les caractéristiques de combustion et d'émission d'un moteur diesel à six cylindres turbocompressé à injection directe ont été étudiées pour une alimentation aux biodiesels d'ester méthylique et éthylique à partir de restes d'huile de friture. Les caractéristiques du moteur sont indiquées au tableau 1. et celles des carburants biodiesel au tableau 4.12.

Tableau 4-13 Caractéristiques du moteur [135]

Moteur	Ford Cargo 6 litres
Type	Injection directe, turbochargé
Nombre de cylindres	6
Alésage X Course (mm)	104.0 – 114.9
Rapport de Compression	16.4:1
Puissance max (kW)	136 à 2400 tr/min
Couple max (Nm)	650 à 1400 tr/min
Pompe à injection	A rampe
Pression d'ouverture à l'injection	197 bars

Tableau 4-14 - Caractéristiques des biodiesels [135]

Propriétés	Biodiesel Ester de méthyle	Biodiesel Ester d'éthyle
Masse volumique (15°C)	884,3 kg/m ³	883,4 kg/m ³
Viscosité (40°C)	4,5 mm ² /s	4,9 mm ² /s
Pouvoir calorifique inférieur	37,33 kJ/kg	37,550 kJ/kg
Indice de Cétane	54,9	53,5

L'étude numérique a été réalisée pour trois régimes (vitesses de rotation) du moteur différentes et pour chaque substitut; 1100 tr/min, 1400 tr/min et 1700 tr/min. L'avance à l'injection pour chaque biodiesel était en conformité avec la mesure de l'angle d'injection pendant la procédure expérimentale mise en place, les valeurs y afférentes sont indiquées au tableau 3. L'angle de rotation du vilebrequin mesuré pour lequel la pression de carburant dans la pompe atteint celle de levée de l'aiguille d'injecteur a été pris comme celui d'avance à l'injection.

Les substituts de biodiesel ont été étudiés suivant trois paramètres:

- La pression maximale dans le cylindre;
- Les émissions d'oxydes d'azote NOx;
- Le rendement thermique.

Tableau 4-15 Valeur de l'avance à l'injection[135]

Carburant	Avance à l'injection (APMH, °AV)		
	1100 tr/min	1400 tr/min	1700 tr/min
Biodiesel d'ester de méthyle	14	13	12
Biodiesel d'ester d'éthyle	14	13,25	12,25

IV.6.2 RESULTATS ET DISCUSSIONS

IV.6.2.1 Evaluation numérique des substituts de biodiesel

La pression maximale, le rendement thermique et les émissions de NOx ont été calculés respectivement pour la combustion des biodiesels d'ester de méthyle et d'ester d'éthyle à base de résidus d'huiles de friture. Les données thermodynamiques des quatre substituts de biodiesel susmentionnés ont été utilisées pour des simulations à 1100, 1400 et 1700 tr/min. Les résultats des simulations et les estimations d'erreur subséquentes sont présentés aux tableaux 4, 5, 6, 7, 8 et 9, respectivement pour 1100, 1400 et 1700 tr/min. Les erreurs sont évaluées comme étant des erreurs relatives entre les valeurs mesurées et calculées.

IV.6.2.1.1 Evaluation numérique du biodiesel d'ester de méthyle

Pression maximale

La pression maximale est assez bien prédite pour chaque substitut. Cependant le le butanoate de méthyle montre un taux de prédiction d'une moyenne de 1,27% de précision pour les différents régimes. Les autres substituts présentent respectivement des taux prédiction d'une moyenne de 6,53%, 1,56% et 6,07% pour le butyrate d'éthyle, le décanoate de méthyle et le 9-

décénoate de méthyle. A la Fig.4. on peut voir que les courbes de pression simulées correspondent étroitement à celle obtenues expérimentalement pour chaque substitut de biodiesel. En général on constate de meilleurs résultats pour le butanoate de méthyle et le décénoate de méthyle par rapport aux deux autres substitués.

Rendement thermique

Le rendement thermique fournit un bon aperçu de l'apport en chaleur du combustible pour la production d'énergie mécanique au cours du cycle de combustion, en particulier lors de l'évaluation des carburant de substitution [136, 137]. Les résultats des simulations montrent que le butanoate de méthyle donne une meilleure approximation avec une erreur relative moyenne de 1,46%. Le butyrate d'éthyle, le décénoate de méthyle et le 9-décénoate de méthyle présentent des erreurs relatives moyennes inférieures à 15%, acceptables pour en simulation de moteur à combustion. Le décénoate de méthyle présente une erreur d'approximation moyenne de 8,56%, suivi du 9-décénoate de méthyle à 12,76% et du butyrate d'éthyle à 13,76%.

Emissions d'oxydes d'azotes NOx

Les émissions de NOx sont simulées à l'aide du mécanisme étendu Zeldovich [85, 103], les résultats de simulation présentent un bon accord avec les résultats expérimentaux pour le butanoate de méthyle avec une erreur moyenne de 6,65% pour les trois régimes. Le décénoate de méthyle, le 9-décénoate de méthyl et le butyrate d'éthyle présentent respectivement des erreurs d'approximation moyennes pour les émissions de NOx de 59,9%, 92,46% et 89,49%.

Tableau 4-16 Résultats comparatifs entre les valeurs expérimentales et simulées pour chaque substitut pour biodiesel d'ester de méthyle à 1100 tr/min

Tr/min	Biodiesel d'ester de méthyle						
1100	Pression max (Mpa)	Erreur	NOX(ppm)	Erreur	Rendement thermique	Erreur	
	Valeurs expérimentales	9,68		1400		39,00%	
1	Butanoate de méthyle	9,79	1,15%	1408	0,57%	38,06%	02,41%
2	Butyrate d'éthyle	9,10	5,97%	101,2	92,77%	33,07%	15,21%
3	Décanoate de méthyle	9,58	0,98%	532	62,00%	34,87%	10,59%
4	9-decenoate de méthyle	9,14	5,51%	142,2	89,84%	33,43%	14,28%

Contribution à la modélisation 0D de la combustion Diesel : Application au Biodiesel

Tableau 4-17 Résultats comparatifs entre les valeurs expérimentales et simulées pour chaque substitut pour biodiesel d'ester de méthyle à 1400 tr/min

Tr/min	Biodiesel d'ester de méthyle					
1400	Pression max (Mpa)	Erreur	NOX(ppm)	Erreur	Rendement thermique	Erreur
Valeurs expérimentales	9,89		1550		42%	
1 Butanoate de méthyle	9,79	0,96%	1511	2,52%	41,82%	0,43%
2 Butyrate d'éthyle	9,09	8,06%	108	93,03%	36,22%	13,76%
3 Décanoate de méthyle	9,57	3,22%	578	62,71%	38,43%	8,50%
4 9-decenoate de méthyle	9,13	7,61%	152,2	90,18%	36,63%	12,79%

Tableau 4-18 Résultats comparatifs entre les valeurs expérimentales et simulées pour chaque substitut pour le biodiesel d'ester de méthyle à 1700 tr/min

Tr/min	Biodiesel d'ester de méthyle						
1700	Pression max (Mpa)	Erreur	NOX(ppm)	Erreur	Rendement thermique	Erreur	
Valeurs expérimentales	9,75		1525		43%		
1 Butanoate de méthyle	9,91	1,69%	1782	16,85%	43,66%	1,53%	
2 Butyrate d'éthyle	9,20	5,57%	128,3	91,59%	37,75%	12,21%	
3 Décanoate de méthyle	9,70	0,49%	686,6	54,98%	40,16%	6,60%	
4 9-decenoate de méthyle	9,25	5,09%	180	88,20%	38,18%	11,21%	

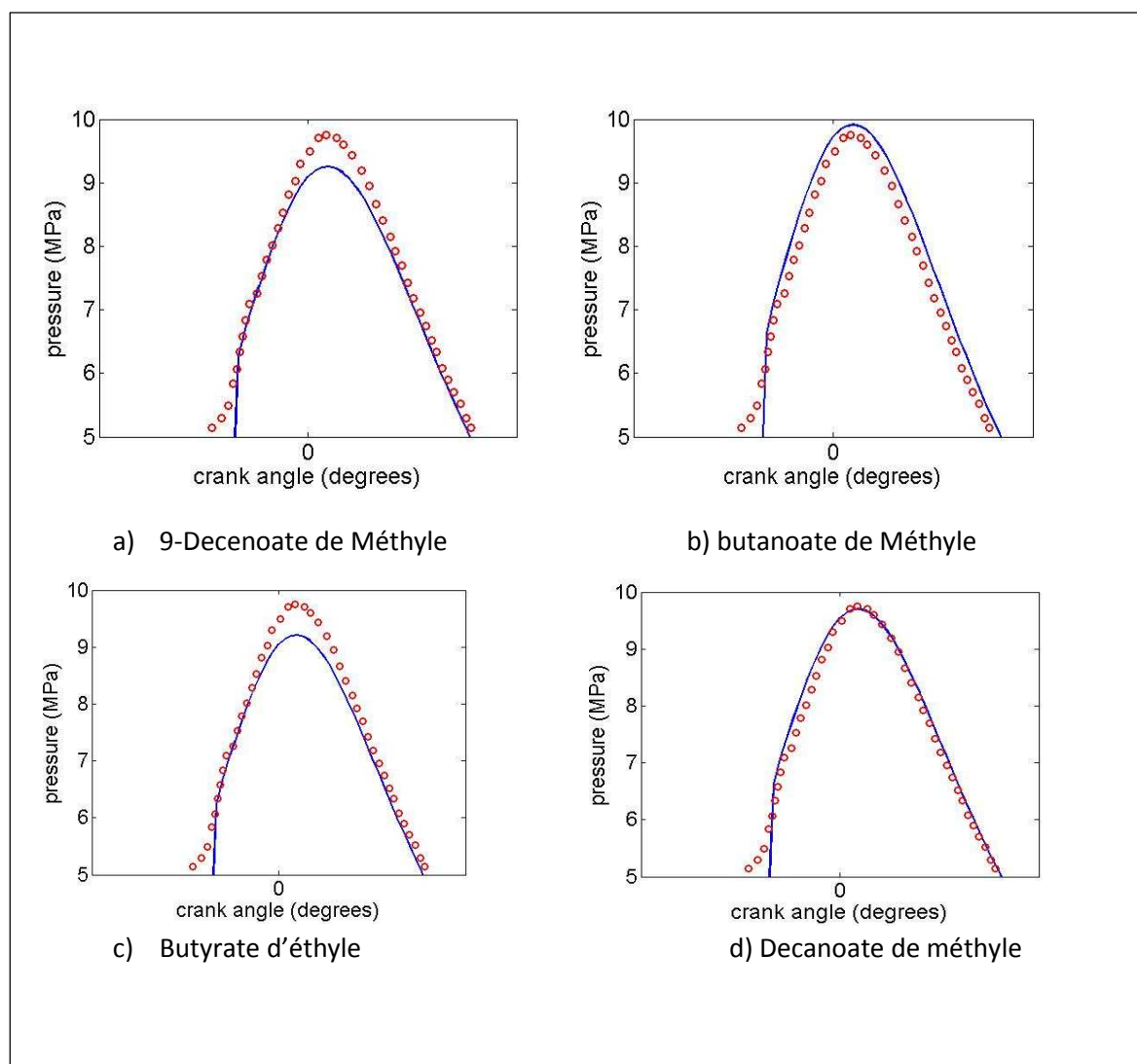


Figure 4-20 Courbes de pressions expérimentales et simulées pour le biodiesel d'ester de méthyle à 1700 tr/min pour chaque substitut

IV.6.2.1.2 Evaluation numérique du biodiesel d'ester d'éthyle

Pression maximale

De même que pour le biodiesel d'ester de méthyle, la pression maximale a été calculée par la simulation à l'aide du modèle 0D phénoménologique. Dans ce cas, on se rend également compte d'une bonne prédiction pour chaque substitut. Le butanoate de méthyle présente une

meilleure moyenne de prédiction à 0,94% de précision sur toute la plage de régime étudiée, ce qui est légèrement supérieure à celle obtenue lors de la simulation du biodiesel d'ester de méthyle. Les simulations présentent respectivement une moyenne de précision de 4,59%, 1,87% et de 4,10% pour le butyrate d'éthyle, le décanoate de méthyle et 9-décénoate de méthyle. La Fig.5. montre que les courbes de pression expérimentales et simulées correspondent bien pour chaque substitut de biodiesel. On remarque que les meilleurs résultats sont obtenus pour les deux substituts butanoate de méthyle et décanoate de méthyle tout comme dans le cas du biodiesel d'ester de méthyle.

Rendement thermique

Les résultats des simulations présentent une meilleure approximation pour le butanoate de méthyle avec une erreur moyenne de 3,55%. Le butyrate d'éthyle, le décanoate de méthyle et le 9-décénoate de méthyle présentent des erreurs moyennes proches de 15%. Le décanoate de méthyle présente des erreurs d'approximation de moyenne de 12,25%, suivi par le 9-décénoate méthyle à 16,21% et le butyrate d'éthyle à 17,11%.

Emissions d'oxydes d'azotes NOx

Comme ce fut le cas pour le biodiesel d'ester de méthyle, les résultats des simulations présentent un bon accord avec les résultats expérimentaux pour le butanoate de méthyle avec une erreur moyenne de 3,84% pour les trois régimes. Le décanoate de méthyle, le 9-décénoate de méthyle et le butyrate d'éthyle, tout comme ce fut le cas lors de la simulation pour le biodiesel d'ester de méthyle, présentent de mauvais pourcentages d'erreur de prédiction des émissions de NOx avec des erreurs moyennes respectives de 53,56%, 87,59% et 91,17%.

Tableau 4-19 Résultats comparatifs entre les valeurs expérimentales et simulées pour chaque substitut pour le biodiesel d'ester d'éthyle à 1100 tr/min

Tr/min	Biodiesel d'ester d'éthyle					
1100	Pression max (Mpa)	Erreur	NOX(ppm)	Erreur	Rendement thermique	Erreur
Valeurs expérimentales	9,86		1410		41%	
1 Butanoate de méthyle	9,86	0,06%	1420	0,71%	38,04%	7,22%
2 Butyrate d'éthyle	9,16	7,02%	102,3	92,74%	33,07%	19,34%
3 Décanoate de méthyle	9,65	2,09%	537	61,91%	34,85%	15,00%
4 9-decenoate de méthyle	9,21	6,56%	143,9	89,79%	33,42%	18,49%

Tableau 4-20 Résultats comparatifs entre les valeurs expérimentales et simulées pour chaque substitut pour le biodiesel d'ester d'éthyle à 1400 tr/min

Tr/min	Biodiesel d'ester d'éthyle					
1400	Pression max (Mpa)	Erreur	NOX(ppm)	Erreur	Rendement thermique	Erreur
Valeurs expérimentales	9,78		1510		42,50%	
1 Butanoate de méthyle	9,77	0,04%	1507	0,20%	41,81%	1,62%
2 Butyrate d'éthyle	9,35	4,40%	131,6	91,28%	35,32%	16,89%
3 Décanoate de méthyle	9,84	0,63%	692,3	54,15%	37,42%	11,95%
4 9-decenoate de méthyle	9,39	3,90%	184,9	87,75%	35,70%	16,00%

Contribution à la modélisation 0D de la combustion Diesel : Application au Biodiesel

Tableau 4-21 Résultats comparatifs entre les valeurs expérimentales et simulées pour chaque substitut pour le biodiesel d'ester d'éthyle à 1700 tr/min

Tr/min	Biodiesel d'ester d'éthyle						
1700	Pression max (Mpa)	Erreur	NOX(ppm)	Erreur	Rendement thermique	Erreur	
Valeurs expérimentales	9,7		1500		43,50%		
1 Butanoate de méthyle	9,96	2,73%	1659	10,60%	44,29%	1,82%	
2 Butyrate d'éthyle	9,47	2,34%	158	89,47%	36,93%	15,10%	
3 Décanoate de méthyle	9,98	2,89%	831	44,60%	39,24%	9,79%	
4 9-decenoate de méthyle	9,52	1,86%	221,9	85,21%	37,35%	14,14%	

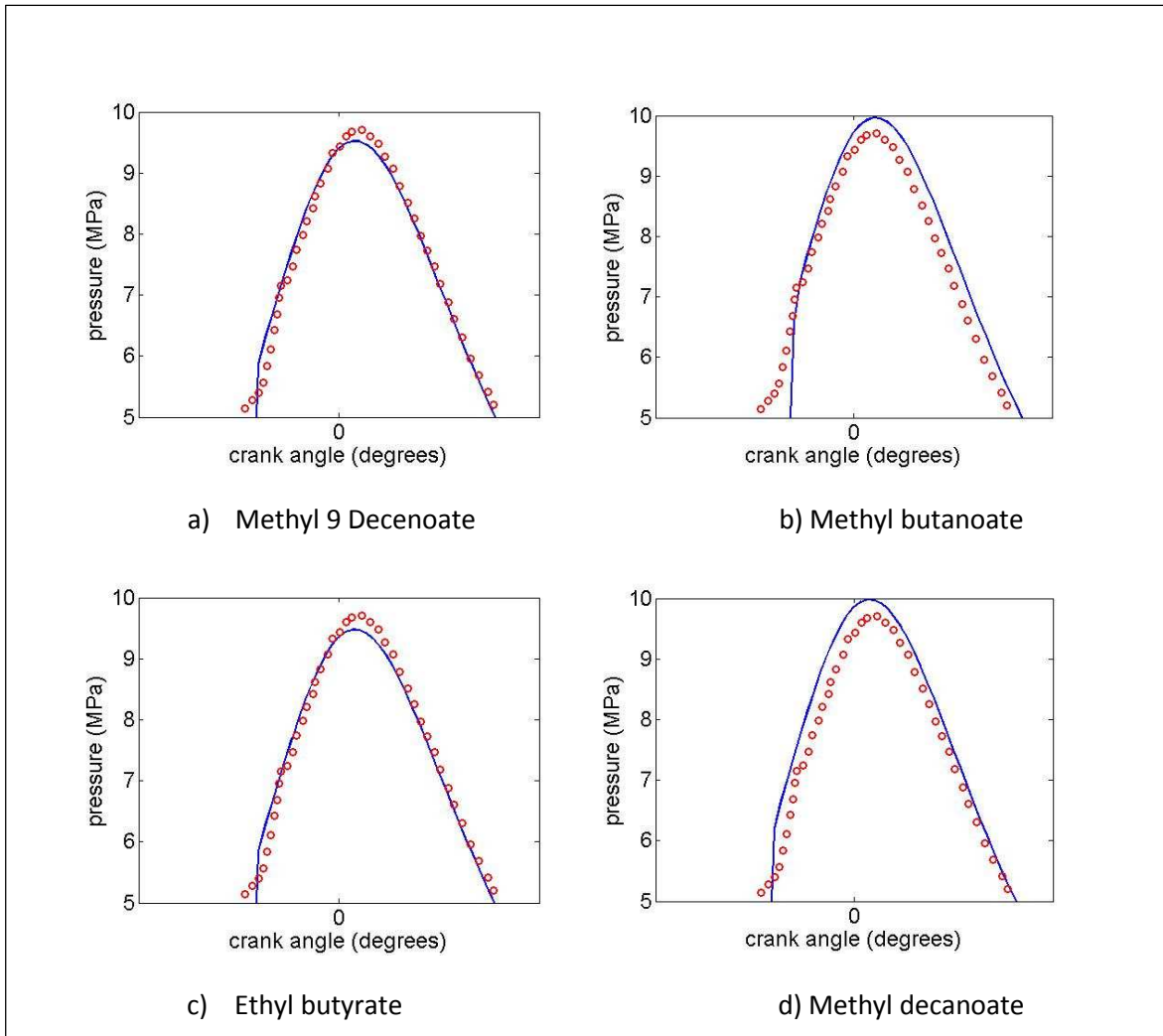


Figure 4-21 Courbes de pressions expérimentales et simulées pour le biodiesel d'ester d'éthyle à 1700 tr/min pour chaque substitut

IV.6.2.2 Discussion

Les résultats approximations sont semblables, que ce soit pour l'étude du biodiesel d'ester méthylique ou du biodiesel d'ester d'éthyle. Pour chaque cas, les courbes de pression et le rendement thermique sont assez bien prédit. Le butyrate d'éthyle et le 9-décénoate de méthyle présentent les plus mauvais résultats en termes de précision de simulation.

La tendance générale observée à partir des différents résultats de la simulation, est telle que le butanoate de méthyle donne de meilleures prédictions de paramètres du moteur par rapport aux autres substituts, ceci entre en accord avec son taux élevé d'utilisation comme substitut pour le biodiesel en modélisation 3D et 1D [138-140]. Cependant, ce résultat entre en contradiction avec les commentaires de Brakora et al. [141] et Hakka et al. [128] qui présentent le butanoate de méthyle comme un mauvais substitut du biodiesel en modélisation numérique de la combustion diesel. Ces auteurs expliquent cela par le fait que le butanoate de méthyle possède une chaîne carbonée courte et ne peuvent donc pas capturer de manière adéquate le délai d'auto inflammation et l'historique de l'évolution des espèces. Il convient de noter que la plupart de ces constatations ont été faites sous modélisation 3D ou sur des études expérimentales. Notre modèle 0D utilise uniquement les coefficients issus des tables CHEMKIN pour calculer des paramètres thermodynamiques dans le cylindre, le délai d'auto inflammation est calculé en fonction de l'indice de cétane du biodiesel étudié. De ce fait le modèle s'affranchit donc de la structure moléculaire du substitut utilisé et ne s'appuie que sur ses coefficients thermodynamiques.

Les trois autres substituts présentent globalement de bonnes approximations du rendement thermique et de la pression maximale. Le méthyl décanoate présente de meilleures résultats d'approximation que le butyrate d'éthyle et le 9-décénoate de méthyle, cette tendance est intéressante, car on aurait pu s'attendre à une valeur d'approximation plus proche pour butyrate d'éthyle puisque ses courbes enthalpie, capacité calorifique et d'entropie sont plus proches de celles de butanoate de méthyle. Cependant, il a été remarqué dans la littérature que le décanoate de méthyle a été largement utilisé comme substitut pour la simulation de la combustion du biodiesel, comparativement au butyrate d'éthyle et au 9- décanoate de méthyle [142-144].

Une autre tendance observée est la mauvaise prédiction des émissions de NOx pour le décanoate de méthyle, le butyrate d'éthyle et le 9-décénoate méthyle. Pour ces trois substitués, les émissions de NOx sont sous prédites par rapport aux résultats expérimentaux. Une étude antérieure, réalisée sur Kiva-2 a montré que les substitués de moindre teneur en oxygène ont tendance à prédire une concentration d'émission de NOx inférieure [145]. Dans notre cas, chaque substitut présente 2 atomes d'oxygène dans sa formule chimique, le butanoate de méthyle présente comme formule chimique $C_3H_{10}O_2$, le butyrate d'éthyle $C_6H_{12}O_2$, du décanoate de méthyle $C_{11}H_{22}O_2$ et le 9-décénoate méthyle $C_{11}H_{20}O_2$. Les rapports air /

carburant stœchiométrique qui calculés par $L = \frac{\left(\frac{8}{3}a + 8 \cdot b - c\right)}{0.232}$ pour chaque substitut de formule $C_aH_bO_cN_d$, seront respectivement 8,788, 9,4928, 11,37 et 11,24. Selon les paramètres expérimentaux de l'essai, la même masse de carburant injectée a été considéré pour chaque substitut dans la simulation. Le modèle prend en compte la fraction molaire de chaque espèce contenue dans le substitut. La composition du mélange réactif sera donc dépendante de la composition du substitut. Le modèle prédira donc un mélange plus riche lors de la combustion du butanoate de méthyle, tandis que pour les autres le mélange sera pauvre. Cela pourrait influencer sur le calcul de la teneur en oxygène dans le mélange réactif et donc aura une incidence sur le calcul des émissions de NOx au moyen du mécanisme étendu de Zeldovich.

CONCLUSION

Ce chapitre a porté sur l'élaboration, la mise en œuvre et l'application sur la combustion du Biodiesel à base Neem d'un modèle 0D phénoménologique pour la simulation des moteurs Diesel. Dans le modèle proposé, les paramètres de combustion dans les cylindres ainsi que les émissions de NOx sont calculés en utilisant différents sous-modèles.

Les sous modèles de spray et d'évaporation ont été intégrés dans le modèle afin de caractériser la cinétique de combustion. Ces sous-modèles ont été couplés avec un modèle de combustion à deux zones basé sur la chimie tabulée pour obtenir l'état thermodynamique instantané de gaz de combustion dans le cylindre.

Le modèle a été validé expérimentalement grâce à des essais moteurs ainsi qu'en comparant les résultats simulés avec ceux obtenus avec le logiciel Diesel-Rk calibré sur le moteur expérimental.

Les simulations ont montré que la moyenne des erreurs relatives est de 15%, elle est respectivement de 10% pour le diamètre de Sauter des gouttelettes, 12% pour la pénétration maximale, 9,8% pour la pression maximale, 7,38% pour la température maximale, 10,7% pour les émissions de NOx et de 13,7% pour la puissance en sortie du moteur.

La durée moyenne pour la simulation complète d'un cycle a été évaluée à environ 26 secondes, soit environ 200 fois le temps réel d'un cycle. Une étude de sensibilité du modèle a également été menée par rapport à la valeur du pas de temps et par rapport à l'applicabilité d'un pas de temps variable pour les différents temps correspondant au cycle de combustion.

Les résultats ont montré que le modèle est stable pour un pas de temps variant entre 1 et 0,5 degré de rotation du vilebrequin. Un pas de temps supérieur à 2 degrés de rotation du vilebrequin entraîne l'apparition de singularités dans la matrice qui intervient dans la résolution de l'équation d'équilibre des espèces. Il a aussi été noté qu'un pas de temps variable entraîne une faible variation du temps de calcul et n'a aucune conséquence sur les résultats et la précision des simulations.

La suite du chapitre a porté sur l'évaluation de l'efficacité de l'utilisation des données thermochimiques tabulées tirées d'esters de méthyle de substitut pour la simulation de la combustion de NMEB. Les données thermochimiques du butyrate de méthyle et du butanoate de méthyle ont donc été utilisées comme substituts pour la combustion du NMEB dans le moteur Diesel. Les simulations de la combustion des deux substituts ont été mises en œuvre et comparées dans la présente étude. Les résultats obtenus à partir du modèle ont montré que, indépendamment du substitut utilisé, les résultats de simulation sont pratiquement identiques. Ce qui nous permet de dire que les données thermochimiques du butyrate de méthyle et du butanoate de méthyle sont interchangeable comme substituts pour la simulation de la combustion du Biodiesel NMEB.

Une dernière étude de sensibilité a également été effectuée pour l'évaluation de quatre substituts du biodiesel pour la simulation de la combustion dans un moteur diesel du biodiesel d'ester de méthyle et du biodiesel d'ester d'éthyle à base d'huile de friture usagée. Les données thermodynamiques des substituts étaient celles du butanoate de méthyle, du butyrate d'éthyle, du décanoate de méthyle et du 9-décénoate de méthyle. Il a été constaté que :

- Chaque substitut prédit de manière adéquate la pression maximale et le rendement thermique pour chaque régime du moteur et chaque biodiesel;
- le butanoate de méthyle a montré un meilleur niveau de précision pour les trois paramètres simulés, 1,27% et 0,94% pour la pression maximale, 1,46% et 3,55% pour le rendement thermique et 6,65% et 3,84% pour les émissions de NOx pour le biodiesel d'ester de méthyle et le biodiesel d'ester d'éthyle à base d'huile de friture usagée respectivement, suivis par le décanoate de méthyle, le 9-décénoate méthyl et le butyrate d'éthyle;
- Sur les quatre substituts, que butanoate de méthyle a prédit les émissions de NOx à 6,65% et 3,84% en moyenne de précision pour le biodiesel d'ester de méthyle et le biodiesel d'ester d'éthyle à base d'huile de friture usagée respectivement, les trois autres substituts ont présenté des erreurs moyennes supérieures à 50%;

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Nous avons développé dans ce travail un modèle 0D phénoménologique devant répondre aux problèmes spécifiques mis en évidence sur la modélisation 0D de la combustion Diesel tels que décrits dans les travaux récents, à savoir:

- Un compromis devait être trouvé entre l'utilisation de grande table thermochimique et un nombre élevé de zone pouvant permettre l'atteinte d'une grande précision, mais avec un coût en temps d'exécution et mémoire élevé, et l'utilisation de tables thermochimiques réduites et un faible nombre de zone pouvant entraîner une précision moindre pour un temps d'exécution réduit;
- La réduction du nombre de constantes expérimentales de réglage pour le modèle sous divers régimes;
- La prédiction précise de la cinétique de combustion permettant de s'affranchir des lissages expérimentaux souvent nécessaires à la prévision des variations de pression;
- La capacité de prédire pour différents régimes de fonctionnement et conditions environnementales les paramètres moteurs de performance et d'émission sans aucun réglage ou ajustement de calibrage par rapport à la charge;
- la capacité de simuler le fonctionnement des moteurs diesel alimentés au Biodiesel.

Pour pouvoir répondre à cette problématique, nous avons subdivisé notre travail en deux parties et quatre chapitres dont la quintessence était la suivante.

La première partie de travail portait sur l'état de l'art concernant notre thème et une étude théorique portant sur la modélisation 0D thermodynamique.

Le chapitre premier a porté la présentation des moteurs diesel, leur régulation et principalement les différents modèles adoptés pour leur simulation à savoir, les modèles multidimensionnels, 0D thermodynamiques et 0D phénoménologiques. Nous avons mis en évidence dans ce chapitre les avantages et faiblesses des différents types d'approches en termes de modélisation des moteurs diesel. Nous y avons fait état du compromis entre vitesse et précision des calculs devant être atteint pour la modélisation. Il a été constaté que l'approche 0D phénoménologique répond mieux à ce compromis et permet un champ d'étude assez large concernant la modélisation des phénomènes inhérents à la combustion dans les moteurs Diesel. Toutefois, nous avons également constaté dans ce chapitre la rareté de recherche sur les modèles 0D phénoménologique appliqués au Biodiesel.

Le chapitre deuxième de cette thèse a porté sur une étude de modélisation 0D thermodynamique de la combustion diesel appliquée au carburant Biodiesel. Ce chapitre se justifie par la nécessité de faire une étude préliminaire sur ces modèles afin d'en déterminer les limites pour une intégration phénoménologique subséquente. Pour ce faire, nous nous sommes penchés sur une approche classique 0D thermodynamique, se basant sur la méthode de Wiebe. Nous avons constaté une bonne capacité de prédictibilité du modèle en termes de détermination des paramètres macroscopiques de la combustion diesel ainsi que pour son application au Biodiesel. Néanmoins certaines limitations ont été constatées pour cette approche classique telles que, le modèle ne permet pas d'évaluer l'influence de l'injection sur la qualité de l'injection, les émissions ne peuvent être calculées de manière détaillée, le dégagement de chaleur nécessite un lissage par rapport aux courbes expérimentales. Plusieurs hypothèses simplificatrices sont utilisées, notamment celles considérant le l'indice adiabatique et les coefficients de pertes comme constants, le calcul des émissions polluantes ne pouvant donc pas être précis. Ces limitations ci-dessus évoquées ont formé l'ossature de la deuxième partie de cette thèse, qui porte sur l'élaboration d'un modèle 0D phénoménologique basé sur une approche en chimie tabulée.

La deuxième partie de cette thèse a porté sur l'élaboration d'un modèle 0D phénoménologique pouvant être appliqué à la combustion du Biodiesel. Pour ce faire, cette partie a été subdivisée en deux chapitres, le premier portant sur le choix d'une démarche de la simulation de la combustion à partir de la chimie tabulée, le second portant sur l'élaboration finale du modèle 0D phénoménologique.

Le troisième chapitre de cette thèse nous a permis de faire un choix en termes mécanismes de simulation de la combustion diesel avec une prise en compte plus détaillée des réactions chimiques y ayant cours. Nous pour cela implémenté et comparé deux approches basées sur la chimie tabulée à savoir, l'approche de Krieger et Borman et l'approche de Ferguson et Olikara. Les méthodes ont été comparées sur deux aspects principaux à savoir, sur le plan de vitesse d'exécution et sur le plan de la précision des calculs ; nous avons constaté que les deux modèles ont montré une bonne prévisibilité des performances du moteur, le second donnant une meilleure précision de calcul ainsi que plus de détails sur les paramètres thermodynamiques caractéristiques des gaz de combustion dans le cylindre. Le premier modèle testé a montré une plus grande vitesse de calcul comptant pour environs 75 fois le temps réel d'un cycle complet à régime nominal tandis que le second a présenté une vitesse de calcul

d'environ le double du premier modèle. Nous avons effectué comme choix final le modèle de Ferguson et Olikara, ceci dû au fait qu'en termes de précision des calculs et quantité d'informations susceptibles d'être obtenues, il est plus satisfaisant par rapport à celui de Krieger et Borman. Sa relative faible vitesse de calcul n'est que marginale si on tient compte de l'applicabilité finale du modèle.

Le quatrième chapitre de cette thèse présente, l'ossature finale du modèle 0D phénoménologique qui est l'objet principal de ce travail. Dans ce chapitre, nous avons présenté le couplage qui a été effectué entre les différents sous modèles qui constituent notre modèle 0D phénoménologique. Les sous modèles qui constituent ce dernier prennent en compte le processus d'injection de pulvérisation et d'évaporation du carburant, la cinétique de combustion basé sur le modèle de Ferguson et Olikara et enfin la détermination des émissions d'oxydes d'azote à partir du mécanisme de Zeldovich. Ce chapitre montre également le processus de validation du modèle final à l'aide de moyens expérimentaux locaux fournis par le Centre de Formation des Techniques Armées (CFTA) d'Ekounou et à l'aide du logiciel diesel Rk. L'évaluation de la performance de ce modèle pour la modélisation de la combustion du Biodiesel dans un moteur diesel a également été présentée dans ce chapitre ; les biodiesels utilisés ici étaient des biodiesel à base d'ester de méthyle de Neem, d'ester de méthyle et d'ester d'éthyle d'huile de friture usagée. Les résultats de la simulation et de la validation ont été jugés satisfaisants. Il a aussi été démontré dans ce chapitre que le butanoate de méthyle représente le substitut adéquat pour toute simulation 0D phénoménologique de la combustion du biodiesel dans un moteur diesel.

Contribution scientifique du travail

Les principales contributions scientifiques de ce travail ont principalement répondu aux problèmes identifiés au début de notre travail, par conséquent elles peuvent être présentées comme suit :

- Concernant la recherche d'un compromis entre le temps d'exécution, la précision et la simplicité du modèle, le modèle 0D phénoménologique prédit la pulvérisation et l'évaporation du combustible, la combustion dans le cylindre et les émissions de NOx avec un temps d'exécution moyen pour une simulation de cycle complet d'environ 26 s;
- Concernant la réduction du nombre de constantes empiriques à ajusté pour différents régimes, le modèle se repose essentiellement sur les données thermochimiques du combustibles, une fois ces données correctement fournies, le modèle a montré une

bonne capacité de simulation des phénomènes de combustion indifféremment du régime. La cinétique de combustion n'est pas dépendante de la mesure expérimentale de la durée de combustion, le modèle calcule la durée de combustion directement à partir du modèle d'injection et pulvérisation, le modèle ne s'appuie donc que très peu sur les paramètres expérimentaux, lorsque le modèle est calibré pour un régime spécifique, il peut être utilisé pour les autres;

- Le modèle 0D phénoménologique a montré une bonne capacité de simulation des paramètres moteurs pour un fonctionnement au Biodiesel, la prédiction de l'injection et de la pulvérisation du Biodiesel dans la chambre de combustion est en accord avec les observations expérimentales recensées récemment. La prédiction des émissions de NOx pour le Biodiesel confirme également l'adéquation du modèle pour la simulation de la combustion du Biodiesel dans un moteur diesel.
- Il a été également démontré que les substituts de biodiesel tels que le butanoate de méthyle, le butyrate d'éthyle, le décanoate de méthyle et le 9-décénoate de méthyle peuvent être utilisés de manière efficace pour la prédiction de la combustion des Biodiesel dans un moteur diesel pour le modèle ici présenté. Le butanoate de méthyle présentant ici une meilleure précision notamment pour la simulation des émissions polluantes telles que le NOx.

Perspectives

Le modèle élaboré dans cette thèse permet la simulation pour régime variable des moteurs diesel à injection directe, ainsi que la prédiction des émissions de NOx avec un temps d'exécution relativement faible. L'algorithme d'implémentation du modèle est relativement simple et il permet une versatilité en termes de type de carburant alimentant le moteur. La chimie tabulée incluse dans le modèle 0D phénoménologique permet de simuler avec une bonne précision la combustion des Biodiesels dans les moteurs diesel. Le travail présenté dans cette thèse ouvre néanmoins d'autres perspectives de développement que nous énumérons ci-après :

- Nous envisageons d'étendre notre modèle à la simulation des émissions de suies et autres émissions polluantes telles que le CO₂, CO et hydrocarbures imbrulés, ainsi qu'à une application du modèle en régime transitoire ;

- Une recherche plus poussée sera effectuée sur la méthode numérique de résolution des équations d'équilibre chimique, en effet l'on s'est rendu compte que le modèle admet un seuil de valeurs applicable pour les pas de temps de calcul. Il serait également intéressant de prendre en compte dans les recherches futures l'influence du pas de temps physique et du pas de temps réel sur les résultats du modèle. La flexibilité du modèle pourrait être améliorée en ces termes ;
- Nous envisageons également à plus long termes de généraliser le modèle actuel à d'autres types de combustion tels que la combustion Diesel en mode homogène (HCCI) et mode dual fuel qui nécessitent un contrôle de l'injection très précis. Le modèle devra s'étendre également vers la simulation des systèmes d'injection plus avancés, tels les systèmes d'injection à rampe commune. On pourra également proposer une prise en compte des systèmes de préchauffage pour une amélioration du démarrage des moteurs diesels alimentés au biodiesel ;
- Nous envisageons également la mise en place d'un logiciel « stand-alone » basé sur le présent modèle, ayant pour objectif le diagnostic et l'optimisation des moteurs diesel, et qui se positionnera également comme un outil d'aide au dimensionnement des moteurs diesel hautement concurrentiel. Ceci nécessitant également en perspective l'utilisation d'outils de calculs plus avancés, tel que le calcul parallèle.

Le travail réalisé au cours de ces années de thèse a contribué au lancement d'une nouvelle thématique au sein d'une équipe de recherche pluridisciplinaire dirigée par le Professeur Robert Nzungwa. Les travaux présentés dans ce mémoire sont la première phase d'un projet de large ampleur s'étalant de l'optimisation des moteurs diesel et leur diagnostic à l'aide modèles mathématiques prédictifs, jusqu'à la conception et la réalisation d'un moteur diesel entièrement conçu et construit par les Camerounais fonctionnant au gasoil conventionnel et au Biodiesel. A ce titre, nous espérons que notre contribution sera utile au prolongement des travaux de recherche consacrés à l'industrialisation, la mécanisation et la motorisation de l'économie camerounaise.

REFERENCES

- [1] S. Jindal, B. P. Nandwana, N. S. Rathore, and V. Vashistha, "Experimental investigation of the effect of compression ratio and injection pressure in a direct injection diesel engine running on Jatropha methyl ester," *Applied Thermal Engineering*, vol. 30, pp. 442–448, 2010.
- [2] P. K. Sahoo and L. M. Das, "Combustion analysis of Jatropha, Karanja and Polanga based biodiesel as fuel in a diesel engine," *Fuel*, pp. 994–999, 2009.
- [3] B. Tesfa, R. Mishra, C. Zhang, F. Gu, and A. D. Ball, "Combustion and performance characteristics of CI (compression ignition) engine running with biodiesel," *Energy*, vol. 51, pp. 101–115, 2013.
- [4] M. Balat and H. Balat, "A critical review of bio-diesel as a vehicular fuel," *Energy Conversion and Management*, vol. 49, pp. 2727–2741, 2008.
- [5] A. Demirbas, "Progress and recent trends in biodiesel fuels," *Energy Conversion and Management*, vol. 50, pp. 14–34, 2009.
- [6] A. N. Ozsensen and M. Canakci, "Determination of performance and combustion characteristics of a diesel engine fueled with canola and waste palm oil methyl esters," *Energy Conversion and Management*, pp. 108–116, 2011.
- [7] M. Lapuerta, O. Armas, and J. Rodriguez-Fernandez, "Effect of biodiesel fuels on diesel engine emissions," *Progress in Energy and Combustion Science*, pp. 198–223.
- [8] X. Wang, K. Li, and W. Su, "Experimental and numerical investigations on internal flow characteristics of diesel nozzle under real fuel injection conditions," *Experimental Thermal and Fluid Science*, pp. 204–211, 2012.
- [9] W. Xiangang, H. Zuohua, K. Olawole, Z. Wu, and N. Keiya, "Experimental and analytical study on biodiesel and diesel spray characteristics under ultra-high injection pressure," *International Journal of Heat and Fluid Flow*, pp. 659–666, 2010.
- [10] J. B. Heywood, *Internal Combustion Engine Fundamentals* New York, USA: McGraw-Hill, Inc., 1988.

- [11] A. S. Kuleshov, "Multi-Zone DI Diesel Spray Combustion Model for Thermodynamic Simulation of Engine with PCCI and High EGR Level," *SAE Int. J. Engines*, vol. 2, pp. 1811-1834, 2009.
- [12] N. Bordet, C. Caillol, P. Higelin, and V. Talon, "A Physical 0D Combustion Model Using Tabulated Chemistry with Presumed Probability Density Function Approach for Multi-Injection Diesel Engines," *SAE Technical Paper* 2010.
- [13] R. Diesel, "Die Entstehung des Dieselmotors [L'apparition du moteur Diesel]," 1913.
- [14] K. H. Neumann, D. Never, and H. Stehr, "The new 3 cylinder diesel engine with high pressure injection from Volkswagen," in *19th International Vienna Engine Symposium*, Vienne, 1998.
- [15] F. J. Wallace, "The theory of compression ignition engines," in *Diesel Engine Reference Book*, ed: Butterworth-Heinemann, 1999.
- [16] P. A. Aghav and Lakshminarayanan., *Modelling Diesel Combustion* vol. Mechanical Engineering Series: Springer, 2010.
- [17] B. C. Stefanovskii, *Essais des moteurs à combustion interne (Traduit du Russe), Испытания двигателей внутреннего сгорания*: Mashinostroenie, 1972.
- [18] I. Y. Raikov, *Essai des moteurs à combustion interne (Traduit du Russe), Испытания двигателей внутреннего сгорания*: Visha Skola, 1975.
- [19] P. M. Günter, C. Schwarz, and R. Teichmann, *Combustion Engines Development: Mixture Formation, Combustion, Emissions and Simulation*. Londre: Springer, 2012.
- [20] S. Chandorkar, A. Dani, and P. Lakshminarayanan, "Effects of injection parameters, fuel quality and ambient on the ignition delay and the location of the flame Kernel in a diesel spray in a quiescent chamber," 1988.
- [21] D. Assanis, Filipi, ZS, S. Fiveland, and M. Syrimis, "A Predictive Ignition Delay Correlation Under Steady-State and Transient Operation of a Direct Injection Diesel Engine," 1999.
- [22] F. Pischinger, E. Scheid, and U. Reuter, "Influences of fuel quality and injection parameters on self ignition of sprays," Varsovie, 1987.
- [23] S. Jindal, "Effect of injection timing on combustion and performance of a direct injection diesel engine running on Jatropha methyl ester," *INTERNATIONAL JOURNAL OF ENERGY AND ENVIRONMENT*, vol. 2, pp. 113-122, 2011.
- [24] S. Kook, C. Bae, and P. Miles, "The influence of charge dilution and injection timing on low temperature diesel combustion and emissions," 2005.

- [25] A. A. Gavrilov, M. C. Ignatov, and V. V. Efros, *Calcul des moteurs à piston (Traduit du Russe)*: Université d'Etat de Vladimir, 2003.
- [26] N. Bordet, "Modélisation 0D/1D de la Combustion Diesel : du Mode Conventionnel au Mode Homogène ", 'ORLÉANS, Thèse de Doctorat2011.
- [27] O. Grondin, "Modélisation du Moteur à Allumage par Compression dans la Perspective du Contrôle et du Diagnostic ", Rouen, Thèse de Doctorat2004.
- [28] B. Challen and R. Baranescu, *Diesel Engine Reference Book*. Delhi, Inde: Reed Educational and Professional Publishing Ltd, 1999.
- [29] B. Courtois, A. Lebrech, F. Diebold, and D. Lafon, "Moteurs Diesel et Pollution en Espace Confiné," *Hygiène et sécurité du travail - Cahiers de notes documentaires*, vol. 4, 2005.
- [30] Q. Xin, *Diesel Engine System Design*: Woodhead Publishing In Mechanical Engineering, 2011.
- [31] F. Willems, E. Doosje, F. Engels, and X. Seykens, "Cylinder pressure-based control in heavy-duty EGR diesel engines using a virtual heat release and emission sensor," *SAE Paper*, 2010.
- [32] EN, "Automotive fuels - Diesel - Requirements and test methods," NORME EN 590:2004, 2004.
- [33] ISO, ",ISO3834:2004 Determination of density or relative density -- Capillary-stoppered pycnometer and graduated bicapillary pycnometer methods," Norme2004.
- [34] X. Wang, Z. Huang, O. A. Kutu, W. Zhang, and K. Nishida, "An experimental investigation on spray, ignition and combustion characteristics of biodiesels," *Proceedings of the Combustion Institute*, pp. 2071–2077, 2011.
- [35] ASTM, "Standard test method for cetane number of diesel fuel oil," NORME2007.
- [36] G. Knothe, J. V. Gerpen, and J. Krahl, *The Biodiesel Handbook*. Champaign: AOCS Press, 2005.
- [37] J. Xue, T. E. Grift, and A. C. Hansen, "Effect of biodiesel on engine performances and emissions," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, pp. 1098–1116, 2011.
- [38] A. P. Sathiyagnanam and C. G. Saravanan, "Experimental Studies on the Combustion of A Direct Injection Engine Fueled with SCR," in *Proceedings of the World Congress on Engineering 2011 Vol III WCE 2011, July 6 - 8, 2011, London, U.K.*, London, 2011.
- [39] Y. Shi, H. W. Ge, and R. D. Reitz, *Computational Optimization of Internal Combustion Engines*. Londre, Angleterre: Springer, 2011.

- [40] J. Blazek, *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications*: Elsevier, 2001.
- [41] D. C. Wilcox, *Turbulence Modeling for CFD*. La Canada, California, USA: Library of Congress Cataloging in Publication Data, 1994.
- [42] M. Schraad, "Kiva," in *Site Web Kiva*, ed, 2008.
- [43] OpenCFD, "OpenFoam, The Open CFD Toolbox," ed, 2004.
- [44] S. Som, D. E. Longman, A. I. Ramírez, and S. K. Aggarwal, "A comparison of injector flow and spray characteristics of biodiesel with petrodiesel," *Fuel*, pp. 4014–4024, 2010.
- [45] P. Carlsson, "Tutorial dieselFoam," in *CFD with OpenSource software*, 2009.
- [46] G. Stiesch, P. Eckert, and S. Rakowski, "Phenomenological Combustion Models," in *Combustion Engines Development; Mixture Formation, Combustion, Emissions and Simulation*, Springer, Ed., ed: Springer, 2012.
- [47] R. B. Borman and G. L. Krieger, "The computation of apparent heat release for internal combustion," in *Proceedings of Diesel Gaz Power*, 1966.
- [48] N. Watson, A. Pilley, and M. Marzouk, "combustion correlation for Diesel engine simulation," vol. 1, 1980.
- [49] J. Galindo, H. Climent, B. Plá, and V. D. Jiménez, "Correlations for wiebe function parameters for combustion simulation in two stroke small engines," *Applied Thermal Engineering*, vol. 31, pp. 1190–1199, 2011.
- [50] J. Borg and A. Alkidas, "Investigation of the Effects of Autoignition on the Heat Release Histories of a Knocking SI Engine Using Wiebe Functions," *SAE Technical Paper*, 2008.
- [51] J. I. 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*, 2010.
- [52] N. Miyamoto, T. Chikahisa, T. Murayama, and R. Sawyer, "Description and analysis of diesel engine rate of combustion and performance using Wiebe's functions," *SAE paper*, 1985.
- [53] Yasar, H., H. S. Soyhan, H. Walmsley, B. Head, and C. Sorousbay, "Double-Wiebe function: An approach for single-zone HCCI engine modeling," *Applied Thermal Engineering*, vol. 28, pp. 1284–1290, 2008.

- [54] F. Chmela, G. Orthaber, and S. W., "Die Vorausberechnung des Brennverlaufs von Dieselmotoren mit direkter Einspritzung auf der Basis des Einspritzverlaufs," *MTZ - Motortechnische Zeitschrift*, vol. 59, pp. 484-492, 1998.
- [55] F. Chmela, D. Dimitrov, G. Pirker, and A. Wimmer, "Konsistente Methodik zur Vorausrechnung der Verbrennung in Kolbenkraftmaschinen," *MTZ - Motortechnische Zeitschrift*, vol. 67, pp. 468-474, 2006.
- [56] C. R. Ferguson and T. K. Allan, *Internal Combustion Engines: Applied Thermosciences, 2nd Edition*: Wiley, 2000.
- [57] G. Woschni, "A universally applicable equation for the instantaneous heat transfer coefficient in the internal combustion engine," *SAE Paper*, vol. 76, 1967.
- [58] G. F. Hohenberg, "Advanced approaches for heat transfer calculations," *SAE Paper*, 1979.
- [59] M. J. Jennings and T. Morel, "A computational study of wall temperature effects on engine heat transfer," *SAE paper*, 1991.
- [60] S. Imabepu, H. Shimonosono, Y. Hirano, K. Fujigaya, and K. Inoue, "Development of a method for predicting heat rejection to the engine coolant'," *SAE paper*, 1993.
- [61] P. Zeng and D. N. Assanis, "Cylinder pressure reconstruction and its application to heat transfer analysis," *SAE paper*, 2004.
- [62] P. A. Lakshminarayanan and Y. V. Aghav, *Modelling Diesel Combustion*: Springer, 2010.
- [63] F. Dos Santos and L. Le Moyne, "Spray Atomization Models in Engine Applications, from Correlations to Direct Numerical Simulations," *Oil & Gas Science and Technology*, vol. 66, pp. 801 - 822, Septembre 2011.
- [64] J. C. Dent, "Basis for the Comparison of Various Experimental Methods for Studying Spray Penetration," *SAE paper*, 1971.
- [65] H. Hiroyasu, T. Kadota, and M. Arai, "Supplementary Comments: Fuel Spray Characterization in Diesel Engines," 1985.
- [66] H. Hiroyasu and M. Arai, "Structures of Fuel Sprays in Diesel," *SAE International*, 1990.
- [67] J. D. Naber and D. L. Siebers, "Effects of Gas Density and Vaporization on Penetration and Dispersion of Diesel Sprays," *SAE Paper*, 1996.
- [68] D. L. Siebers, "Scaling Liquid-Phase Fuel Penetration in Diesel Sprays Based on Mixing-Limited Vaporization," *SAE Papers*, 1999.

- [69] M. Elkotb, "Fuel Atomization for Spray Modelling," *Progress in Energy and Combustion Science*, pp. 61-90, 1982.
- [70] J. S. Wu, K. H. Su, P. M. Kuo, and 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*, 2003.
- [71] A. M. Kanury, *Introduction to combustion phenomena*. New York: Gordon and Breach, 1988.
- [72] I. Glassman, *Combustion*: Academic Press, 1987.
- [73] R. Clift, J. R. Grace, and M. E. Weber, *Bubbles/Drops and Particles*. New York: Academic Press, 1978.
- [74] F. A. Williams, *Combustion Theory*. Reading: Addison Wesley, 1965.
- [75] A. E. Godsave, "Studies of the Combustion of Drops in a Fuel Spray - The Burning of Single Drops of Fuel," in *Fourth Symposium (International) on Combustion. In: The Standing Committee of Combustion Symposia.*, Baltimore, 1953, pp. 818-830.
- [76] D. B. Spalding, "The Combustion of Liquid Fuels.," in *Fourth Symposium (International) on Combustion (Combustion and Detonation Waves)*. Cambridge, 1953, pp. 847-864.
- [77] N. F. Razleytsev, *Combustion simulation and optimization in diesels (In Russian)*. Kharkiv: Vischa Shkola, 1980.
- [78] S. Ikura, T. Kadota, and H. Hiroyasu, "Ignition Delay of Fuel Sprays in a Constant Volume Bomb," *Trans. of Japan Society of Mechanical Engineers*, pp. 41-345, 1975.
- [79] H. O. Hardenberg and F. W. 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," 1979.
- [80] H. Fujimoto, "Illumination Delay in Diesel Spray," *JSAE Paper*, p. 149, 1980.
- [81] E. Sher, *Air Pollution from Internal Combustion Engines Pollutant Formation and Control*. San Diego: ACADEMIC PRESS, 1998.
- [82] G. A. Lavoie, J. B. Heywood, and J. C. Keck, "Experimental and Theoretical Study of Nitric Oxide Formation in Internal Combustion Engines," *Combustion Science and Technology*, vol. 1, pp. 13-326, 1970.
- [83] M. C. Drake and R. J. Blint, "Calculations of NO_x Formation Pathways in Propagating Laminar, High Pressure Premixed CH₄/Air Flames.," *Combust. Sci. Tech*, pp. 261-285, 1991.

- [84] G. A. Lavoie and P. N. Blumberg, "Measurements of NO Emissions from a Stratified Charge Engine: Comparison of Theory and Experiment.," *Combust. Sci. Tech.*, pp. 25-37, 1973.
- [85] G. A. Lavoie and P. N. Blumberg, "A Fundamental Model for Predicting Fuel Consumption, NOx and HC Emissions of the Conventional Spark-Ignition Engine," *Combust. Sci. Tech.*, pp. 225-258, 1980.
- [86] R. J. Kee, M. E. Coltrin, and P. Glarborg, *Chemically Reacting Flow*: Wiley Interscience, 2003.
- [87] D. Jung and D. N. Assanis, "Multi-Zone DI Diesel Spray Combustion Model for Cycle Simulation Studies of Engine Performance and Emissions," *SAE Technical Paper*, 2001.
- [88] C. D. Rakopoulos, D. C. Rakopoulos, E. G. Giakoumis, and D. C. Kyritsis, "Validation and sensitivity analysis of a two zone Diesel engine model for combustion and emissions prediction," *Energy Conversion and Management*, vol. 45, pp. 1471–1495, 2004.
- [89] A. Dulbecco, F. Lafossas, and T. Poinso, "A 0D Phenomenological Approach to Model Diesel HCCI Combustion with Multi-Injection Strategies Using Probability Density Functions and Detailed Tabulated Chemistry," *International Journal of Engines*, vol. 1, 2009.
- [90] A. E. Catania, R. Finesso, and E. Spessa, "Predictive zero-dimensional combustion model for DI diesel engine feed-forward control," *Energy Conversion and Management*, vol. 52, pp. 3159–3175, 2011.
- [91] C. D. Rakopoulos, K. A. Antanopoulos, and D. C. Rakopoulos, "Development and application of multi-zone model for combustion and pollutants formation in direct injection diesel engine running with vegetable oil or its bio-diesel," *Energy Conversion and Management*, vol. 48, 2007.
- [92] S. Awad, E. G. Varuvel, K. Loubar, and M. Tazerout, "Single zone combustion modeling of biodiesel from wastes in diesel engine," *Fuel*, vol. 106, pp. 558–568, April 2013.
- [93] A. Dulbecco, F. A. Lafossas, G. Mauviat, and T. J. Poinso, "A New 0D Diesel HCCI Combustion Model Derived from a 3D CFD Approach with Detailed Tabulated Chemistry," *Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP*, vol. 64, pp. 259-284, 2009.

- [94] D. I. Kolaitis and M. A. Founti, "A tabulated chemistry approach for numerical modeling of diesel spray evaporation in a "stabilized cool flame" environment," *Combustion and Flame*, vol. 145, pp. 259–271, April 2006.
- [95] Fisher, W. J. Pitz, H. J. Curran, and C. K. Westbrook, "Detailed Chemical Kinetic Mechanisms for Combustion of Oxygenated Fuels," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 28, pp. 1579-1586, 2000.
- [96] I. I. Wiebe, *Novelty on working process of Internal Combustion Engine (Speed of Combustion and Working Process in Engine) (In Russian)* Sverdlovsk: MachGiz, 1962.
- [97] N. K. Dyechenko, I. Y. Magidovich, and B. P. Pugatchev, "Approximation of heat release characteristics in the cylinders of diesel engines (Traduit du Russe)," *Energomashinostroyeniye*, p. 310, 1969.
- [98] N. K. Dyachenko, *Theory of internal combustion engines(Traduit du Russe): Mashinostroenie*, 1974.
- [99] N. Miyamoto, T. Chikahisa, T. Murayama, and R. Sawyer, "Description and analysis of diesel engine rate of combustion and performance using Wiebe's functions," *SAE paper*, 1985.
- [100] A. Bilcan, M. Tazerout, O. Le Corre, and A. Ramesh, "Ignition delay in dual-fuel engines: an extended correlation for gaseous fuels. ," in *Proceedings of the Spring Technical Conference of the Internal Combustion Engine Division of ASME*, Philadelphia, 2001.
- [101] M. Canova, R. Garcin, S. Midlam-Mohler, Y. Guezennec, and G. Rizzoni, "A control-oriented model of combustion process in a HCCI diesel engine.," in *Proceedings of the 2005 American Control Conference*, Portland, 2005.
- [102] C. Ngayihi Abbe, V., E. R. Nzengwa, R. Danwe, Z. M. Ayissi, and M. Obonou, "Simulation of a DI Diesel Engine Performance Fuelled on Biodiesel Using a Semi-Empirical 0D Model," *Energy and Power Engineering*, pp. 596-603, 2013.
- [103] J. B. Heywood, *Internal Combustion Engine Fundamentals*. New York: McGraw-Hill, 1988.
- [104] D. L. M. Sahoo P.K., "Combustion analysis of Jatropha, Karanja and Polanga based biodiesel as fuel in a diesel engine," *Fuel*, pp. 994–999, 2009.
- [105] B. Tesfa, R. F. Mishra, A. Gu, and B. D., "Combustion Characteristics of CI Engine Running with Biodiesel Blends," in *International Conference on Renewable Energies and Power Quality*, Las Palmas de Gran Canaria, 2011.

- [106] a. H. Hardenberg H.O., FW, "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," 1979.
- [107] F. V. Aghav, P. A. Lakshminarayanan, V. Sujeet, M. N. Kumar, C. Kumar, and M. K. G. Babu, "Predicting Ignition delay and HC emission for DI diesel engine encompassing EGR and Oxygenated fuels," *SAE Technical Paper*, 2008.
- [108] N. Watson and M. S. Janota, *Turbocharging the internal combustion engine*. New York: The Macmillan Press, 1982.
- [109] A. Y. V. Lakshminarayanan P.A., *Modelling Diesel Combustion*: Springer, 2010.
- [110] D. R. Buttsworth, "Spark Ignition Internal Combustion Engine Modeling using Matlab," Faculty of Engineering & Surveying Technical Reports, University of Southern Queensland 2002.
- [111] A. T. K. Ferguson C.R., *Internal Combustion Engines: Applied Thermosciences, 2nd Edition*: Wiley, 2000.
- [112] B. G. Olikara C., "A Computer Program for Calculating Properties of Equilibrium Combustion Products with Some Applications to I.C. Engines," *SAE Technical Paper*, 1975.
- [113] Fisher., W. J. Pitz, H. J. Curran, and C. K. Westbrook, "Detailed Chemical Kinetic Mechanisms for Combustion of Oxygenated Fuels " in *PROCEEDINGS OF THE COMBUSTION INSTITUTE*, 2000, pp. 1579-1586.
- [114] NIST, "JANAF Thermochemical Tables," NSRDS-NBS 37, 1971.
- [115] Y. Xiao, "Thermodynamic properties for engine combustion simulations," 1989.
- [116] Z. H. Wang X., Olawole A. K., Wu Z., Keiya N., "An experimental investigation on spray, ignition and combustion characteristics of biodiesels," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 11, pp. 2071–2077, 2011.
- [117] M. Z. A. M. N. Azuwir, and A. H. Adom, "Modelling and Validation of Automotive Engine Fuelled with Palm Oil Biodiesel," *IACSIT International Journal of Engineering and Technology*, vol. 3, pp. 582-586, 2011.
- [118] A. S. Lyshevsky, *Fuel atomization in marine diesels(In Russian)*. Leningrad, 1971.
- [119] N. F. Razleytsev, *Combustion simulation and optimization in diesels(In Russian)*. Kharkov, USSR: Vischa shkola, 1980.
- [120] F. I. Abramchuk, A. P. Marchenko, N. F. Razleytsev, and E. I. Tretiak, *Modern Diesel Engines: Increase of Fuel Economy and durability*. Kiev: Technika, 1992.

- [121] Z. M. Ayissi, A. O. L. M., C. Salem, G. J., and M. Obonou, "Experimental studies on the combustion characteristics and performance of a direct injection engine fueled with Neem Methyl Ester Biodiesel," presented at the Proceeding of the National Symposium CCSSE2014 University of Douala, Douala, 2014.
- [122] Fisher, W. J. Pitz, H. J. Curran, and C. K. Westbrook, "DETAILED CHEMICAL KINETIC MECHANISMS FOR COMBUSTION OF OXYGENATED FUELS," in *PROCEEDINGS OF THE COMBUSTION INSTITUTE*, 2000, pp. 1579-1586.
- [123] E. Goos, "Transfer of Extended Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database," in *Extended Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database*, Haifa, 2009.
- [124] E. Goos, A. Burcat, and B. Ruscic, "Transfer of Extended Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database," in *Extended Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database*, Haifa, 2009.
- [125] S. L. Chang, W. P. Sung, and K. Sang, "An Experimental Study on the Atomization and Combustion Characteristics of Biodiesel-Blended Fuels," *Energy Fuels*, vol. 5, pp. 2201-2208, 2005.
- [126] M. Lapuerta, O. Armas, and J. Rodriguez-Fernandez, "Effect of biodiesel fuels on diesel engine emissions," *Progress in Energy and Combustion Science*, pp. 198–223, 2007.
- [127] J. Xuea, T. E. Grift, and A. C. Hansena, "Effect of biodiesel on engine performances and emissions," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 15, pp. 1098–1116, February 2011.
- [128] M. H. Hakka, P.-A. Glaude, O. Herbinet, and F. Battin-Leclerc, "Experimental study of the oxidation of large surrogates for diesel and biodiesel fuels," *Combustion and Flame*, vol. 156, pp. 2129-2144, 11// 2009.
- [129] W. Wang and M. A. Oehlschlaeger, "A shock tube study of methyl decanoate autoignition at elevated pressures," *Combustion and Flame*, vol. 159, pp. 476-481, 2// 2012.
- [130] S. Zhang, L. J. Broadbelt, I. P. Androulakis, and M. G. Ierapetritou, "Comparison of Biodiesel Performance Based on HCCI Engine Simulation Using Detailed Mechanism with On-the-fly Reduction," *Energy & Fuels*, vol. 26, pp. 976-983, 2012/02/16 2012.
- [131] A. M. El-Nahas, M. V. Navarro, J. M. Simmie, J. W. Bozzelli, H. J. Curran, S. Dooley, *et al.*, "Enthalpies of Formation, Bond Dissociation Energies and Reaction Paths for the

- Decomposition of Model Biofuels: Ethyl Propanoate and Methyl Butanoate†," *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 111, pp. 3727-3739, 2007/05/01 2007.
- [132] W. Liu, R. Sivaramakrishnan, M. J. Davis, S. Som, D. E. Longman, and T. F. Lu, "Development of a reduced biodiesel surrogate model for compression ignition engine modeling," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 34, pp. 401-409, // 2013.
- [133] O. Herbinet, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook, "Detailed chemical kinetic mechanism for the oxidation of biodiesel fuels blend surrogate," *Combustion and Flame*, vol. 157, pp. 893-908, 5// 2010.
- [134] Z. Luo, M. Plomer, T. Lu, S. Som, D. E. Longman, S. M. Sarathy, *et al.*, "A reduced mechanism for biodiesel surrogates for compression ignition engine applications," *Fuel*, vol. 99, pp. 143-153, 9// 2012.
- [135] H. Sanli, M. Canakci, E. Alptekin, A. Turkcan, and A. N. Ozsezen, "Effects of waste frying oil based methyl and ethyl ester biodiesel fuels on the performance, combustion and emission characteristics of a DI diesel engine," *Fuel*, vol. 159, pp. 179-187, 11/1/ 2015.
- [136] G. Labeckas and S. Slavinskas, "The effect of rapeseed oil methyl ester on direct injection Diesel engine performance and exhaust emissions," *Energy Conversion and Management*, vol. 47, pp. 1954-1967, 8// 2006.
- [137] C. D. Rakopoulos, K. A. Antonopoulos, D. C. Rakopoulos, D. T. Hountalas, and E. G. Giakoumis, "Comparative performance and emissions study of a direct injection Diesel engine using blends of Diesel fuel with vegetable oils or bio-diesels of various origins," *Energy Conversion and Management*, vol. 47, pp. 3272-3287, 11// 2006.
- [138] J. Yang, M. Johansson, C. Naik, K. Puduppakkam, V. Golovitchev, and E. Meeks, "3D CFD Modeling of a Biodiesel-Fueled Diesel Engine Based on a Detailed Chemical Mechanism," SAE Technical Paper 0148-7191, 2012.
- [139] S. Som and D. Longman, "Numerical study comparing the combustion and emission characteristics of biodiesel to petrodiesel," *Energy & Fuels*, vol. 25, pp. 1373-1386, 2011.
- [140] I. Uryga-Bugajska, M. Pourkashanian, D. Borman, E. Catalanotti, and C. Wilson, "Theoretical investigation of the performance of alternative aviation fuels in an aero-engine combustion chamber," *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering*, vol. 225, pp. 874-885, 2011.

- [141] J. L. Brakora, Y. Ra, and R. D. Reitz, "Combustion model for biodiesel-fueled engine simulations using realistic chemistry and physical properties," *SAE International Journal of Engines*, vol. 4, pp. 931-947, 2011.
- [142] K. Seshadri, T. Lu, O. Herbinet, S. Humer, U. Niemann, W. J. Pitz, *et al.*, "Experimental and kinetic modeling study of extinction and ignition of methyl decanoate in laminar non-premixed flows," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 32, pp. 1067-1074, // 2009.
- [143] S. M. Sarathy, M. J. Thomson, W. J. Pitz, and T. Lu, "An experimental and kinetic modeling study of methyl decanoate combustion," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, pp. 399-405, // 2011.
- [144] P. Diévar, S. H. Won, S. Dooley, F. L. Dryer, and Y. Ju, "A kinetic model for methyl decanoate combustion," *Combustion and Flame*, vol. 159, pp. 1793-1805, 5// 2012.
- [145] C. Y. Choi and R. D. Reitz, "Modeling the Effects of Oxygenated Fuels and Split Injections on DI Diesel Engine Performance and Emissions," *Combustion Science and Technology*, vol. 159, pp. 169-198, 2000/10/01 2000.

ANNEXES

- ANNEXE A - ARTICLES ISSUS DE LA THESE
- ANNEXE B - CORRELATION DE WOSCHNI
- ANNEXE C - ELEMENTS DE LA MATRICE JACOBIENNE [D]
- ANNEXE D - DONNEES CALIBREES DE DIESEL RK
- ANNEXE E - CODE MATLAB POUR LA DISTRIBUTION DU SPRAY
- ANNEXE F - CODE MATLAB MODIFIE POUR LES EMISSIONS DE NOX
- ANNEXE G - USER GUIDE RK-DIESEL
- ANNEXE H - STANDARD GAZOLE

ANNEXE A

ARTICLES ISSUS DE LA THESE

ARTICLE JOURNAL OF COMBUSTION

Research Article

Comparative Numerical Study of Four Biodiesel Surrogates for Application on Diesel 0D Phenomenological Modeling

Claude Valery Ngayihi Abbe,^{1,2} Raidandi Danwe,^{1,3} and Robert Nzungwa^{1,2}

¹National Advanced School of Engineering, University of Yaounde, P.O. Box 337, Yaounde, Cameroon

²Faculty of Industrial Engineering, University of Douala, P.O. Box 2701, Douala, Cameroon

³Higher Institute of the Sahel, University of Maroua, P.O. Box 46, Maroua, Cameroon

Correspondence should be addressed to Claude Valery Ngayihi Abbe; ngayihiclaude@yahoo.fr

Received 19 November 2015; Revised 1 February 2016; Accepted 2 February 2016

Academic Editor: Yiguang Ju

Copyright © 2016 Claude Valery Ngayihi Abbe et al. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

To meet more stringent norms and standards concerning engine performances and emissions, engine manufacturers need to develop new technologies enhancing the nonpolluting properties of the fuels. In that sense, the testing and development of alternative fuels such as biodiesel are of great importance. Fuel testing is nowadays a matter of experimental and numerical work. Researches on diesel engine's fuel involve the use of surrogates, for which the combustion mechanisms are well known and relatively similar to the investigated fuel. Biodiesel, due to its complex molecular configuration, is still the subject of numerous investigations in that area. This study presents the comparison of four biodiesel surrogates, methyl-butanoate, ethyl-butyrate, methyl-decanoate, and methyl-9-decanoate, in a 0D phenomenological combustion model. They were investigated for in-cylinder pressure, thermal efficiency, and NO_x emissions. Experiments were performed on a six-cylinder turbocharged DI diesel engine fuelled by methyl ester (MEB) and ethyl ester (EEB) biodiesel from wasted frying oil. Results showed that, among the four surrogates, methyl butanoate presented better results for all the studied parameters. In-cylinder pressure and thermal efficiency were predicted with good accuracy by the four surrogates. NO_x emissions were well predicted for methyl butanoate but for the other three gave approximation errors over 50%.

1. Introduction

Extensive studies regarding biodiesel combustion as an alternative for conventional diesel fuel have been performed recently [1, 2]. Experimental studies are more and more accompanied by numerical studies to better understand the physical phenomena involved in the combustion process in diesel engines when fuelled by biodiesel [3–5]. Numerical studies in diesel combustion are often performed using surrogates for which combustion kinetic mechanisms are well established and are comparable to those of investigated fuels [6–9].

Biodiesel combustion is often found difficult to model, due to the diversity of its sources and also the complexity molecular structure of biodiesel components which consist of saturated and unsaturated fatty acid [10]. This makes the modeling procedure for such type of fuel complex. It is widely

accepted that numerical simulations provide a useful tool for engine conception and optimization. It is therefore important to identify suitable biodiesel surrogates that can be used for simulation purpose.

Most of the numerical works in literature present the use of methyl butanoate and methyl decanoate [11–14] as surrogates for biodiesel fuel. These works are mostly about 1D and 3D CFD detailed combustion kinetic modeling. As it was stated in previous researches CFD modeling presents the disadvantage of a high computer cost [15]. This is where 0D phenomenological modeling can be effective, because it is less time-consuming.

Investigations on different biodiesel surrogates for 0D modeling are somehow scarce. Galle et al. [16] performed a numerical analysis of a simplified spray model for different biodiesel surrogates. Their work showed that the choice of the surrogates is of high importance, and the fuel properties are

highly influencing the model performance. Stagni et al. [17] proposed a reduced kinetic model for biodiesel fuel for application on 0D model. They showed that the mechanism, when applied, permits a considerable time saving in computation.

Som et al. [18] performed four different chemical kinetic models for 0D and 3D simulation; the kinetic models were mainly based on mixture of two different set of surrogates: (a) methyl decanoate, methyl 9 decanoate, and n-heptane and (b) methyl butanoate and n-heptane. Only species mole fraction simulations were performed using 0D modeling. All the mechanisms performed very well against experimental data but at the expense of computer cost.

The objective of this study is to compare 4 different methyl and ethyl ester surrogates in strictly 0D phenomenological modeling for biodiesel combustion simulation purpose. The surrogates will be compared according to computed maximum pressure, NO_x emission, and thermal efficiency.

2. Material and Methods

2.1. 0D Model Governing Equations. The model used in this study was validated in a previous study [15]; we are presenting here some fundamental relationships for a better understanding of the computing methodology.

2.1.1. Spray Submodel. Injection and spray are modeled using the theory described by Lyshevsky and Razleytsev [19–22]. The diesel jet is assumed to be constituted of two phases, an initial and a base, which are separated by a transitory characteristic length which is computed as follows:

$$L_b = C_S d_n W_e^{0.25} M^{0.4} \rho_l^{-0.6}, \quad (1)$$

where $t_b = L_b^2/B_s$ is the characteristic time (s), C_S is a weighing coefficient, d_n is injector nozzle diameter, W_e is the Webber number, and M is an a dimensional criterion [22].

Webber number is computed by

$$W_e = \frac{U_0^2 \rho_f d_c}{\sigma_f}, \quad (2)$$

where U_0 is the spray initial velocity given by

$$U_0 = \frac{24q_c \text{RPM}}{0.75\rho_f \pi d_c^2 i_c \varphi_{inj}}; \quad (3)$$

q_c is the fuel mass flow rate in Kg/cycle; ρ_f is the fuel density kg/m^3 ; d_c is the injector nozzle diameter in mm; φ_{inj} is the injection duration in crank angle degrees; i_c is the number of injector holes.

2.1.2. Evaporation Submodel. The injected fuel is scattered into fine droplets after the transition length; these droplet are evaporating at a given rate which is proportional to their size [20, 21]. The fuel spray is divided in two zones: In the first zone, droplets are concentrated behind the front flame area. In the second zone, droplets have reached the front flame and the evaporation is turbulent.

The size of the pulverized droplets is evaluated for each zone using the Sauter mean diameter, calculated by

$$d_{32} = 1.7d_n M^{0.0733} (We \cdot \rho)^{-0.266}, \quad (4)$$

where $\rho = \rho_a/\rho_l$ is the ratio of density between air and liquid fuel.

Droplets are assumed to evaporate following the d^2 law [23] for which the evaporation rate for a given droplet is

$$d_i^2 = d_0^2 - Kt, \quad (5)$$

where d_0 represents the droplet diameter after breakup (see (4)) and d_i the diameter of the same droplet at time t . K is the evaporation constant:

$$K = 10^6 \cdot \frac{4N_u D_p P_s}{\rho_l}, \quad (6)$$

where N_u is the Nusselt number for diffusion processes, D_p is the diffusion constant for fuel vapor, and P_s is the fuel saturated vapor pressure.

Combustion duration, which is going to be used as an entry data for heat release rate calculation, is calculated in seconds by

$$\tau_{ev} = \frac{A_z}{(b_{it} \lambda^{0.6})}, \quad (7)$$

where $b_{it} = K/d_{32}^2$ is the relative evaporation constant and λ the excess air coefficient. A_z is a fitting weighing coefficient where its value varies from 4 to 12 [21].

2.1.3. Ignition Delay and Heat Release Submodels. Ignition delay is computed using the following correlation [24]:

$$\text{ID} = \left[0.36 + 0.22\overline{U}_p \right] \exp \left[E_a \cdot \left(\frac{1}{RT_{im} \varepsilon^{n_c - 1}} - \frac{1}{17190} \right) + \left(\frac{21.2}{P_{im} \varepsilon^{n_c} - 12.4} \right)^{0.63} \right], \quad (8)$$

where E_a is the fuel activation energy which is computed by $E_a = 1310000/(\text{CN} + 25)$, CN is the fuel cetane number, \overline{U}_p is the engine piston speed, T_{im} and P_{im} are, respectively, the temperature and pressure at the intake manifold, ε is the engine's compression ratio, and n_c is the polytropic exponent for compression.

The fuel burnt ratio at any crank angle $x = f(\varphi)$ is computed using a double Wiebe function [25, 26] by

$$x = \beta x_p + (1 - \beta) x_d, \quad (9)$$

where x_p and x_d represent the fuel burnt ratio for premixed and diffusion combustion phases and β represents the fraction of injected fuel during premixed phase.

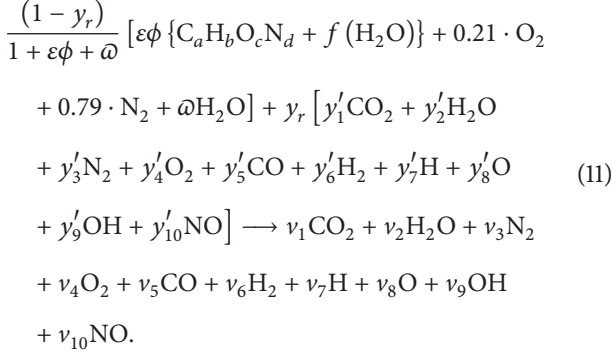
For each combustion phase we can write

$$x_i = 1 - \exp \left[-a_i \left(\frac{\varphi - \varphi_{comb}}{\Delta\varphi} \right)^{m_i+1} \right], \quad (10)$$

where a_i and m_i are Wiebe weighing coefficients; φ_{comb} is the start of ignition corresponding angle; $\Delta\varphi$ is the combustion duration in degrees of rotation.

The heat release rate is computed by derivation of x about φ .

2.1.4. Thermodynamic Combustion Modeling. The governing chemical reaction used in the study is given by



The mass fraction of each species is calculated based on equilibrium assumption [27]. The following equations were exploited to determine the thermodynamic state of each surrogate of chemical formula $C_a H_b O_c N_d$, such as specific heat, enthalpy, and entropy depending on the temperature of the combusting mixture. Consider

$$\begin{aligned} \frac{c_p}{R} &= a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 \frac{1}{T^2}; \\ \frac{h}{RT} &= a_1 + \frac{a_2}{2} T + \frac{a_3}{4} T^2 + \frac{a_4}{4} T^3 + \frac{a_5}{5} \frac{1}{T^2} + a_6 \frac{1}{T}; \\ \frac{s}{R} &= a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3}{2} T^2 + \frac{a_4}{3} T^3 + \frac{a_5}{4} \frac{1}{T^2} + a_7. \end{aligned} \quad (12)$$

The fitting coefficients a_1 to a_7 are the first seven Chemkin NASA coefficients of specific species in the therm.dat Chemkin file. The reduced thermodynamic data are incorporated into the code and are in compliance with the temperature range that our study is covering.

The thermodynamic tables used for air properties about temperature are taken from the Chemkin data base for temperature range of 300 to 5000 K [28].

The thermodynamic state of the burning mixture is calculated at each time step as a function of each species mass fraction issued from combustion products.

The molar enthalpy of the mixture is then calculated by

$$\bar{h} = \sum y_i \bar{h}_i + \bar{h}_f y_f, \quad (\text{kJ/kmol}); \quad (13)$$

its molar entropy is calculated by

$$\bar{s} = (s_f - \ln y_f) y_f + \sum (s_i - \ln y_i) y_i, \quad \text{kJ/kmolK}; \quad (14)$$

the heat capacity of the mixture is given by

$$\bar{c}_p = c_{p_f} y_f + \sum c_{p_i} y_i. \quad (15)$$

Specific volume and internal energy of the mixture are computed by

$$\begin{aligned} u &= h - RT, \\ v &= R \frac{T}{P}, \end{aligned} \quad (16)$$

where R is the universal gas constant and h_f, s_f, c_{p_f} are, respectively, the enthalpy, entropy, and specific of the fuel (surrogate) involved in reaction (11).

The above determined parameters with equilibrium hypothesis permit the determination of in-cylinder burning mixture pressure and temperature. The following three equations give relationships for the internal energy, specific volume, entropy, enthalpy, and specific heat with temperature and pressure as functions of the crank angle [24, 25]:

$$\begin{aligned} \frac{du}{d\theta} &= \left(c_p - \frac{pv}{T} \frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right) \frac{dT}{d\theta} \\ &\quad - \left(v \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} + \frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right) \right) \frac{dp}{d\theta}; \end{aligned} \quad (17)$$

$$\frac{dv}{d\theta} = \frac{v}{T} \frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \frac{dT}{d\theta} - \frac{v}{p} \frac{\partial \ln v}{\partial \ln p} \frac{dp}{d\theta}; \quad (18)$$

$$\frac{ds}{d\theta} = \left(\frac{c_p}{T} \right) \frac{dT}{d\theta} - \frac{v}{T} \frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \frac{dp}{d\theta}, \quad (19)$$

with $(\partial h / \partial T)_P = c_p$.

Considering the in-cylinder burning gases made of two zones (unburned and burned), variations of in-cylinder pressure and temperature about the crank angle for unburned and burned gases are given by the following relations:

$$\frac{dp}{d\varphi} = \frac{A + B + C}{D + E}; \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_b}{d\varphi} &= \frac{-h(\pi b^2/2 + 4V/b) x^{1/2} T_b - T_w}{vmc_{p_b} x} \\ &\quad + \frac{v_b}{c_{p_b}} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right) \left(\frac{dp}{d\varphi} \right) \\ &\quad + \frac{h_{cu} - h_{cb}}{xc_{p_b}} \left[\frac{dx}{d\varphi} - x - x^2 \frac{C}{\omega} \right]; \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_u}{d\varphi} &= \frac{-h(\pi b^2/2 + 4V/b) x^{1/2} T_u - T_w}{vmc_{p_u} x} \\ &\quad + \frac{v_u}{c_{p_u}} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right) \left(\frac{dp}{d\varphi} \right) \\ &\quad + \frac{h_{cu} - h_{cb}}{xc_u} \left[\frac{dx}{d\varphi} - x - x^2 \frac{C}{\omega} \right], \end{aligned} \quad (22)$$

with

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{1}{m} \left(\frac{dV}{d\phi} + \frac{VC_{\text{blowby}}}{\omega} \right); \\
 B &= h \frac{(dV/d\phi + VC_{\text{blowby}}/\omega)}{\omega m} \left[\frac{v_b}{c_{pb}} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} x^{1/2} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{T_b - T_w}{T_b} + \frac{v_u}{c_{pu}} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} (1 - x^{1/2}) \frac{T_u - T_w}{T_u} \right]; \\
 C &= -v_b - v_u \frac{dx}{d\phi} - v_b \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{h_{cu} - h_{cb}}{c_{pb} T_b} \left[\frac{dx}{d\phi} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{(x - x^2) C_{\text{blowby}}}{\omega} \right]; \\
 D &= x \left[\frac{v_b^2}{c_{pb} T_b} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + \frac{v_b}{P} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \right]; \\
 E &= 1 - x \left[\frac{v_u^2}{c_{pu} T_u} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + \frac{v_u}{p} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln p} \right],
 \end{aligned} \tag{23}$$

where h_{cb} and h_{cu} are heat transfer coefficients to the wall, respectively, for burned and unburned zones [29]. x is the fraction of burned fuel. m is the fuel mass, v is the specific volume, ω is the engine speed in rad/s, and C_{blowby} is the blow by coefficient.

Nonlinear equations (17)–(22) are simultaneously solved using Runge-Kutta method (Dormand-Prince).

2.1.5. Nitric Oxides Emission Submodels. NO_x emissions are computed using the extended Zeldovich [30, 31] where NO_x formation rate is computed as

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = \frac{2C_1 [1 - ([\text{NO}] / [\text{NO}]_e)]}{1 + ([\text{NO}] / [\text{NO}]_e) C_2}, \tag{24}$$

where $C_1 = K_{f,1} [\text{O}]_e [\text{N}_2]_e$ and

$$C_2 = \frac{C_1}{K_{r,2} [\text{NO}]_e [\text{O}]_e K_{r,3} [\text{NO}]_e [\text{H}]_e}; \tag{25}$$

$[X]$ is the concentration of a given species X and $[X]_e$ the concentration of the same species at equilibrium. $K_{f,i}$ and $K_{r,2}$, respectively, represent the forward and reverse rate of each reaction involved in the NO_x formation mechanism.

2.2. Biodiesel Surrogates. The surrogates used in this study are, respectively, methyl butanoate, ethyl butyrate, methyl decanoate, and methyl 9 decenoate. These four surrogates were chosen firstly because of the high amount of work on their combustion kinetics and study as biodiesel surrogates [33–36] and secondly for the widely availability of their validated reduced mechanisms data. The thermodynamic data for each surrogate were taken, respectively, from the work of Liu et al. [37] for methyl butanoate, Herbinet et al. for methyl decanoate [38], Luo et al. [39] for methyl 9 decenoate, and the work of Goos et al. [40] for methyl butyrate.

TABLE 1: Engine specification [32].

Engine	6 liters, Ford cargo
Type	Direct injection, turbocharged
Number of cylinders	6
Bore × stroke (mm)	104.0–114.9
Compression ratio	16.4 : 1
Maximum power (kW)	136 at 2400 rpm
Maximum brake torque (Nm)	650 at 1400 rpm
Injection pump	In-line type
Injection opening pressure	197 bar

TABLE 2: Fuel properties [32].

Property	Methyl ester biodiesel	Ethyl ester biodiesel
Density (15°C)	884.3 kg/m ³	883.4 kg/m ³
Viscosity (40°C)	4.5 mm ² /s	4.9 mm ² /s
Lower heating value	37.33 kJ/kg	37.550 kJ/kg
Cetane number	54.9	53.5

TABLE 3: Values of start of injection angle [32].

Fuel	Start of injection (BTDC, °CA)		
	1100 rpm	1400 rpm	1700 rpm
Methyl ester biodiesel	14	13	12
Ethyl ester biodiesel	14	13.25	12.25

2.3. Engine Specification and Characteristic of the Biodiesel. The experimental analysis against which our study is about was performed by Sanli et al. [32]. Combustion and emission characteristics of a six-cylinder turbocharged DI diesel engine were investigated for methyl ester biodiesel and ethyl ester biodiesel from wasted frying oil. The characteristics of the engine are given in Table 1 and that of biodiesel fuels is given in Table 2.

The numerical study was performed for three different engine speeds for each surrogate: 1100 rpm, 1400 rpm, and 1700 rpm. The injection timing for each biodiesel was in accordance with the measured start of injection angle during experimental setup; the values are given in Table 3. The measured crank angle at which the fuel line reached the injector needle opening pressure was taken as the injection timing angle or start of injection (SOI).

The biodiesel surrogates were numerically investigated for three parameters:

- (i) Maximum pressure.
- (ii) NO_x emission.
- (iii) Thermal efficiency.

3. Results and Discussions

3.1. Evaluation of Thermodynamic Properties of Biodiesel Surrogates. A first evaluation was performed for each surrogate according to (12). Equations (13) to (15) permit the computation of the mixture enthalpy, specific heat, and entropy as a function of the surrogate used. These values are used for

TABLE 4: Comparative experimental and simulated results for methyl ester biodiesel and each surrogate at 1100 rpm.

RPM	MEB					
1100	P_{\max} (Mpa)	Error	NO_x (ppm)	Error	Thermal eff	Error
Experimental	9.68		1400		39.00%	
(1) Methyl butanoate	9.79	1.15%	1408	0.57%	38.06%	02.41%
(2) Ethyl butyrate	9.10	5.97%	101.2	92.77%	33.07%	15.21%
(3) Methyl decanoate	9.58	0.98%	532	62.00%	34.87%	10.59%
(4) Methyl 9 decenoate	9.14	5.51%	142.2	89.84%	33.43%	14.28%

TABLE 5: Comparative experimental and simulated results for methyl ester biodiesel and each surrogate at 1400 rpm.

RPM	MEB					
1400	P_{\max} (Mpa)	Error	NO_x (ppm)	Error	Thermal eff	Error
Experimental	9.89		1550		42%	
(1) Methyl butanoate	9.79	0.96%	1511	2.52%	41.82%	0.43%
(2) Ethyl butyrate	9.09	8.06%	108	93.03%	36.22%	13.76%
(3) Methyl decanoate	9.57	3.22%	578	62.71%	38.43%	8.50%
(4) Methyl 9 decenoate	9.13	7.61%	152.2	90.18%	36.63%	12.79%

TABLE 6: Comparative experimental and simulated results for methyl ester biodiesel and each surrogate at 1700 rpm.

RPM	MEB					
1700	P_{\max} (Mpa)	Error	NO_x (ppm)	Error	Thermal eff	Error
Experimental	9.75		1525		43%	
(1) Methyl butanoate	9.91	1.69%	1782	16.85%	43.66%	1.53%
(2) Ethyl butyrate	9.20	5.57%	128.3	91.59%	37.75%	12.21%
(3) Methyl decanoate	9.70	0.49%	686.6	54.98%	40.16%	6.60%
(4) Methyl 9 decenoate	9.25	5.09%	180	88.20%	38.18%	11.21%

the computation of the in-cylinder pressure and temperature; (21) and (22) show that in-cylinder temperature for each zone is linearly proportional to the mixture enthalpy and inversely proportional to the mixture specific heat. The variation of the mixture's entropy (19) is a nonlinear function of the temperature variation as well as the variation of in-cylinder pressure. Thus, the variation of surrogate's properties values such as enthalpy, entropy, and specific heat as a function of temperature could be a good indicator of its suitability for our 0D modeling.

Figure 1 presents the variation of enthalpy against temperature for each surrogate. The curve shapes are similar and the residual values are higher for methyl butanoate and methyl 9 decenoate, with maximum difference of 36.59 kJ/kmol. Concerning entropy and specific heat (Figures 2 and 3), we also notice a similar curve shape with higher residual values between methyl butanoate and methyl decanoate, maximum values which are, respectively, of 112 kJ/kmolK and 50.1 kJ/kmolK for entropy and specific heat. The residuals presented in the plots are the differences between each computed parameter for each surrogate for a given temperature. The plot presents the higher residual values. These results show that some notable differences shall be expected in terms of thermodynamic computed values of combusting species during the simulation for each surrogate, which is the subject of the discussion in the next sections.

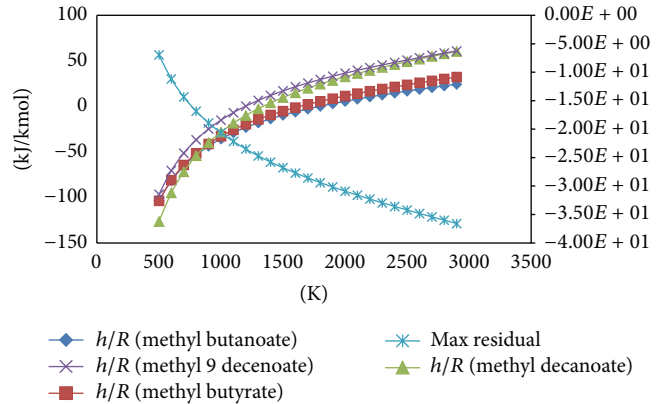


FIGURE 1: Variation of enthalpy against temperature for biodiesel surrogates.

3.2. Biodiesel Surrogates Numerical Investigation. Maximum pressure, thermal, and efficiency and NO_x emission were computed for methyl ester biodiesel and ethyl ester biodiesel from waste fried oil. The four mentioned biodiesel surrogates thermodynamic data were used in the simulation at 1100, 1400, and 1700 rpm. Results of simulations and subsequent error evaluations are displayed in Tables 4, 5, 6, 7, 8, and 9, respectively, at 1100, 1400, and 1700 rpm. Errors are evaluated as relative errors between measured and computed values.

TABLE 7: Comparative experimental and simulated results for ethyl ester biodiesel and each surrogate at 1100 rpm.

RPM	EEB					
1100	P_{\max} (Mpa)	Error	NO_x (ppm)	Error	Thermal eff	Error
Experimental	9.86		1410		41%	
(1) Methyl butanoate	9.86	0.06%	1420	0.71%	38.04%	7.22%
(2) Ethyl butyrate	9.16	7.02%	102.3	92.74%	33.07%	19.34%
(3) Methyl decanoate	9.65	2.09%	537	61.91%	34.85%	15.00%
(4) Methyl 9 decenoate	9.21	6.56%	143.9	89.79%	33.42%	18.49%

TABLE 8: Comparative experimental and simulated results for ethyl ester biodiesel and each surrogate at 1400 rpm.

RPM	EEB					
1400	P_{\max} (Mpa)	Error	NO_x (ppm)	Error	Thermal eff	Error
Experimental	9.78		1510		42.50%	
(1) Methyl butanoate	9.77	0.04%	1507	0.20%	41.81%	1.62%
(2) Ethyl butyrate	9.35	4.40%	131.6	91.28%	35.32%	16.89%
(3) Methyl decanoate	9.84	0.63%	692.3	54.15%	37.42%	11.95%
(4) Methyl 9 decenoate	9.39	3.90%	184.9	87.75%	35.70%	16.00%

TABLE 9: Comparative experimental and simulated results for ethyl ester biodiesel and each surrogate at 1700 rpm.

RPM	EEB					
1700	P_{\max} (Mpa)	Error	NO_x (ppm)	Error	Thermal eff	Error
Experimental	9.7		1500		43.50%	
(1) Methyl butanoate	9.96	2.73%	1659	10.60%	44.29%	1.82%
(2) Ethyl butyrate	9.47	2.34%	158	89.47%	36.93%	15.10%
(3) Methyl decanoate	9.98	2.89%	831	44.60%	39.24%	9.79%
(4) Methyl 9 decenoate	9.52	1.86%	221.9	85.21%	37.35%	14.14%

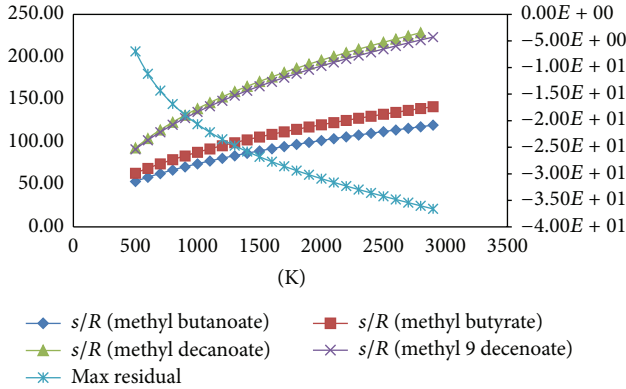


FIGURE 2: Variation of entropy against temperature for biodiesel surrogates.

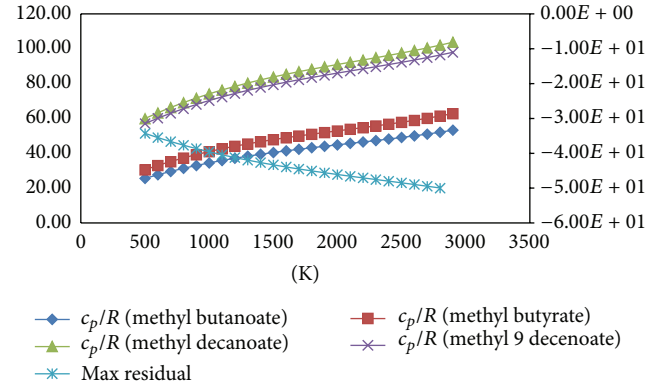


FIGURE 3: Variation of specific against temperature for biodiesel surrogates.

3.2.1. Methyl Ester Biodiesel Numerical Investigation

Maximum in-Cylinder Pressure. Maximum pressure is fairly well predicted for each surrogate. However methyl butanoate shows a better prediction rate of an average of 1.27% accuracy across the different rpm. The other surrogates present an average accuracy of 6.53%, 1.56%, and 6.07% for ethyl butyrate, methyl decanoate, and methyl 9 decenoate, respectively. In Figure 4 it can be seen that experimental and simulated

pressure traces closely match for each biodiesel surrogates compared to MEB experimental data. Better pressure simulations are achieved by methyl butanoate and methyl decanoate compared to the other two.

Thermal Efficiency. Thermal efficiency provides a good insight of fuel heat input to mechanical energy output during combustion cycle, especially when evaluating alternative fuel [41, 42]. The simulation results show that methyl butanoate

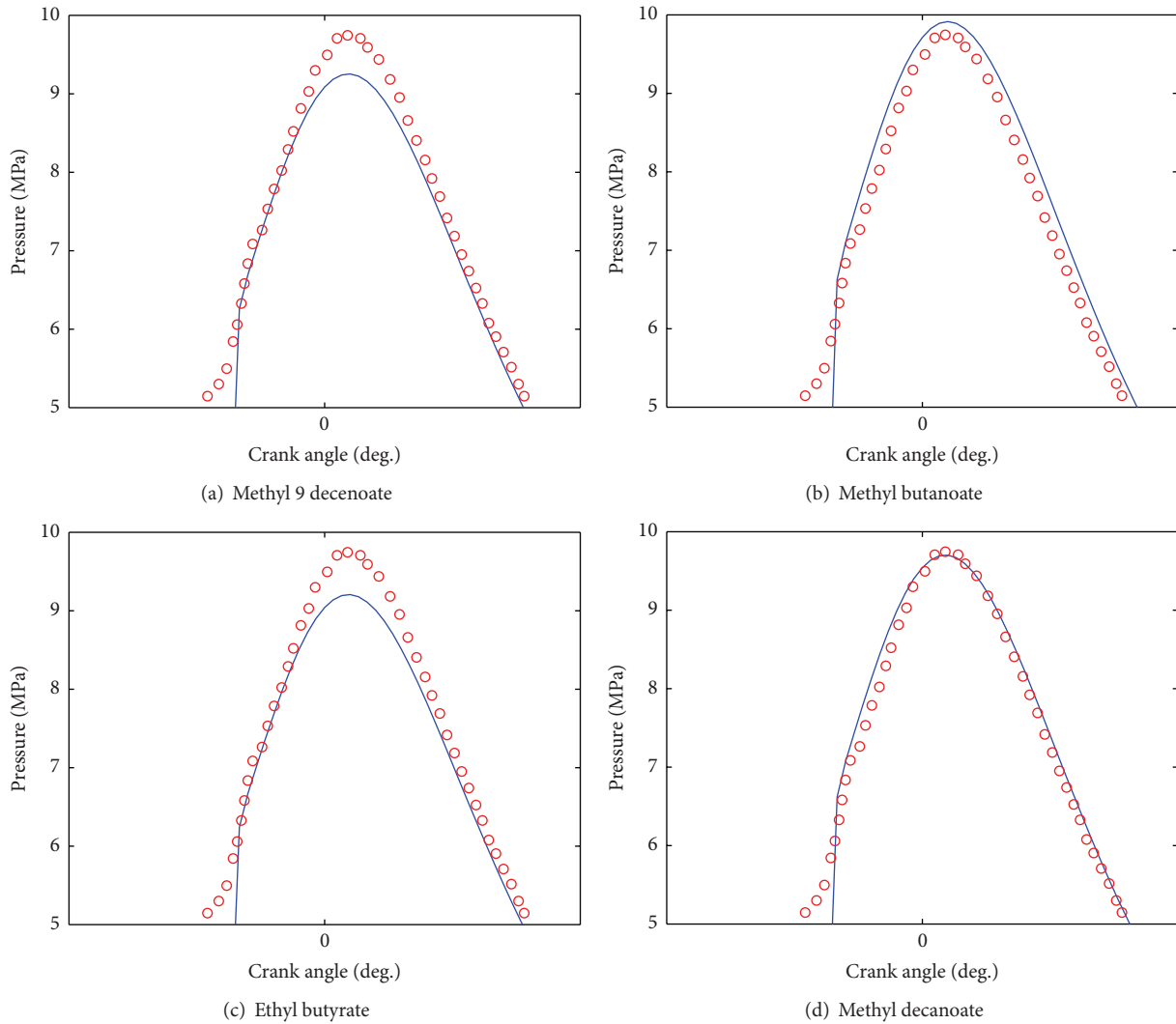


FIGURE 4: Experimental and simulated pressure trace at 1700 RPM for MEB for each surrogate.

gives the better approximation with an average error of 1.46%. Ethyl butyrate, methyl decanoate, and methyl 9 decanoate present average errors below 15%, which are acceptable for engine simulation. Methyl decanoate presents an approximation of average 8.56%, followed by methyl 9 decanoate at 12.76% and ethyl butyrate at 13.76%.

NO_x Emissions. NO_x emissions are simulated using the extended Zeldovich mechanism [30, 43]; the simulation results present a good agreement with experimental results from methyl butanoate with an average of 6.65% error across the three regimes. Methyl decanoate, methyl 9 decanoate, and ethyl butyrate however poorly predict NO_x emissions with respective average errors of 59.9%, 92.46%, and 89.49%.

3.2.2. Ethyl Ester Biodiesel Numerical Investigation

Maximum in-Cylinder Pressure. Maximum pressure was calculated through simulation in the 0D phenomenological model, as well as in the case of methyl ester biodiesel.

Maximum pressure is also fairly well predicted for each surrogate. Methyl butanoate shows a better prediction rate of an average of 0.94% accuracy across the different rpm, which is slightly better than during the methyl ester biodiesel simulation. Simulations present an average accuracy of 4.59%, 1.87%, and 4.10% for ethyl butyrate, methyl decanoate, and methyl 9 decanoate, respectively. Figure 5 shows that experimental and simulated pressure traces closely match for each biodiesel surrogate compared to EEB experimental data. Better pressure simulations are achieved by methyl butanoate and methyl decanoate compared to the other two, just as in the case of MEB.

Thermal Efficiency. The simulation results present a better approximation for methyl butanoate with an average error of 3.55%. Ethyl butyrate, methyl decanoate, and methyl 9 decanoate present average errors close and over 15%, which is below acceptable for engine simulation. Methyl decanoate presents an approximation of average 12.25%, followed by methyl 9 decanoate at 16.21% and ethyl butyrate at 17.11%.

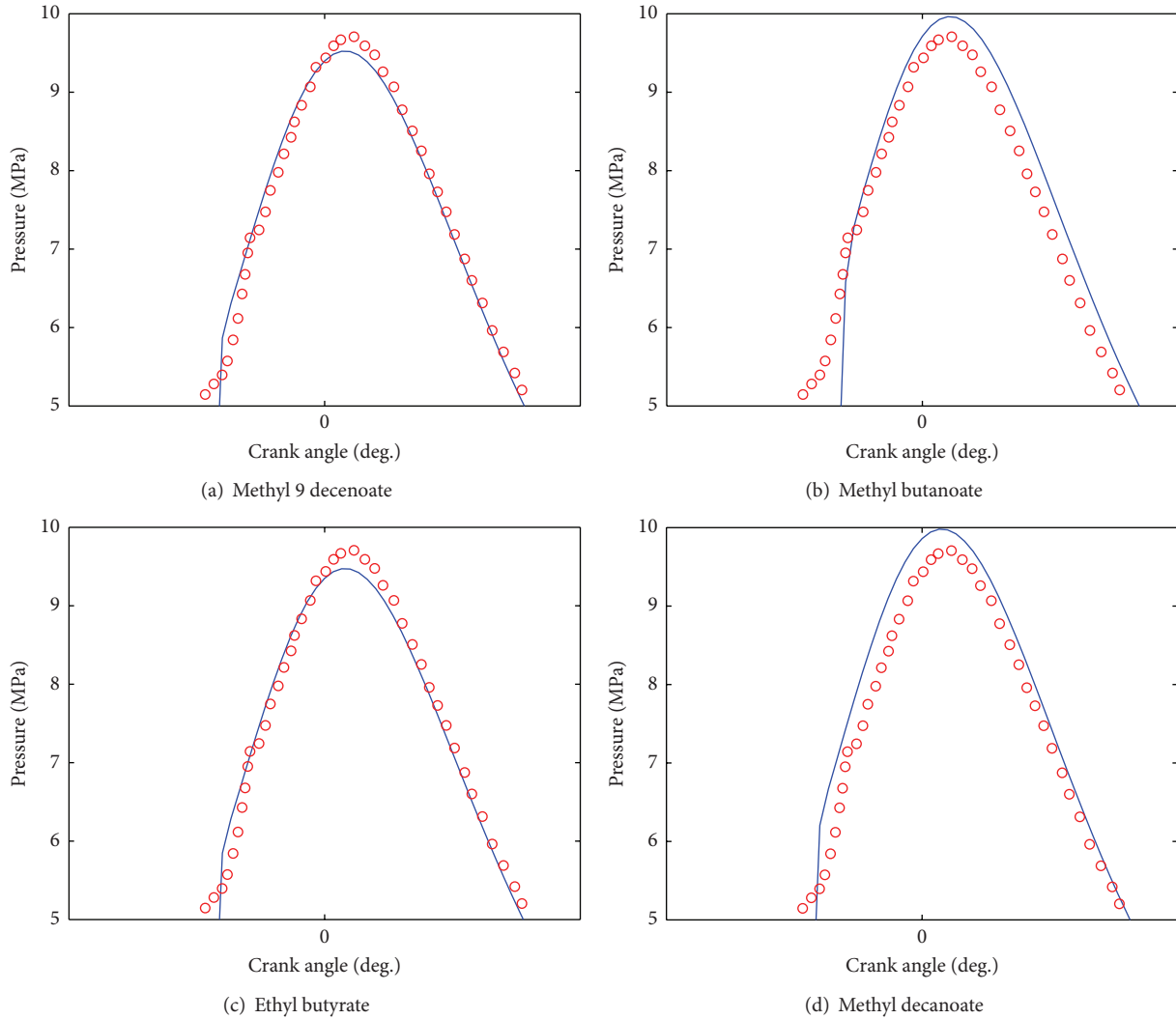


FIGURE 5: Experimental and simulated pressure trace at 1700 RPM for EEB for each surrogate.

NO_x Emissions. As it was the case for MEB, the simulation results present a good agreement with experimental results from methyl butanoate with an average of 3.84% error across the three regimes, which is an improvement compared to MEB simulation. Methyl decanoate, methyl 9 decanoate, and ethyl butyrate, just as it was the case for MEB, poorly predict *NO_x* emissions with respective average errors of 53.56%, 87.59%, and 91.17%.

3.3. Discussion. The approximations results are similar, whether we are investigating methyl ester biodiesel or ethyl ester biodiesel. For each case, pressure trace and thermal efficiency are fairly well predicted. Ethyl butyrate and methyl 9 decanoate present the worst results in terms of simulation precision.

The overall trend observed from the various simulation results is that methyl butanoate gives better predictions of engine parameters compared to other surrogates; this is in accordance with its high rate of usage as a surrogate for biodiesel in 3D and 1D simulation studies [4, 5, 44]. However,

this result is somehow contradictory with comments from Brakora et al. [45] and Hakka et al. [33] that say that methyl butanoate is not a particular good surrogate for biodiesel. While this was explained by the fact that methyl butanoate possesses a short alkylic chain and therefore cannot adequately capture ignition delay and species history, it should be noted that most of these findings were done under 3D or experimental investigations. Our 0D model only uses Chemkin Nasa coefficients to compute in-cylinder thermodynamic parameters; the ignition delay is computed as a function of the investigated biodiesel cetane number. The reaction kinetic in our model is therefore independent of the surrogate thermodynamic data.

The three other surrogates present overall good approximation for thermal efficiency and maximum pressure. Methyl decanoate presents better simulation approximation errors than ethyl butyrate and methyl 9 decanoate; that trend is interesting since one would have expected a closer approximation value for ethyl butyrate since its enthalpy, heat capacity, and entropy curves are closer to the ones for methyl

butanoate. However, it has been noticed in the literature that methyl decanoate has been extensively used as a surrogate for biodiesel combustion simulation as compared to ethyl butyrate and methyl 9 decanoate [13, 46, 47].

Another trend observed is the poorly predicted NO_x emission simulation for methyl decanoate, ethyl butyrate, and methyl 9 decanoate. For these three surrogates, NO_x emissions are underpredicted compared to experimental results. An earlier study, performed on Kiva-2 showed that surrogates with lesser content of oxygen tend to predict lower NO_x emission concentration [48]. In our case, each surrogate presents 2 atoms of oxygen in its formula; methyl butanoate presents a chemical formula of $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$, ethyl butyrate of $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_2$, methyl decanoate of $\text{C}_{11}\text{H}_{22}\text{O}_2$, and methyl 9 decanoate $\text{C}_{11}\text{H}_{20}\text{O}_2$. The stoichiometric air/fuel ratio which is calculated by $L = ((8/3)a + 8 \cdot b - c)/0.232$ for each surrogate of formula $\text{C}_a\text{H}_b\text{O}_c\text{N}_d$ will be, respectively, 8.788, 9.4928, 11.37, and 11.24. According to experimental parameters, the same mass of injected fuel was considered for each surrogate in the simulation. The model takes into account the molar fraction of each species contained in the surrogate. The composition of the burning mixture will therefore be dependable of the surrogate composition. The model will therefore predict a richer mixture during combustion for methyl butanoate, while others will be leaner. That could influence the calculation of oxygen content in the burning mixture and therefore will impact the computation of NO_x emission through the extended Zeldovich mechanism. Another area of investigation could be the extension of the thermodynamic data for each surrogate by integration of more chain reactions into the reduced chemical mechanical mechanism. That could lead to an increase of computation time.

4. Conclusion

Four biodiesel surrogates were investigated for their performance in 0D phenomenological combustion modeling. The surrogated thermodynamic data were those of butanoate, ethyl butyrate, methyl decanoate, and methyl 9 decanoate. Simulations were compared against experimental data gathered from the combustion of ethyl ester and methyl ester biodiesel from waste cooking oil in a 6-cylinder DI diesel engine at engine speed varying to 1100, 1400, and 1700 rpm. Each biodiesel surrogate was investigated for in-cylinder pressure, maximum pressure, thermal efficiency, and NO_x emissions. After the analysis of the simulation, the following conclusions could be derived:

- (i) Enthalpy, entropy, and heat capacity of the surrogates follow similar curve shapes; the highest differences were identified for methyl butanoate and methyl decanoate concerning entropy and heat capacity and between methyl butanoate and methyl 9 decanoate for enthalpy.
- (ii) Each surrogate fairly well predicted maximum pressure and thermal efficiency for each engine regime and each biodiesel.
- (iii) Methyl butanoate showed the best accuracy for all three simulated parameters, 1.27% and 0.94% for maximum pressure, 1.46% and 3.55% for thermal efficiency, and 6.65% and 3.84% for NO_x emissions for MEB and EEB, respectively, followed by methyl decanoate, methyl 9 decanoate, and ethyl butyrate.
- (iv) Out of the four surrogates, only methyl butanoate, could well predict NO_x emissions at 6.65% and 3.84% for MEB and EEB, respectively; the other three surrogates presented heavy average errors higher than 50%.

Conflict of Interests

The authors declare that there is no conflict of interests regarding the publication of this paper.

Acknowledgment

The authors are grateful to the Ministry of Higher Education of Cameroon for financing this research.

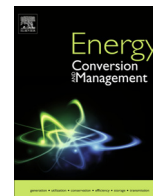
References

- [1] S. A. Basha, K. R. Gopal, and S. Jebaraj, "A review on biodiesel production, combustion, emissions and performance," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 13, no. 6-7, pp. 1628–1634, 2009.
- [2] N. Usta, E. Öztürk, Ö. Can et al., "Combustion of bioDiesel fuel produced from hazelnut soapstock/waste sunflower oil mixture in a Diesel engine," *Energy Conversion and Management*, vol. 46, no. 5, pp. 741–755, 2005.
- [3] X. Wang, K. Li, and W. Su, "Experimental and numerical investigations on internal flow characteristics of diesel nozzle under real fuel injection conditions," *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 42, pp. 204–211, 2012.
- [4] J. Yang, M. Johansson, C. Naik et al., "3D CFD modeling of a biodiesel-fueled diesel engine based on a detailed chemical mechanism," SAE Technical Paper 2012-01-0151, SAE International, 2012.
- [5] S. Som and D. E. Longman, "Numerical study comparing the combustion and emission characteristics of biodiesel to petrodiesel," *Energy and Fuels*, vol. 25, no. 4, pp. 1373–1386, 2011.
- [6] N. Samec, B. Kegl, and R. W. Dibble, "Numerical and experimental study of water/oil emulsified fuel combustion in a diesel engine," *Fuel*, vol. 81, no. 16, pp. 2035–2044, 2002.
- [7] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook, "A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation," *Combustion and Flame*, vol. 114, no. 1-2, pp. 149–177, 1998.
- [8] S. Hong, M. S. Wooldridge, H. G. Im, D. N. Assanis, and H. Pitsch, "Development and application of a comprehensive soot model for 3D CFD reacting flow studies in a diesel engine," *Combustion and Flame*, vol. 143, no. 1-2, pp. 11–26, 2005.
- [9] G. Vourliotakis, D. I. Kolaitis, and M. A. Founti, "Development and parametric evaluation of a tabulated chemistry tool for the simulation of n-heptane low-temperature oxidation and autoignition phenomena," *Journal of Combustion*, vol. 2014, Article ID 237049, 13 pages, 2014.
- [10] L. Coniglio, H. Bennadji, P. A. Glaude, O. Herbinet, and F. Billaud, "Combustion chemical kinetics of biodiesel and related compounds (methyl and ethyl esters): experiments

- and modeling—advances and future refinements,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 39, no. 4, pp. 340–382, 2013.
- [11] S. Um and S. W. Park, “Modeling effect of the biodiesel mixing ratio on combustion and emission characteristics using a reduced mechanism of methyl butanoate,” *Fuel*, vol. 89, no. 7, pp. 1415–1421, 2010.
 - [12] J. Y. W. Lai, K. C. Lin, and A. Violi, “Biodiesel combustion: advances in chemical kinetic modeling,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 37, no. 1, pp. 1–14, 2011.
 - [13] P. Diévar, S. H. Won, S. Dooley, F. L. Dryer, and Y. Ju, “A kinetic model for methyl decanoate combustion,” *Combustion and Flame*, vol. 159, no. 5, pp. 1793–1805, 2012.
 - [14] V. I. Golovitchev and J. Yang, “Construction of combustion models for rapeseed methyl ester bio-diesel fuel for internal combustion engine applications,” *Biotechnology Advances*, vol. 27, no. 5, pp. 641–655, 2009.
 - [15] C. V. Ngayihi Abbe, R. Nzenzwa, R. Danwe, Z. M. Ayissi, and M. Obonou, “A study on the 0D phenomenological model for diesel engine simulation: application to combustion of Neem methyl ester biodiesel,” *Energy Conversion and Management*, vol. 89, pp. 568–576, 2015.
 - [16] J. Galle, R. Verschaeren, and S. Verhelst, “The behavior of a simplified spray model for different diesel and bio-diesel surrogates,” SAE Technical Paper 2015-01-0950, 2015.
 - [17] A. Stagni, C. Saggese, M. Bissoli et al., “Reduced kinetic model of biodiesel fuel combustion,” *Chemical Engineering Transactions*, vol. 37, pp. 877–882, 2014.
 - [18] S. Som, W. Liu, and D. E. Longman, “Comparison of different chemical kinetic models for biodiesel combustion,” in *Proceedings of the Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference (ASME ’13)*, American Society of Mechanical Engineers, Dearborn, Mich, USA, October 2013.
 - [19] A. S. Lyshevsky, *Fuel Atomization in Marine Diesels*, Machgiz, Leningrad, Russia, 1971 (Russian).
 - [20] N. F. Razleytsev, *Combustion Simulation and Optimization in Diesels*, Vischa Shkola, Kharkiv, Ukraine, 1980 (Russian).
 - [21] F. I. Abramchuk, A. P. Marchenko, N. F. Razleytsev, and E. I. Tretiak, *Modern Diesel Engines: Increase of Fuel Economy and Durability*, Technika, Kiev, Ukraine, 1992.
 - [22] A. S. Kuleshov, “Multi-zone DI diesel spray combustion model for thermodynamic simulation of engine with PCCI and high EGR level,” *SAE International Journal of Engines*, vol. 2, no. 1, pp. 1811–1834, 2009.
 - [23] D. B. Spalding, “The combustion of liquid fuels,” in *Proceedings of the Fourth Symposium (International) on Combustion and Detonation Waves*, The Combustion Institute, Cambridge, Mass, USA, 1953.
 - [24] Y. Aghav, V. Thatte, M. Kumar et al., “Predicting ignition delay and HC emission for DI diesel engine encompassing EGR and oxygenated fuels,” SAE Technical Paper 2008-28-0050, SAE, 2008.
 - [25] N. Watson, A. Pilley, and M. Marzouk, “A combustion correlation for diesel engine simulation,” SAE Technical Paper 800029, 1980.
 - [26] O. Grondin, *Modélisation du moteur à allumage par compression dans la perspective du contrôle et du diagnostic [Ph.D. thesis]*, Université de Rouen, Rouen, France, 2004.
 - [27] C. R. Ferguson and T. K. Allan, *Internal Combustion Engines: Applied Thermosciences*, John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, USA, 2nd edition, 2000.
 - [28] R. J. Kee, F. M. Rupley, and J. A. Miller, “The chemkin thermodynamic data base,” Tech. Rep., 1990.
 - [29] G. Woschni, “A universally applicable equation for the instantaneous heat transfer coefficient in the internal combustion engine,” SAE Technical Paper 670931, 1967.
 - [30] J. B. Heywood, *Internal Combustion Engine Fundamentals*, McGraw-Hill, New York, NY, USA, 1988.
 - [31] G. A. Lavoie, J. B. Heywood, and J. C. Keck, “Experimental and theoretical study of nitric oxide formation in internal combustion engines,” *Combustion Science and Technology*, vol. 1, no. 4, pp. 313–326, 1970.
 - [32] H. Sanli, M. Canakcib, E. Alptekinb, A. Turkcanb, and A. N. Ozsezenb, “Effects of waste frying oil based methyl and ethyl ester biodiesel fuels on the performance, combustion and emission characteristics of a DI diesel engine,” *Fuel*, vol. 159, pp. 179–187, 2015.
 - [33] M. H. Hakka, P.-A. Glaude, O. Herbinet, and F. Battin-Leclerc, “Experimental study of the oxidation of large surrogates for diesel and biodiesel fuels,” *Combustion and Flame*, vol. 156, no. 11, pp. 2129–2144, 2009.
 - [34] W. Wang and M. A. Oehlschlaeger, “A shock tube study of methyl decanoate autoignition at elevated pressures,” *Combustion and Flame*, vol. 159, no. 2, pp. 476–481, 2012.
 - [35] S. Zhang, L. J. Broadbelt, I. P. Androulakis, and M. G. Ierapetritou, “Comparison of biodiesel performance based on HCCI engine simulation using detailed mechanism with on-the-fly reduction,” *Energy & Fuels*, vol. 26, no. 2, pp. 976–983, 2012.
 - [36] A. M. El-Nahas, M. V. Navarro, J. M. Simmie et al., “Enthalpies of formation, bond dissociation energies and reaction paths for the decomposition of model biofuels: ethyl propanoate and methyl butanoate,” *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 111, no. 19, pp. 3727–3739, 2007.
 - [37] W. Liu, R. Sivaramkrishnan, M. J. Davis, S. Som, D. E. Longman, and T. F. Lu, “Development of a reduced biodiesel surrogate model for compression ignition engine modeling,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 34, no. 1, pp. 401–409, 2013.
 - [38] O. Herbinet, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook, “Detailed chemical kinetic mechanism for the oxidation of biodiesel fuels blend surrogate,” *Combustion and Flame*, vol. 157, no. 5, pp. 893–908, 2010.
 - [39] Z. Luo, M. Plomer, T. Lu et al., “A reduced mechanism for biodiesel surrogates for compression ignition engine applications,” *Fuel*, vol. 99, pp. 143–153, 2012.
 - [40] E. Goos, A. Burcat, and B. Ruscic, “Transfer of extended third millennium ideal gas and condensed phase thermochemical database,” in *Extended Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database*, Engineering FOA, Haifa, Israel, 2009.
 - [41] G. Labeckas and S. Slavinskis, “The effect of rapeseed oil methyl ester on direct injection Diesel engine performance and exhaust emissions,” *Energy Conversion and Management*, vol. 47, no. 13–14, pp. 1954–1967, 2006.
 - [42] C. D. Rakopoulos, K. A. Antonopoulos, D. C. Rakopoulos, D. T. Hountalas, and E. G. Giakoumis, “Comparative performance and emissions study of a direct injection Diesel engine using blends of Diesel fuel with vegetable oils or bio-diesels of various origins,” *Energy Conversion and Management*, vol. 47, no. 18–19, pp. 3272–3287, 2006.
 - [43] G. A. Lavoie and P. N. Blumberg, “A Fundamental model for predicting fuel consumption, NO_x and HC emissions of the

- conventional spark-ignition engine,” *Combustion Science and Technology*, vol. 21, no. 5-6, pp. 225–258, 1980.
- [44] I. Uryga-Bugajska, M. Pourkashanian, D. Borman, E. Catalanotti, and C. W. Wilson, “Theoretical investigation of the performance of alternative aviation fuels in an aero-engine combustion chamber,” *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering*, vol. 225, no. 8, pp. 874–885, 2011.
- [45] J. L. Brakora, Y. Ra, and R. D. Reitz, “Combustion model for biodiesel-fueled engine simulations using realistic chemistry and physical properties,” *SAE International Journal of Engines*, vol. 4, no. 1, pp. 931–947, 2011.
- [46] K. Seshadri, T. Lu, O. Herbinet et al., “Experimental and kinetic modeling study of extinction and ignition of methyl decanoate in laminar non-premixed flows,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 32, no. 1, pp. 1067–1074, 2009.
- [47] S. M. Sarathy, M. J. Thomson, W. J. Pitz, and T. Lu, “An experimental and kinetic modeling study of methyl decanoate combustion,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, no. 1, pp. 399–405, 2011.
- [48] C. Y. Choi and R. D. Reitz, “Modeling the effects of oxygenated fuels and split injections on DI diesel engine performance and emissions,” *Combustion Science and Technology*, vol. 159, no. 1, pp. 169–198, 2000.

**ARTICLE ENERGY CONVERSION AND
MANAGEMENT**



A study on the OD phenomenological model for diesel engine simulation: Application to combustion of Neem methyl ester biodiesel



Claude Valery Ngayihi Abbe^{a,b,*}, Robert Nzengwa^{a,b}, Raidandi Danwe^a, Zacharie Merlin Ayissi^b, Marcel Obonou^c

^a Laboratory of Applied Mathematics, National Advanced School of Engineering, University of Yaoundé, PO Box 337, Yaoundé, Cameroon

^b Faculty of Industrial Engineering, University of Douala, PO Box 2701, Douala, Cameroon

^c Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Yaoundé, PO Box 337, Yaoundé, Cameroon

ARTICLE INFO

Article history:

Received 9 July 2014

Accepted 3 October 2014

Keywords:

Diesel
OD model
Neem methyl ester
Combustion
Nitric oxides
Spray

ABSTRACT

The design and monitoring of modern diesel engines running on alternative fuels require reliable models that can validly substitute experimental tests and predict their operating characteristics under different load conditions. Although there exists a multitude of models for diesel engines, OD phenomenological models present the advantages of giving fast and accurate computed results. These models are useful for predicting fuel spray characteristics and instantaneous gas state. However, there are few reported studies on the application of OD phenomenological models on biodiesel fuel combustion in diesel engines.

This work reports the elaboration, validation and application on Neem methyl ester biodiesel (NMEB) combustion of a OD phenomenological model for diesel engine simulation.

The model addresses some specific aspects of diesel engine modeling found in previous studies such as the compromise between computers cost, accurateness and model simplicity, the reduction of the number of empirical fitting constant, the prediction of combustion kinetics with reduction of the need of experimental curve fitting, the ability to simultaneously predict under various loads engine thermodynamic and spray parameters as well as emission characteristics and finally the ability to simulate diesel engine parameters when fueled by alternative fuels.

The proposed model predicts fuel spray behavior, in cylinder combustion and nitric oxides (NOx) emissions. The model is implemented through a Matlab code. The model is mainly based on Razlejtsev's spray evaporation model, Watson's double Wiebe function and Ferguson's tabulated chemistry thermodynamic cycle algorithm. NOx emissions are implemented in the model using the extended Zeldovich mechanism, heat transfer and ignition delay are also taken into account in the model.

Following the validation in different operating points of the model on a four stroke 1 – cylinder direct injection diesel engine, the operating characteristics were predicted with an average error accuracy of about 15%. The relative error is, respectively, 10% for Sauter diameter, 12% for maximum penetration, 9.8% for peak pressure, 7.38% for peak temperature, 10.7% for NOx emission and 13.7% for engine power output. The model predicts higher Sauter mean diameter, higher fuel spray length and NOx emission for NMEB as compared to conventional diesel fuel which is in accordance with experimental results obtained on biodiesel fuels in previous researches. Methyl butyrate and methyl butanoate thermochemical data were used as surrogates for NMEB, the results obtained from the model were close, independently of the surrogate used for biodiesel. The average simulation time for a full cycle simulation was about 94.22 s, which gives to the model applicability for diesel engine optimization purposes. The results obtained were found satisfactory in terms of accuracy, algorithm simplicity and computer cost.

© 2014 Elsevier Ltd. All rights reserved.

* Corresponding author at: Laboratory of Applied Mathematics, National Advanced School of Engineering, University of Yaoundé, PO Box 337, Yaoundé, Cameroon.

E-mail address: ngayihiclaude@yahoo.fr (C.V. Ngayihi Abbe).

1. Introduction

One of the key elements for any economic activity is the availability of sufficient energy resources. Demand for energy in developing countries is a constantly growing concern for government policies. The continuous increasing price and scarcity

of conventional fuel renders the use of motorized equipment costly for the common users and small and medium size enterprises. Therefore, it is becoming necessary to investigate the possibility to use alternative fuel, including biodiesel fuel, for their sustainability and low pollution rate.

Many works [1–6] have shown that biodiesel can be used in any direct injection engine without major changes; however, some variations in efficiency, overall performance and durability of engines fueled by biodiesel have been noticed. In recent investigations, It has been shown that biodiesel use in diesel engines reduces the toxicity of exhaust gases [3,4,7] and also increases engine's thermal efficiency [5]. The main properties affecting engine's performance when fueled by biodiesel fuel are its flow and evaporation characteristics and its combustion characteristics. Recent works have shown that injected biodiesel usually gives longer liquid jet penetration and finer pulverized droplets [8,9]. Biodiesel gives also a shorter ignition delay than conventional diesel fuel, this and its higher content in oxygen lead to an increase of NOx emission and combustion efficiency [5].

In order to investigate the diesel engine's behavior under different type of alternative fuel, experimental or numerical simulations have to be performed; the latter has the advantage of reducing the time and cost related to prototype manufacturing and experimental equipments.

Numerical simulation of diesel engine operating cycle is based on the application of mathematical models that describe different physical processes occurring throughout the engine cycle. The elaboration of a mathematical model of combustion processes in diesel engines gives the possibility to run multiple scenario and optimization procedures in order to predict engine behavior under different conditions, thus reducing the expenditure linked with experimental researches.

Mathematical models for diesel engine combustion processes have been widely investigated around the world, simulation models of Diesel engine are mostly divided in three groups [10,11]:

- Zero-dimensional models (thermodynamic and phenomenological models);
- quasi dimensional or 1D models;
- multidimensional models (Computational Fluid Dynamics, CFD).

Zero-dimensional thermodynamic models are based on the laws of thermodynamics and semi empirical relationships describing the rate of combustion of the injected fuel. These models are also known as system models [12]. These types of models take their attractiveness from their relative simplicity of implementation and speed they offer in terms of computational speed and accuracy.

In zero dimensional phenomenological models, details of various phenomena occurring during the diesel combustion are added to the basic equation of energy conservation.

0D Phenomenological combustion models are convenient to describe combustion in diesel and to perform parametric studies of engines. This is because the injection process, which can be relatively well simulated by a phenomenological approach, has a dominant effect on the formation of the reagent mixture and the subsequent combustion process.

These models are usually subdivided into submodels coupled to each other, each one of the models describing phenomena occurring during each cycle. The main sub-models are generally as follows: Injection and breakup, evaporation, self ignition delay, thermodynamic submodel, emission submodels.

Quasi dimensional or 1D models and Computational Fluid Dynamics models describe better the inner phenomena involved in the diesel engine combustion. In 1D models, the combustion

chamber as well as the spray are divided in multiple(hundreds) zones, the reactive flow field is solved only in time for each zone of the combustion chamber (ordinary differential equations) while in Computational Fluid Dynamics models the field is solved in time and volume (partial differential equations). Computer time and memory constraints severely limit the use of these models. Computational Fluid dynamics models are mainly based on solving Navier–Stokes equations; the whole process is usually broken down into a number of parts to be solved: the dynamic liquid phase of the jet dynamics of gas-phase and gas phase chemical kinetics.

In terms of engine parameterization, optimization and computing speed, 0D phenomenological model provide fairly good results. Numerous research studies on 0D phenomenological models of diesel engine combustion were reported recently with different approaches and complexity. Jung and Assanis [13] model predicts heat release rate and engine performances, using a multizone approach, the model needs enhancement for NOx prediction across a wide range of operating conditions and its computing cost is highly depended on the number of zone used. Rakopoulos et al. [14] used a two zone combustion approach coupled with a multizone jet model to predict in cylinder parameters as well as engine's emissions, in this model the combustion rate is considered proportional to the droplet evaporation rate and premixed and diffusion period are considered undistinguishable. The model is highly sensitive to the accurate selection of tuning constants contained inside its different sub-models.

Dulbecco et al. [15] proposed a model for determining heat release and in cylinder pressure using probability density functions with computational time of about 10^2 – 10^3 time real engine time cycle. Using the same approach as Dulbecco et al., Bordet et al. [12] presented a model with far less computing time of about 7 s for half a cycle. Both of these models were implemented to predict auto ignition and heat release and manage multiple injection strategy. However, these models are limited to CO, CO₂ and H₂O as emitted chemical species and were both validated only on n-heptane thermochemical data. Furthermore these 0D models use large thermochemical data, thus making them expensive in terms of computer cost if applied for pollutant emission.

Catania et al. [16] model also permits to determine heat release and in cylinder pressure with an approach based on the balance between the heat release rate and energy associated with accumulated fuel mass in the combustion chamber. The single zone model is effective in terms of computational speed but contains many empirical tuning coefficients and does not compute engine pollutant emissions and spray characteristics.

The cited works presented above cover broad aspect of the diesel combustion cycle, but some are limited to specific phenomenon related to the cycle or by their computer cost and complexity. Large thermochemical table and multizone are some parameters increasing the computer cost of some the cited model, while other use simplified assumption and hypothesis that can lead to a lack of accuracy and predictive capability. The present work addresses the following specific aspects of diesel engine modeling found in previous researches: A compromise should be found between the use of large thermochemical table and high number of zone that could lead to increased accuracy but high computer cost, and the use of reduced thermochemical tables and low number of zones that could lead to lower accuracy but low computer cost; reduction of number of tuning constants for the model under various loads; the prediction of combustion kinetics with the reduction of the need of experimental curve fitting; the ability to simultaneously predict under various loads engine thermodynamic and spray parameters as well as emission characteristics; the ability to simulate diesel engine parameters when fueled by alternative fuels.

The challenge sometimes faced by researchers is to reach a computation time close to real engine time. Estimating the engine's emission characteristic through more sophisticated tabulated chemistry [15,17] is one parameter that tends to increase the computation process. One way to go about this difficulty is the use of reduced chemical mechanisms [18] and simpler computation algorithms.

The use of 0D phenomenological model has been less extensive concerning biodiesel combustion in diesel engines with few related works reported [19,20]. Mainly, the usual path to model diesel engine combustion when fueled by biodiesel fuel is the replacement of conventional diesel fuel properties by biodiesel properties as input for model computation.

The model proposed in this study takes into account the influence of fuel spray characteristic on the kinetic of combustion, and then provides a link between the latter with the efficiency of the engine. Fuel spray characteristics are computed using phenomenological models proposed by Razlejtsev [21,22] and the kinetics of combustion is linked to the engine performance using the thermodynamic algorithm elaborated by Ferguson [23].

2. Materials and methods

2.1. Model's governing equations

2.1.1. Spray sub model

The method used for modeling fuel injection and spray dynamic is based on the one proposed and described by Lyshevsky [24] and Razlejtsev [11,21,22] where the spray jet is considered made of two phases; an initial and a base phase. The two phases are separated by a transitory phase characterized by its length l_b and the time taken by the spray to reach it t_b . The transitory phase length is computed by the semi empirical formula (2.1) and t_b value is given in the formula (2.2)

$$l_b = C_s d_n W_e^{0.25} M^{0.4} \rho_l^{-0.6}; \quad (2.1)$$

$$t_b = \frac{l_b}{B_s} \quad (2.2)$$

where C_s is a weighting constant, d_n is the nozzle diameter, W_e the Weber number which depends on the fuel injection initial velocity, M a dimensionless criterion [11] characterizing the ration of surface tension forces and viscosity, ρ_l is the liquid fuel density.

The spray tip penetration is then calculated for each phase by for $0 < t < t_b$

$$S = A_s \vartheta^{0.35} \exp \left[-0.2 \cdot \left(\frac{t}{t_b} \right) \right]; \quad (2.3)$$

for $t > t_b$

$$S = B_s^2 t^{0.5}. \quad (2.4)$$

A_s is an empirical constant and ϑ is a criterion of non-stationary processes.

The model is similar to the one described by Hiroyasu [25,26], where the transitory phase time can be assimilated to the break up time at which droplets start to form.

The spray angle according to time is modeled as for $0 < t < t_b$

$$\theta = 2 \arctan \left(\begin{array}{cc} E_s W_e^{0.35} & M^{-0.07} \\ \vartheta^{-0.12} & \rho_l^{0.5} e^{0.07 \frac{t}{t_b}} \end{array} \right); \quad (2.5)$$

for $t > t_b$

$$\theta = 2 \arctan \left(\begin{array}{cc} F_s W_e^{0.32} & M^{-0.07} \\ \vartheta^{-0.12} & \rho_l^{0.5} \end{array} \right); \quad (2.6)$$

With $E_s = 0.932 F_s W_e^{-0.030} \vartheta^{0.12}$ and F_s are empirical constants.

2.1.2. Fuel evaporation sub model

The injected liquid fuel, after reaching the transition zone breaks up into fine droplets, which will undergo evaporation at a given rate. Razlejtsev [21,22] suggested the following procedure for determining the evaporation rate of injected fuel into a diesel engine cylinder.

Razlejtsev [21,22] stated that the fuel spray can be divided into two zones; the first zone where inhibited droplets in a cloudy shape are concentrated behind the flame front area, the second zone where the droplets had reached the flame front and where the evaporation is undergoing a turbulent character.

The Sauter mean diameter is calculated in each zone following the relationship given below

$$d_{32} = 1.7 d_n M^{0.0733} (We \cdot \rho)^{-0.266}; \quad (2.7)$$

where $\rho = \frac{\rho_a}{\rho_l}$ the ratio of density of air and liquid fuel.

The evaporation of droplets follows the so called d2 law [27] where the evolution of an evaporating droplet is given as

$$d_i^2 = d_0^2 - Kt; \quad (2.8)$$

where d_0 is the initial droplet diameter after breakup computed by Eq. (2.6) and d_i the droplet diameter at the current time. K is the evaporation constant for a given zone of fuel spray which is given by

$$K = 10^6 \cdot 4 N_u D_p / \rho_i; \quad (2.9)$$

where N_u is the Nusselt number for diffusion processes and D_p the diffusion coefficient of fuel vapor.

In the works [21,22] it was shown that the evaporation constant has sensibly the same value for the two zone and it can be computed by

$$K = \frac{1}{P_c} \cdot 10^6; \quad (2.10)$$

where $P_c = P_{im} \varepsilon^{n_1}$ is the relative in cylinder pressure at TDC, ε the compression ratio, P_{im} the inlet manifold pressure, n_1 the polytropic exponent for compression.

The evaporation constant permits to estimate the relative combustion duration of the cycle, which will be given by

$$\tau_{ev} = A_z / (b_{it} \lambda^{0.6}), \text{ in seconds} \quad (2.11)$$

where $b_{it} = K/d_{32}^2$ and A_z is a weighing empirical constant which value varies from 4 to 12.

The combustion duration is converted in crank angle by doing the following multiplication

$$\varphi_z = 6 \cdot RPM \cdot \tau_{ev}. \quad (2.12)$$

2.1.3. Ignition delay sub model

Although there exists a multitude of correlation for ignition delay [28,29], we choose to use a correlation which would give us the possibility of estimating the influence of the fuel cetane number. The relationship proposed by Hardenberg and Hase [30] is given below (2.12) and has proven a good predictability for fuels with cetane number equal or higher than 50 [31].

$$ID = [0.36 + 0.22 \bar{U}_p] \exp \left[\frac{618840}{CN + 25} \cdot \left(\frac{1}{RT_{im} \varepsilon^{n_1 - 1}} - \frac{1}{17190} \right) + \left(\frac{21.2}{P_{im} \varepsilon^{n_1} - 12.4} \right)^{0.63} \right]; \quad (2.13)$$

where ID is the ignition delay in crank angle degrees, T_{im} is the temperature at the intake manifold, CN is the cetane number of the fuel and \bar{U}_p is the mean piston speed in m/s .

2.1.4. Heat release sub model

The well known Wiebe model [32] modified by Watson double wiebe function [33,34] was used in this in this model as a sub model for heat release rate. The in cylinder combustion is considered to be happening within two phases; the premixed combustion phase and the diffusive combustion phase. The rate of fuel combustion can be computed in the cycle by

$$x = \beta x_p + (1 - \beta) x_d; \quad (2.14)$$

where β is the amount of fuel injected into the cylinder that participates into the premixed combustion, x_d and x_p express the rate of combustion for each phase;

$$x_i = 1 - \exp \left[-a_i \left(\frac{\varphi - \varphi_{comb}}{\varphi_z} \right)^{m_i+1} \right]; \quad (2.15)$$

a_i and m_i are Wiebe fitting coefficients.

2.1.5. Heat transfer submodel

In an engine, a portion of the heat generated by combustion is transmitted to the cylinder walls by forced convection. Modeling in-cylinder combustion processes needs to take into account the interaction with the cylinder wall. The radiation transfers are not taken into account in this study because it has been shown that they are far less below the transfer between combustion gas and wall [35]. The heat transfer is modeled using the approach proposed by Woschni [10,36] where the heat transfer coefficient is computed by

$$h = 3.26 \cdot D^{-0.2} P_{cyl}^{0.8} T^{-0.55} w^{0.8}; \quad (2.16)$$

where D is the cylinder bore, P_{cyl} is the in cylinder pressure in kPa, T the in cylinder temperature and w average cylinder gas velocity in m/s. Detailed description of the Woschni method can be found in [10].

2.1.6. Nitric oxide pollutant emission sub model

Diesel engine a more subjected to high nitric oxide emission than spark ignition engine, NOx are very unfriendly for the ozone layer and several norms have been put in place in order to limit their emission by diesel engines [37]. The model used in this study for NOx emission prediction is the so called extended Zeldovich Mechanism described in [10,38]. That mechanism is characterized by the following chemical reactions:



The rate of nitric oxides formation is then computed as a form of a non linear differential equation given below

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{2C_1 \left[1 - \frac{[NO]}{[NO]_e} \right]}{1 + \frac{[NO]}{[NO]_e} C_2}; \quad (2.20)$$

where $C_1 = K_{f,1}[O]_e[N_2]_e$, and:

$$C_2 = \frac{C_1}{K_{r,2}[NO]_e[O]_e K_{r,3}[NO]_e[H]_e}; \quad (2.21)$$

$[X]$ expresses specie's X concentration and $[X]_e$ specie's X concentration at equilibrium. $K_{f,i}$ is the forward rate constant of each reaction and $K_{r,i}$ is the reverse (dissociation) rate constant of each reaction.

2.1.7. Combustion model coupling with thermodynamic cycle

The above described submodels are incorporated into the two zone thermodynamic model for internal combustion engine proposed by Olikara [39], implemented by Ferguson [23] and adapted into Matlab by [40] following algorithm chart given in Fig. 1.

The in cylinder thermodynamic state parameters are computed as follows:

The pressure is calculated at each crank angle using the following correlation

$$\frac{dP}{d\theta} = \frac{A + B + C}{D + E}; \quad (2.22)$$

The temperatures in burned and unburned zones are then calculated using the following correlations:

Burned temperature (b indices)

$$\begin{aligned} \frac{dT_b}{d\theta} = & \frac{-h \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) x^{1/2} T_b - T_w}{v m c_{pb} x} + \frac{v_b}{c_{pb}} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right) \left(\frac{dP}{d\theta} \right) \\ & + \frac{h_u - h_b}{x c_{pb}} \left[\frac{dx}{d\theta} - x - x^2 \frac{C}{\omega} \right]; \end{aligned} \quad (2.23)$$

Unburned temperature (u indices)

$$\begin{aligned} \frac{dT_u}{d\theta} = & \frac{-h \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) x^{1/2} T_u - T_w}{v m c_{pu} x} + \frac{v_u}{c_{pu}} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right) \left(\frac{dP}{d\theta} \right) \\ & + \frac{h_u - h_b}{x c_u} \left[\frac{dx}{d\theta} - x - x^2 \frac{C}{\omega} \right]; \end{aligned} \quad (2.24)$$

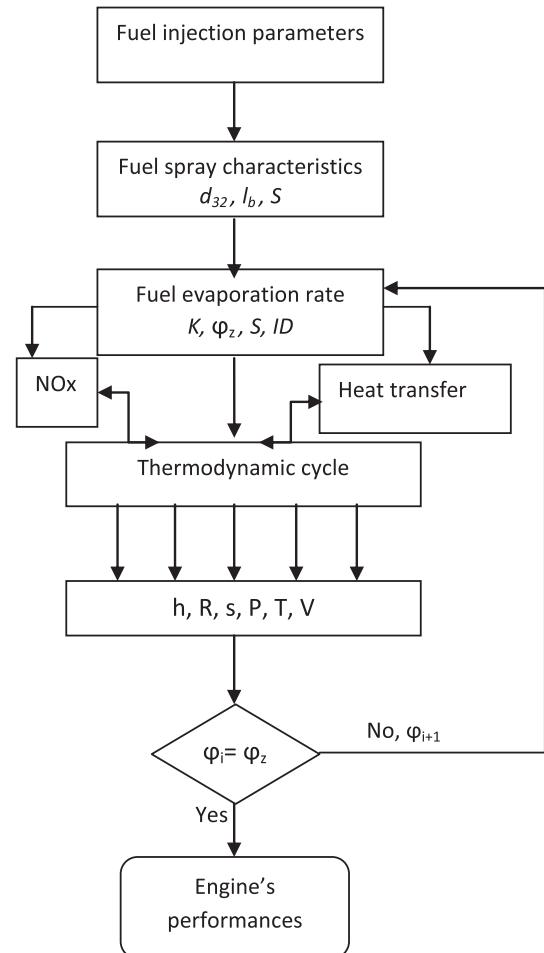


Fig. 1. Model implementation algorithm.

The thermodynamic properties of combustion products and fuel are determined using polynomial curve fitted data from the Chemkin or JANAF [18,41] table. The combustion products are evaluated assuming that they are in equilibrium at any given temperature and pressure. Using Olikara and Borman [39] method we find mole fractions of combustion products and we can then find the thermodynamic property of the mixture such as enthalpy h , specific heat c_p , and specific volume v .

The values of A , B , C , D and E are given below and the full mathematical description of the thermodynamic cycle can be found in [23].

$$A = \frac{1}{m} \left(\frac{dV}{d\theta} + \frac{VC}{\omega} \right);$$

$$B = h \frac{\left(\frac{dV}{d\theta} + \frac{VC}{\omega} \right)}{\omega m} \left[\frac{v_b}{c_{pb}} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \chi^{1/2} \frac{T_b - T_w}{T_b} + \frac{v_u}{c_{pu}} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} (1 - \chi^{1/2}) \frac{T_u - T_w}{T_u} \right];$$

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

$$D = x \left[\frac{v_b^2}{c_{pb} T_b} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + \frac{v_b}{P} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \right];$$

$$E = 1 - x \left[\frac{v_u^2}{c_{pu} T_u} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + \frac{v_u}{P} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} \right].$$

Eqs. 2.20, 2.22, 2.23 and 2.24 are solved simultaneously using Runge–Kutta method.

The model was implemented on a personal dual core computer of 4 GB RAM.

2.2. Experimental equipment

The experimental equipment used in our study was provided by the Center of Formation of Armed Techniques (CFAT) of Ekounou in Yaoundé Cameroon.

The test bench comprised (Fig. 2.) a Mercedes OM 352 turbo-charged direct injection 6 cylinder engine, Bosch injector test bench, a Souriau diesel tester for power and torque measurements. Exhaust gas toxicity was measured using a Souriau gas analyzer.

The opening pressure of injection nozzle was set up using the Bosch injector test bench and was kept constant for all the experiments.

A stroboscopic timing gun, connected to the diesel tester was used to set up the injection timing at 18 before TDC for all the tests performed.

The only parameter that was varying was the crankshaft rotational speed, which we varied from 2800 RPM (Rotation per Minutes) to 1000 RPM.

It is worth noticing that for the first test at 2800 RPM, the compressor pressure ratio was set up at 1.35 while for the rest it was setup at 3.

2.2.1. Investigated engine parameters and data

Table 2.1 presents the main characteristics of the investigated engine.

In order to perform a thorough investigation of the validity of our model, we needed to be able to capture all the data concerning engine performances (Power, Torque, IMEP, etc.) as well as data concerning in cylinder combustion.

The latter could not be investigated using the earlier presented equipments because of the absence of pressure sensors and transducers as well as thermocouples among the equipments available.

To overcome this issue, we used calibrated data for the same engine provided by the software Diesel-RK [11]. The calibrated files that were provided by Prof. Kuleshov, creator of Diesel-RK, were

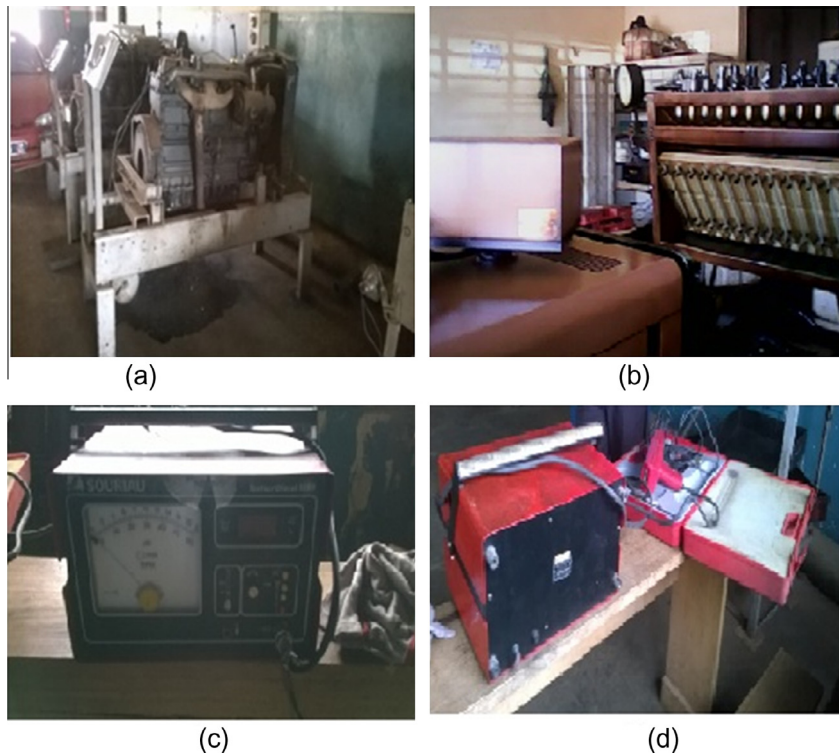


Fig. 2. Experimental equipments: (a) engine, (b) injection test bench, (c) diesel tester, and (d) stroboscopic timing gun.

Table 2.1
Engine's characteristics.

Type	Diesel engine OM 352
Bore (m)	0.097
Stroke (m)	0.128
Number of cylinders	6
Compression ration	17:1
Connecting rod length (mm)	241
Number of injector's nozzle hole, diameter(m)	6, 0.00019
Fuel injection timing	18° before TDC

Table 2.2
Fuel properties.

Properties		Diesel N°2	NME
Composition	C	0.87	0.771
	H	0.126	0.118
	O	0.004	0.109
Sulfur fraction in fuel (%)		0	0.005
Density of fuel (kg/m ³) at 323 K		830	879
Cetane number		48	51.3
Dynamic viscosity at 323 K (pas)		3×10^{-3}	463×10^{-5}
Lower heating value (MJ/kg)		42.5	39.7

used as experimental data for in-cylinder phenomenon study in this paper. We have therefore been able to assess the accuracy of our model for the evaluation of parameters such as in-cylinder pressure, temperature, fuel jet penetration and NOx emissions.

2.2.2. Fuel characteristics

The fuels used in the study were conventional diesel fuel (diesel N°2) and Neem methyl ester biodiesel fuel. The properties of the fuels are reported in Table 2.2.

The diesel fuel was provided by the CFTA and was used for the model validation. NMEB was produced and characterized at the HYDRAC factory in Douala by the transesterification process [5,42]. The NMEB combustion assessment was not performed experimentally, but its physical properties were used for simulation purposes using the described model.

The thermochemical data for Diesel N°2 were taken from [10] and the thermodynamic data for Neem biodiesel were assimilated to those of methyl butanoate chemkin data [18] and methyl butyrate data [43].

3. Results and discussion

3.1. Model validation

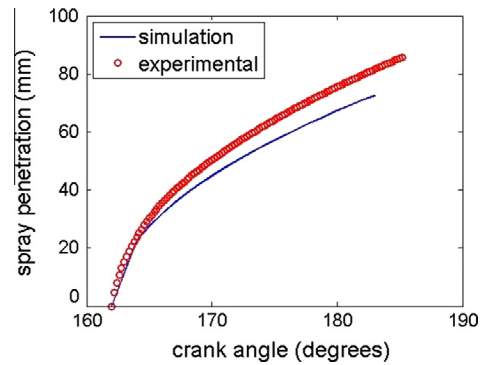
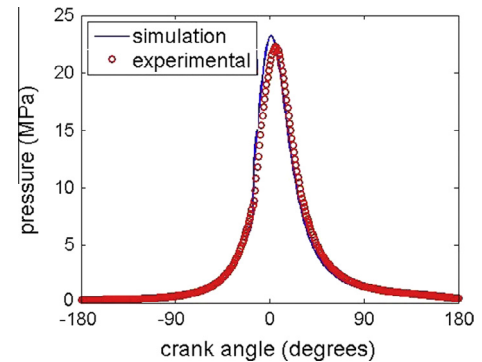
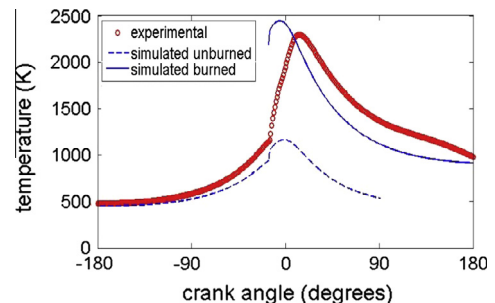
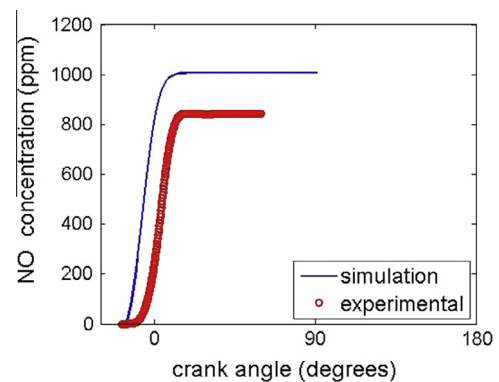
The in-cylinder engine data were computed for the entire previously stated variants. The following pictures (Figs. 3–8) present comparative jet penetration, pressure, temperature, and NOx emission traces between computed and experimental (calibrated files) results at 2000 RPM. Supplementary results are presented in Appendix A.

Table 3.1 reports the macroscopic parameters (Power, droplet mean diameter, NOx, of the engine according to the computed and experimental results.

In order to better test the accuracy of our model, a routine was programmed to plot the overall geometry of the fuel spray, results are presented in Figs. 7 and 8.

The overall trend shows that the model predicts fairly well the in cylinder parameter of fuel combustion in the diesel engine. However, some comments can be made concerning the accuracy of the model.

It can be seen from Figs. 7 and 8 that the spray shape is similar to the experimental up until the transition zone; the penetration is

**Fig. 3.** Jet penetration at 2000 RPM.**Fig. 4.** In cylinder pressure at 2000 RPM.**Fig. 5.** In cylinder temperature at 2000 RPM.**Fig. 6.** NOx variation at 2000 RPM.

similar but the angle of spray dispersion tends to be less for the model after the transitional zone. This can be explained by the fact that the model considers the fuel jet as a whole homogenous body

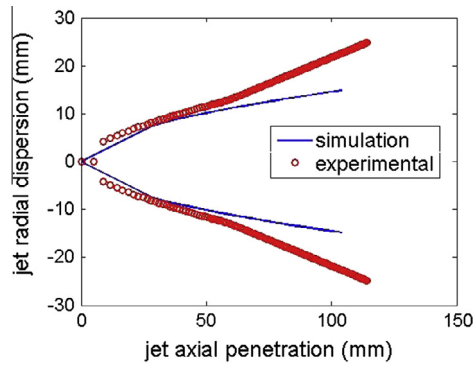


Fig. 7. Spray contour at 2800 RPM.

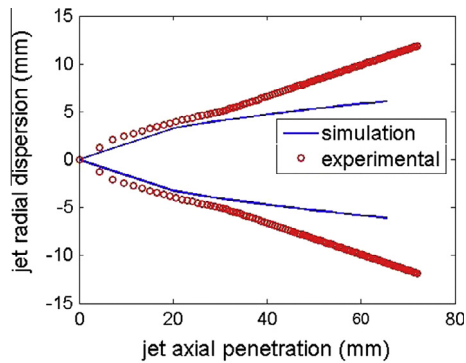


Fig. 8. Spray contour at 1000 RPM.

Table 3.1
Comparison of simulated and measured Sauter diameter and max penetration.

RPM	Sauter diameter (μm)			Max_penetration (mm)		
	S	E	Error (%)	S	E	Error (%)
2800	12.76	11.34	11.1	103.9	114.2	9.9
2000	11.62	10.54	9.3	75.08	85.76	14.2
1600	13.05	11.85	9.2	69.28	80.87	16.7
1400	14.20	12.71	10.5	71.1	77.79	9.4
1000	16.88	15.21	9.9	65.47	71.89	9.8
Average			10.00			12.01

for which the physical properties are conserved at any point of the spray contrary to quasi dimensional models where the spray is usually considers of multiple layers or zones with individual physical properties.

The cylinder pressure is well estimated for each scenario. The model, however, tends to overestimate the cylinder temperature for each scenario. The present study using thermodynamics tables is dependant of the latter, thus its accuracy will be as high as the thermodynamic table will be accurate.

Another trend observed, is that the NO_x estimation is quite accurate, with higher rate predicted for situations where the simulated peak pressure was higher than the measured. The initial conditions of experiments could also be specific parameters influencing the accuracy of the model.

A way forward for the increasing the accuracy of the model could be the study of variation of tuning coefficients presented in Eqs. (2.11) and (2.15). Tables 3.1–3.3 present the parameters of in cylinder combustion and the differential between measured and simulated results.

It can be seen that the overall error is, respectively, 10% for Sauter diameter, 12% for maximum penetration, 9.8% for peak

Table 3.2
Comparison of simulated and measured peak pressure and peak temperature.

RPM	Peak pressure (MPa)			Peak temperature (K)		
	S	E	Error (%)	S	E	Error (%)
2800	12.06	10.3	14.6	2489	2124	14.7
2000	23.21	22.24	4.17	2441	2295	5.9
1600	21.56	22.81	5.8	2435	2313	5.0
1400	21.08	23.16	9.9	2454	2322	5.37
1000	20.63	23.62	14.4	2485	2339	5.87
Average			9.8			7.38

Table 3.3
Comparison of simulated and measured NO_x emission and engine power.

RPM	NO _x (ppm)			Power (kW)		
	S	E	Error (%)	S	E	Error
2800	2039	1999	1.9	176.36	155.3	11.9
2000	1007	844.7	16.11	201.64	150.6	25.3
1600	976	1150	17.8	139.19	117.6	15.5
1400	1240	1341	8.14	109.17	100.5	7.94
1000	1592	1740	9.4	71.37	65.7	7.9
Average			10.7			13.7

pressure, 7.38% for peak temperature, 10.7% for NO_x emission and 13.7% for engine power output.

In average the model predicts engine parameters with error less than 15%, which is acceptable for engine prediction and simulation. The average simulation time for a full cycle simulation was about 94.22 s, with most time taken by the resolution of the nonlinear differential equations involved in the model for about 47.13 s, which is encouraging considering previously published works [12,15].

The duration of the computation implies that the model can well fit in parameterization and optimization problems related with diesel engine manufacturing and enhancement. That duration is far beyond real time duration useful for engine control and monitoring.

The following section will be used to apply the model on the combustion of a biodiesel fuel in a diesel engine.

3.2. Methyl ester combustion in diesel engine

In this part we simulated the diesel engine combustion process for the diesel engine fueled with NMEB. The simulations were performed at 2000 and 1000 RPM with the same engine conditions as stated for the model validation. The NMEB thermochemical data were taken as a first instance from [18] and at second instance from [43]. The results of the simulations are presented in Tables 3.2 and 3.3.

The results show that the model predicts a higher Sauter mean diameter for NMEB and a higher jet penetration. These results are confirmed by the work of [8,9,44] and are explained by the high viscosity, density and surface tension of NMEB compared to diesel fuel.

The model predicts a higher peak temperature for NMEB compared to diesel; this can be explained by the high content of oxygen in NMEB blend that tends to create a leaner combustion environment with more air inside the combustion cylinder. That has led also to increase of NO_x emissions since the model computes the NO emissions using the thermal NO_x model. The increase of NO_x emissions when using biodiesel is a trend observed in many researches [4,7,19,45], which is confirmed by our work.

The difference between the results observed when using the two different sets of thermochemical data is very small; from this

Table 3.4
NMEB performances at 2000 RPM.

Computed parameters	Methyl butanoate as surrogate [18]	Methyl butyrate as surrogate [43]
NOx (ppm)	1082	1218
Peak temperature (K)	2444	2453
Peak pressure (Mpa)	20.63	20.71
Sauter diameter (μm)	12.83	12.83
Max jet penetration (mm)	110.1	110.1
Power (Kw)	182.28	181.9

Table 3.5
NMEB performances at 1000 RPM.

Computed parameters	Methyl butanoate as surrogate [18]	Methyl butyrate as surrogate [43]
NOx (ppm)	2188	2470
Peak temperature (K)	2529	2541
Peak pressure (Mpa)	20.73	20.81
Sauter diameter (μm)	18.45	18.45
Max jet penetration (mm)	69.37	69.37
Power (kW)	80.63	79.98

we can conclude that, indifferently of the thermochemical data used for biodiesel, the results will closely match.

4. Conclusion

This work reported the elaboration, implementation and application on biodiesel combustion of a 0D phenomenological model for diesel engine simulation. In the proposed model, the in cylinder combustion parameters as well as engine's parameter and NOx emissions are computed using different submodels. The spray, evaporation and ignition delay submodels were incorporated into the model to characterize the combustion kinetic. These submodels were coupled with a two zones tabulated chemistry thermodynamic model in order to obtain the instantaneous gas state in the combustion chamber.

The objectives of the work were to address some specific points appearing in previous study, they were addressed as follows:

- In terms of finding a compromise between computers cost, accurateness and model simplicity, the model predicts fuel spray behavior, in cylinder combustion and NOx emissions with an average simulation time for a full cycle simulation of about 94.22 s, the model implementation algorithm is very simplified;
- concerning the reduction of number of empirical fitting constant under various loads, the model mostly relies on thermochemical data of fuels which are inputs needed for the model, and once they are correctly provided the model has shown to be able to simulate with good accuracy in cylinder parameters for different engine rotating frequency.
- Concerning the prediction of combustion kinetics with the reduction of the need of experimental curve fitting for each regime, the model computes combustion duration directly from the injection and pulverization model, thus the combustion kinetics of the model does not rely much on experimental results, once the model is calibrated for a specific regime it can be used for others;
- in terms of having the ability to simultaneously predict under various loads engine thermodynamic and spray parameters as well as emission characteristics, The model predicts fuel combustion processes with an average error accuracy of about 15%, where the relative error is, respectively, 10% for Sauter diameter, 12% for maximum penetration, 9.8% for peak

pressure, 7.38% for peak temperature, 10.7% for NOx emission and 13.7% for engine power output;

- concerning the ability to simulate diesel engine parameters when fueled by alternative fuels, the model predicts higher Sauter mean diameter, higher fuel spray length and NOx emission for NMEB as compared to conventional diesel fuel, which is in accordance with experimental results obtained on biodiesel fuels in previous researches.

Another assessment was made on the use of the suitable surrogate thermochemical data for NMEB combustion. Thermochemical data from methyl butyrate and methyl butanoate were used as surrogates for NMEB; the combustion of both surrogates was implemented and compared in the present study. The results obtained from the model were found to be close independently of the surrogate thermochemical data used for NMEB.

Finally, we can state that the model is able to predict diesel engine operating characteristics in different operating points with good accuracy and few adjusting numerical coefficients. The model algorithm is simple, it is highly dependent on the precision of the thermochemical data used, and thus their accurateness is an essential element of the model's implementation efficiency. Fitting constants in the double Wiebe function and the combustion duration formula are also needed to be determined accurately to improve the efficiency of the model. The model can be used for both traditional diesel fuel and biodiesel. The computational time and accuracy of the model is encouraging considering previously published works.

Acknowledgements

The authors are thankful to Prof. Andrei Kuleshov from the Bauman Moscow State Technical University for providing the calibrated data that permitted us to complete the validation of our model. The authors also wish to thank the Ministry of Defense of the Republic of Cameroon and the staff of the Center of Formation of Armed Techniques of Ekounou in Yaoundé for their technical support and the Hydrac company staff in Douala for providing data on Neem methyl ester biodiesel.

Appendix A. Supplementary material

Supplementary data associated with this article can be found, in the online version, at <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2014.10.005>.

References

- [1] Jindal S, Nandwana BP, Rathore NS, Vashistha V. Experimental investigation of the effect of compression ratio and injection pressure in a direct injection diesel engine running on Jatropha methyl ester. *Appl Therm Eng* 2010;30:442–8.
- [2] Sahoo PK, Das LM. Combustion analysis of Jatropha, Karanja and Polanga based biodiesel as fuel in a diesel engine. *Fuel* 2009;88:994–9.
- [3] Tesfa B, Mishra R, Zhang C, Gu F, Ball AD. Combustion and performance characteristics of CI (compression ignition) engine running with biodiesel. *Energy* 2013;51:101–15.
- [4] Balat M, Balat H. A critical review of bio-diesel as a vehicular fuel. *Energy Convers Manage* 2008;49:2727–41.
- [5] Demirbas A. Progress and recent trends in biodiesel fuels. *Energy Convers Manage* 2009;50:14–34.
- [6] Ozsensen AN, Canakci M. Determination of performance and combustion characteristics of a diesel engine fueled with canola and waste palm oil methyl esters. *Energy Convers Manage* 2011:108–16.
- [7] Lapuerta M, Armas O, Rodriguez-Fernandez J. Effect of biodiesel fuels on diesel engine emissions. *Prog Energy Combust Sci* 2007:198–223.
- [8] Wang X, Li K, Su W. Experimental and numerical investigations on internal flow characteristics of diesel nozzle under real fuel injection conditions. *Exp Thermal Fluid Sci* 2012:204–11.
- [9] Xiangang W, Zuohua H, Olawole K, Wu Z, Keiya N. Experimental and analytical study on biodiesel and diesel spray characteristics under ultra-high injection pressure. *Int J Heat Fluid Flow* 2010:659–66.

- [10] Heywood JB. Internal combustion engine fundamentals. New York: McGraw-Hill; 1988.
- [11] Kuleshov AS. Multi-zone DI diesel spray combustion model for thermodynamic simulation of engine with PCCI and high EGR level. SAE Int J Eng 2009;2:1811–34.
- [12] Bordet N, Caillol C, Higelin P, Talon V. A physical 0D combustion model using tabulated chemistry with presumed probability density function approach for multi-injection diesel engines. SAE Tech Paper 2010.
- [13] Jung D, Assanis DN. Multi-zone DI diesel spray combustion model for cycle simulation studies of engine performance and emissions. SAE Tech Paper 2001.
- [14] Rakopoulos CD, Rakopoulos DC, Giakoumis EG, Kyritsis DC. Validation and sensitivity analysis of a two zone Diesel engine model for combustion and emissions prediction. Energy Convers Manage 2004;1471–95.
- [15] Dulbecco A, Lafossas F, Poinot T. A 0D phenomenological approach to model diesel HCCI combustion with multi-injection strategies using probability density functions and detailed tabulated chemistry. Int J Eng 2009;1.
- [16] Catania AE, Finesso R, Spessa E. Predictive zero-dimensional combustion model for DI diesel engine feed-forward control. Energy Convers Manage 2011;52:3159–75.
- [17] Kolaitis DI, Founti MA. A tabulated chemistry approach for numerical modeling of diesel spray evaporation in a “stabilized cool flame” environment. Combust Flame 2006;145:259–71.
- [18] Fisher EM, Pitz WJ, Curran HJ, Westbrook CK. Detailed chemical kinetic mechanisms for combustion of oxygenated fuels. Proc Combust Inst 2000;28:1579–86.
- [19] Rakopoulos CD, Antanopoulos KA, Rakopoulos DC. Development and application of multi-zone model for combustion and pollutants formation in direct injection diesel engine running with vegetable oil or its bio-diesel. Energy Convers Manage 2007;48.
- [20] Awad S, Varuvel EG, Loubar K, Tazerout M. Single zone combustion modeling of biodiesel from wastes in diesel engine. Fuel 2013;106:558–68.
- [21] Abramchuk FI, Marchenko AP, Razleytsev NF, Tretiak EI. Modern diesel engines: increase of fuel economy and durability. Kiev: Technika; 1992.
- [22] Razleytsev NF. Combustion simulation and optimization in diesels (In Russian). Kharkov, USSR: Vischa shkola; 1980.
- [23] Ferguson CR, Allan TK. Internal combustion engines: applied thermosciences. 2nd ed. Wiley; 2000.
- [24] Lyshevsky AS. Fuel atomization in marine diesels (In Russian), Leningrad; 1971.
- [25] Hiroyasu H, Arai M. Structures of fuel sprays in diesel. SAE Tech Paper 1990.
- [26] Hiroyasu H, Kadota T, Arai M. Development and use of a spray combustion modeling to predict diesel engine efficiency and pollutant emissions: part 1 combustion modeling. Bull JSME 1985;26:569–75.
- [27] Spalding DB. The combustion of liquid fuels. In: Fourth symposium (international) on combustion (combustion and detonation waves). Elsevier, Cambridge; 1953. pp. 847–64.
- [28] Fujimoto H, Sato GT, Tanabe H. Illumination delay in diesel spray. JSAE Paper 1980:149.
- [29] Pischinger F, Scheid E, Reuter U. Self-ignition of diesel sprays and its dependence on fuel properties and injection parameters. J Eng Gas Turbines Power 1988;110:399–404.
- [30] Hardenberg HO, Hase FW. 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 Tech Paper 1979.
- [31] Challen B, Baranescu R. Diesel engine reference book. 2nd ed. Delhi: Butterworth-Heinemann; 1999.
- [32] Vibe I. Brennverlauf und Kreisprozeß von Verbrennungsmotoren (in German). Berlin: VEB Verlag Technik; 1970.
- [33] Grondin O, Stobart R, Chafouk H, Maquet J. Modelling the compression ignition engine for control: review and future trends. SAE Tech Paper 2004.
- [34] Watson N, Pillely A, Marzouk M. Combustion correlation for Diesel engine simulation. SAE Tech Paper 1980;1.
- [35] Watson N, Janota MS. Turbocharging the internal combustion engine. New York: The Macmillan Press; 1982.
- [36] Woschni G. A universally applicable equation for the instantaneous heat transfer coefficient in the internal combustion engine. SAE Tech Paper 1967;76.
- [37] Roberts A, Brooks R, Shipway P. Internal combustion engine cold-start efficiency: a review of the problem, causes and potential solutions. Energy Convers Manage 2014;82:327–50.
- [38] Lavoie GA, Heywood JB, Keck JC. Experimental and theoretical study of nitric oxide formation in internal combustion engines. Combust Sci Technol 1970;1: 313–26.
- [39] Olikara C, Borman G. A computer program for calculating properties of equilibrium combustion products with some applications to IC engines. SAE Tech Paper 1975.
- [40] Buttsworth DR. Spark ignition internal combustion engine modeling using Matlab. Faculty of Engineering & Surveying Technical Reports, University of Southern Queensland; 2002.
- [41] NIST. JANAF thermochemical tables fourth edition; 1998.
- [42] Ong HC, Silitonga AS, Masjuki HH, Mahlia TMI, Chong WT, Boosroh MH. Production and comparative fuel properties of biodiesel from non-edible oils: *Jatropha curcas*, *Sterculia foetida* and *Ceiba pentandra*. Energy Convers Manage 2013;73:245–55.
- [43] E. Goos, A. Burcat, B. Ruscic. Transfer of extended third millennium ideal gas and condensed phase thermochemical database. In: Engineering FOA, editor. Extended third millennium ideal gas and condensed phase thermochemical database, Haifa; 2009.
- [44] Chang SL, Sung WP, Sang K. An experimental study on the atomization and combustion characteristics of biodiesel-blended fuels. Energy Fuels 2005;5:2201–8.
- [45] Xuea J, Grift TE, Hansena AC. Effect of biodiesel on engine performances and emissions. Renew Sustain Energy Rev 2011;15:1098–116.

**ARTICLE INTERNATIONAL SCHOLARLY
RESEARCH NOTICES**

Research Article

Comparing in Cylinder Pressure Modelling of a DI Diesel Engine Fuelled on Alternative Fuel Using Two Tabulated Chemistry Approaches

Claude Valery Ngayihi Abbe,^{1,2} Robert Nzungwa,^{1,2} and Raidandi Danwe^{2,3}

¹ Faculty of Industrial Engineering, P.O. Box 2701, University of Douala, Douala, Cameroon

² National Advanced School of Engineering, P.O. Box 337, University of Yaounde, Yaounde, Cameroon

³ Higher Institute of the Sahel, P.O. Box 46, University of Maroua, Maroua, Cameroon

Correspondence should be addressed to Claude Valery Ngayihi Abbe; ngayihiclaude@yahoo.fr

Received 9 April 2014; Accepted 1 August 2014; Published 29 October 2014

Academic Editor: Xinqian Zheng

Copyright © 2014 Claude Valery Ngayihi Abbe et al. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

The present work presents the comparative simulation of a diesel engine fuelled on diesel fuel and biodiesel fuel. Two models, based on tabulated chemistry, were implemented for the simulation purpose and results were compared with experimental data obtained from a single cylinder diesel engine. The first model is a single zone model based on the Krieger and Bormann combustion model while the second model is a two-zone model based on Olikara and Bormann combustion model. It was shown that both models can predict well the engine's in-cylinder pressure as well as its overall performances. The second model showed a better accuracy than the first, while the first model was easier to implement and faster to compute. It was found that the first method was better suited for real time engine control and monitoring while the second one was better suited for engine design and emission prediction.

1. Introduction

The modeling of internal combustion engines has been largely developed during past years. For this purpose, a multitude of industrial codes dedicated to the simulation of the engines is available on market (GT-Power, Diesel-RK, Ricardo-Wave, Fluent, etc.). These codes, despite the fact that they can be useful for predicting engine performances, are expensive for third world's university laboratory and their source codes are practically impossible to modify to implement new model or functions.

When modeling compression engine different approaches can be used with different level of complexity, such as thermodynamic 0D models, quasi-dimensional multizone models, and computational fluid dynamics (CFD) models [1, 2].

For this study a quasi-dimensional approach was selected; these models allows to compute efficient, economic, and

fast calculations of engine performances as a function of different engine parameters. Using these types of models we can compute the different stages of a diesel engine cycle as in compression, injection, ignition delay, and combustion and exhaust stage.

The evaluated models in this study will be evaluated in terms of accuracy and speed of calculation.

2. Governing Equations

2.1. Fuel Injection and Vaporization Model. For both models the fuel spray characteristic is modeled using the phenomenological model of Razleytsev [3] and Lyshevsky [4]. That model has been used and implemented in the so called RK-model [5] and its results. The main aim of this part of the model is to determine the finesse of the atomized fuel from the injector nozzle. The finesse of atomization is characterized by the calculated Sauter mean diameter of fuel droplet. The

model is a simple sequence of calculated parameters and is structured as follows.

First the average outflow velocity of fuel from the injector is calculated in m/s by

$$U_0 = \frac{24q_c \text{RPM}}{0.75\rho_f \pi d_c^2 i_c \varphi_{\text{inj}}}, \quad (1)$$

where q_c is the cyclic fuel supply in Kg/cycle; RPM is the crankshaft rotational speed in rpm; ρ_f is the density of the fuel in kg/m³; d_c is the diameter of the injector hole in mm; φ_{inj} is the duration of injection in degree of rotation of the crankshaft.

The criterion M characterizing the relationship between the surface tension force, inertia, and viscosity is calculated as follows:

$$M = \frac{\mu_f^2}{(d_c \rho_f \sigma_f)}. \quad (2)$$

where μ_f is the coefficient of dynamic viscosity of the fuel at a temperature of 323 K in Pa·s; σ_f is the coefficient of surface tension of the fuel at a temperature of 323 K in N/m.

Weber number characterizing the relationship between surface tension force and inertia is determined as

$$W_e = \frac{U_0^2 \rho_f d_c}{\sigma_f}. \quad (3)$$

The density of the charge at the end of the compression before the TDC is calculated as follows:

$$\rho_{\text{air}} = \frac{\mu_{\text{air}} M_v}{V_c}, \quad (4)$$

where $\mu_{\text{air}} = 28.9$ Kg/Kmole is the molecular mass of air; ρ_{air} is the density of air.

We then determine the fuel/air density ratio by

$$\rho = \frac{\rho_{\text{air}}}{\rho_f}. \quad (5)$$

Finally the Sauter mean diameter of the atomized fuel is calculated in micron by

$$d_{32} = \frac{10^6 E_{32} d_c M^{0.0733}}{(\rho W_e)^{0.266}}, \quad (6)$$

where E_{32} is an empirical factor depending on designs of the injector, whose recommended value is 1.7.

At this point the finesse of the pulverized fuel is determined and we can see it mainly depends on physical properties of the fuel such as viscosity and density. The next step of the model is to determine the kinetic of combustion of the atomized fuel, whose kinetic will be dependent of the earlier found Sauter mean diameter.

2.2. Model of the Kinetic of Combustion of the Atomized Fuel.

This part of the elaborated model will permit us to determine parameters of the process such as the evaporation rate of the atomized fuel, its ignition delay, and the duration of combustion.

Pressure in the cylinder at the end of the compression before the TDC is

$$P_c = P_0 \varepsilon^{1.37}, \quad (7)$$

where P_0 is the reference pressure which in our case corresponds to the inlet manifold pressure.

We then determine the theoretical constant of evaporation of the fuel by

$$b_{\text{it}} = \frac{K}{d_{32}^2}, \quad (8)$$

where $K = 1/P_c \cdot 10^6$ is the evaporation constant related to cylinder pressure in m²/s

$$\tau_{\text{ev}} = \frac{A_z}{(b_{\text{it}} \lambda^{0.6})}, \quad (9)$$

where A_z is a constant characterizing the duration of evaporation of large drops in diesel engine in 1/s and its value is given as 2.4 in [3] but Kuleshov [5] used it as weight coefficient that can be varied in order to match experimental data; λ is the coefficient of excess air.

The full duration of combustion is then calculated as

$$\phi_z = \phi_{\text{inj}} - \text{ID} + 6\text{RPM} \tau_{\text{ev}}, \quad (10)$$

with ID being the ignition delay computed using the formula of Hardenberg and Hase [6] in both models

ID

$$= [0.36 + 0.22\bar{U}_p] \times \exp \left[E_a \cdot \left(\frac{1}{RT_{\text{im}} \varepsilon^{n_c-1}} - \frac{1}{17190} \right) + \left(\frac{21.2}{P_{\text{im}} \varepsilon^{n_c} - 12.4} \right)^{0.63} \right]. \quad (11)$$

The value of the apparent activation energy E_a in this correlation is given by $E_a = 618840/(CN + 25)$; however, this value was computed for the particular experiment reported in [6] and needs to be corrected in order to be used for different experimental conditions. In order to match experimental ignition delay values, especially for biodiesel fuel, the method proposed by Aghav et al. [7], where the value 618840 can be varied from the initial 618840 to higher values, was used.

2.3. Heat Release and Heat Transfer Laws. For the two models, we used a double Wiebe function [8] to model the heat release rate and the Woschni [9] law for heat transfer simulation.

3. Combustion Models

3.1. *Method 1: Combustion Model Based on Borman and Krieger [10].* This method is a single zone model based on the first law of thermodynamics, mass conservation, and ideal gas laws. Following that we can write the governing equation for calculating variation of in-cylinder pressure with respect to crank angle as [11]

$$\frac{dQ_{inj} - dQ_{loss}}{d\theta} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} P \frac{dV}{d\theta} + \frac{1}{\gamma - 1} V \frac{dP}{d\theta}. \quad (12)$$

The Krieger and Bormann algorithm is based on polynomial fitting constant to compute the adiabatic index (ratio of specific heat) as function of crank angle. The fitting coefficients can be found in the Appendix.

The internal energy of combustion products at equilibrium for a reaction between air and a hydrocarbon C_nH_{2n} is given as

$$u = \frac{A - B}{\lambda + u_{corr}}, \quad (13)$$

where

$$A = a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4 + a_5 T^5; \quad (14)$$

$$B = b_0 + b_1 T + b_2 T^2 + b_3 T^3 + b_4 T^4;$$

$u_{corr} = c_u \exp(D_\lambda + E_\lambda + F_{PT\lambda})$ is the correction factor for the internal energy accounting for dissociation

$$D_\lambda = d_0 + d_1 \cdot \lambda^{-1} + d_3 \lambda^{-3};$$

$$E_\lambda = \frac{(e_0 + e_1 \lambda^{-1} + e_3 \lambda^{-3})}{T};$$

$$F_{PT\lambda} = \left[f_0 + f_1 \lambda^{-1} + f_3 \lambda^{-3} + \frac{(f_4 + f_5 \lambda^{-1})}{T} \right] \log(f_6 \cdot P). \quad (15)$$

The gas constant is computed as

$$R = 0.287 + \frac{0.020}{\lambda} + R_{corr}, \quad (16)$$

with $R_{corr} = c_r \exp(r_0 \log \lambda + (r_1 + r_2/T) + r_3 \log(f_6 P))/\lambda$.

The adiabatic index (ratio of specific heat) is computed as

$$\gamma = 1 + \frac{R}{c_v}, \quad (17)$$

with $c_v = \partial u / \partial T$.

3.2. *Method 2: Combustion Model Based on Olikara and Bormann Method [12, 13].* This model is a two-zone thermodynamic model where the thermodynamics properties of

combustion products and fuel are determined using polynomial curve fitted data from the Chemkin [14] or JANAF [15] tables and are given by

$$\frac{c_p}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4;$$

$$\frac{h}{RT} = a_1 + \frac{a_2}{2} T + \frac{a_3}{4} T^2 + \frac{a_4}{4} T^3 + \frac{a_5}{5} T^4 + a_6 \frac{1}{T}; \quad (18)$$

$$\frac{s}{R} = a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3}{2} T^2 + \frac{a_4}{3} T^3 + \frac{a_5}{4} T^4 + a_7.$$

The in-cylinder pressure and temperature of burned and unburned gases derivative can be calculated following Ferguson's algorithm [13, 16] by

$$\frac{dP}{d\theta} = \frac{A + B + C}{D + E};$$

$$\frac{dT_b}{d\theta} = \frac{-h(\pi b^2/2 + 4V/b)x^{1/2}T_b - T_w}{vmc_{pb}x} + \frac{v_b}{c_{pb}} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right) \left(\frac{dP}{d\theta} \right) + \frac{h_u - h_b}{xc_{pb}} \left[\frac{dx}{d\theta} - x - x^2 \frac{C}{\omega} \right]; \quad (19)$$

$$\frac{dT_u}{d\theta} = \frac{-h(\pi b^2/2 + 4V/b)x^{1/2}T_u - T_w}{vmc_{pu}x} + \frac{v_u}{c_{pu}} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right) \left(\frac{dP}{d\theta} \right) + \frac{h_u - h_b}{xc_u} \left[\frac{dx}{d\theta} - x - x^2 \frac{C}{\omega} \right],$$

where

$$A = \frac{1}{m} \left(\frac{dV}{d\theta} + \frac{VC}{\omega} \right);$$

$$B = h \frac{(dV/d\theta + VC/\omega)}{\omega m} \times \left[\frac{v_b}{c_{pb}} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} x^{1/2} \frac{T_b - T_w}{T_b} + \frac{v_u}{c_{pu}} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} (1 - x^{1/2}) \frac{T_u - T_w}{T_u} \right];$$

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

$$D = x \left[\frac{v_b^2}{c_{pb} T_b} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + \frac{v_b}{P} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \right];$$

$$E = 1 - x \left[\frac{v_u^2}{c_{pu} T_u} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + \frac{v_u}{P} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} \right]. \quad (20)$$

TABLE I: Olikara and Borman constants.

	A	B	C	D	E
$K_{p,1}$	0.432168	-0.112464×10^5	0.267269×10^1	-0.745744×10^{-4}	0.242484×10^{-8}
$K_{p,2}$	0.310805	-0.129540×10^5	0.321779×10^1	-0.738336×10^{-4}	0.344645×10^{-8}
$K_{p,3}$	-0.141784	-0.213308×10^4	0.853461	0.355015×10^{-4}	-0.310227×10^{-8}
$K_{p,4}$	0.150879×10^{-1}	-0.470959×10^4	0.646096	0.272805×10^{-5}	-0.154444×10^{-8}
$K_{p,5}$	-0.752364	0.124210×10^5	-0.260286×10^1	0.259556×10^{-3}	-0.162687×10^{-7}
$K_{p,6}$	-0.415302×10^{-2}	0.148627×10^5	-0.475746×10^1	0.124699×10^{-3}	-0.900227×10^{-8}

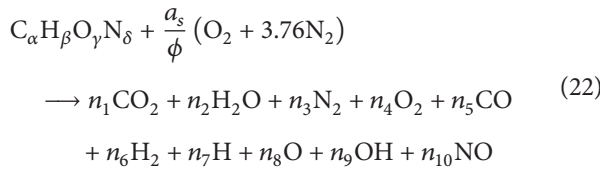
The equations of state of the mixture are given by

$$\begin{aligned} \frac{du}{d\theta} &= \left(c_p - \frac{Pv}{T} \frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right) \frac{dT}{d\theta} - \left(v \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} + \frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right) \right) \frac{dP}{d\theta}; \\ \frac{dv}{d\theta} &= \frac{v}{T} \frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \frac{dT}{d\theta} - \frac{v}{P} \frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \frac{dP}{d\theta}; \\ \frac{ds}{d\theta} &= \left(\frac{c_p}{T} \right) \frac{dT}{d\theta} - \frac{v}{T} \frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \frac{dP}{d\theta}, \end{aligned} \quad (21)$$

with $(\partial h/\partial T)_p = c_p$.

The combustion products are evaluated assuming that they are in equilibrium at a given temperature and pressure. Using Olikara and Borman [12] method we find combustion products mole fractions and we can then find the thermodynamic property of the mixture as in entropy, specific volume, enthalpy, and internal energy.

Considering the combustion reaction of a hydrocarbon



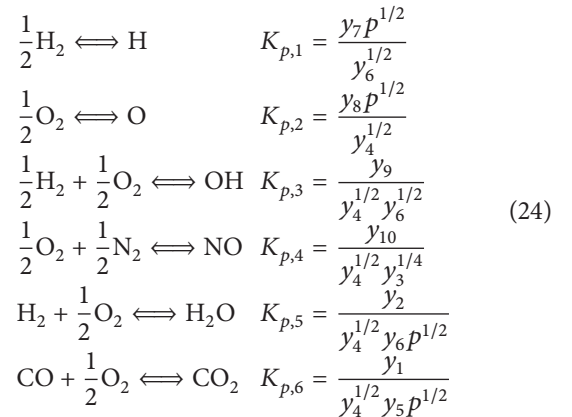
we then have

$$\begin{aligned} C : \alpha &= (y_1 + y_5) T_m; \\ H : \beta &= (2y_2 + 2y_6 + y_7 + y_9) T_m; \\ O : \gamma + \frac{2a_s}{\phi} &= (2y_1 + y_2 + 2y_4 + y_5 + y_8 + y_9 + y_{10}) T_m; \\ N : \delta + \frac{2 \cdot 3.76a_s}{\phi} &= (2y_3 + y_{10}) T_m; \end{aligned} \quad (23)$$

y_i is the mole fraction of the i th combustion specie at equilibrium and T_m the total number of mole. Following that we can write $\sum_{i=1}^{10} y_i - 1 = 0$.

The system of equation comprises 10 unknowns and 4 equations; we then need 6 complementary equations in order

to be able to solve the system. For that we introduce six gas phase equilibrium reactions constant



with p representing the pressure at which the reaction occurs in atmosphere. The reactions constants are computed using the following expression:

$$\log K_{p,i} = A \log(T/1000) + B/T + C + DT + ET^2 \text{ with the constants } A, B, C, D, \text{ and } E \text{ given in Table 1.}$$

We find ourselves with a set of 11 nonlinear equations with 11 unknowns which are solved using Newton Raphson iteration. A detailed description of the resolution algorithm can be found in [13]. The method was implemented using a modified Matlab script provided by [16] to insert new subroutines of the fuel injection and pulverization parameters as well as the biodiesel constant and the double Wiebe function of heat release rate.

4. Results and Discussion

For validation purposes the two models were implemented and compared with experimental results from [17], the engine characteristics are given in Table 2 where fuel injection timing refers to the actual crankshaft angle at which fuel starts coming out of the nozzle. Two sets of calculation were performed, one for diesel fuel and the second for biodiesel fuel. The characteristics of diesel and biodiesel fuel were taken from [17, 18] for method 1. To simulate biodiesel combustion for method 2 we used methyl butanoate thermodynamic data as surrogate [14].

The experimental imep (indicative mean effective pressure) was not given in the experimental work reported by [17], it was therefore evaluated using the experimental pressure

TABLE 2: Engine specifications.

Number	Particular	Specifications
1	Make	Kirloskar oil engine
2	Model	DAF 8
3	Rated brake power (kW)	6
4	Rated speed (rpm)	1500
5	Number of cylinder	1
6	Bore × stroke (mm)	95 × 110
7	Compression ratio	17.5 : 1
8	Fuel injection timing	23°

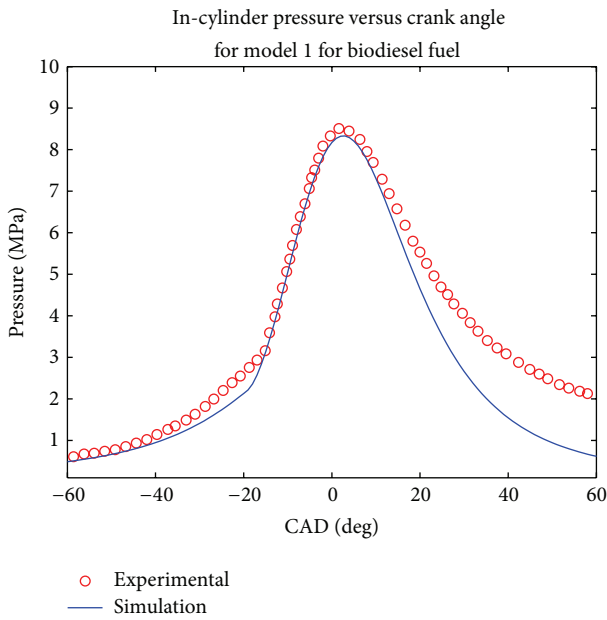


FIGURE 1: Comparison of computed and experimental pressure trace for model 1 for biodiesel fuel.

trace by integrating the area under the P - V diagram using the trapezoidal rule, and the formula used was then

$$\text{imep} = \int_{V_s}^{V_f} \frac{PdV}{V_d} = \sum_{i=1}^n \frac{(v_{i+1} - v_i)(P_i + P_{i+1})}{2} \quad (25)$$

with V_d being the displaced volume of the engine, in m^3 .

Simulations were computed at rated engine speed and the pressure plot was made and compared with the experimental results (Figures 1, 2, 3, and 4). Both models evaluated the combustion duration at 72 CAD and 87 CAD, respectively, for diesel and biodiesel fuel. This can be explained by the fact the viscosity and density of biodiesel are significantly higher than that of conventional diesel, which tends to generate pulverized droplets with higher mean diameter that tend to burn slower.

The pressure traces obtained from the two model show that they reproduce well the in cylinder pressure for both type of fuels in the given engine configuration. It can be seen that the maximum pressure decreases when biodiesel fuel is used for the two simulations, which is equally the

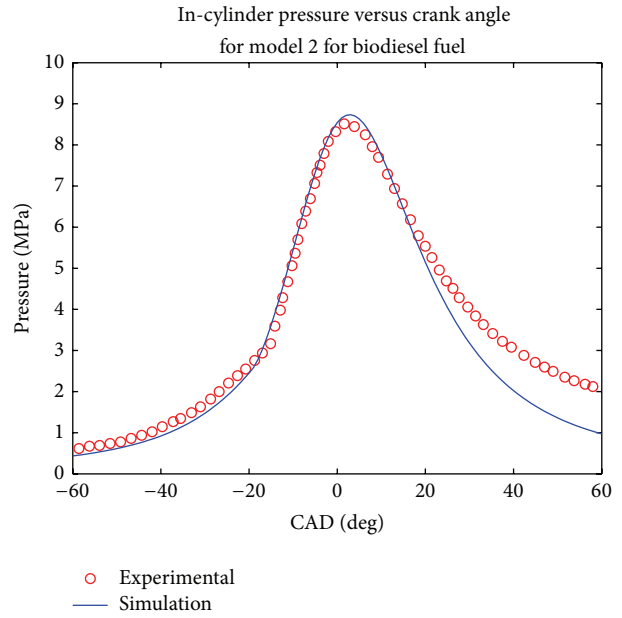


FIGURE 2: Comparison of computed and experimental pressure trace for model 2 for biodiesel fuel.

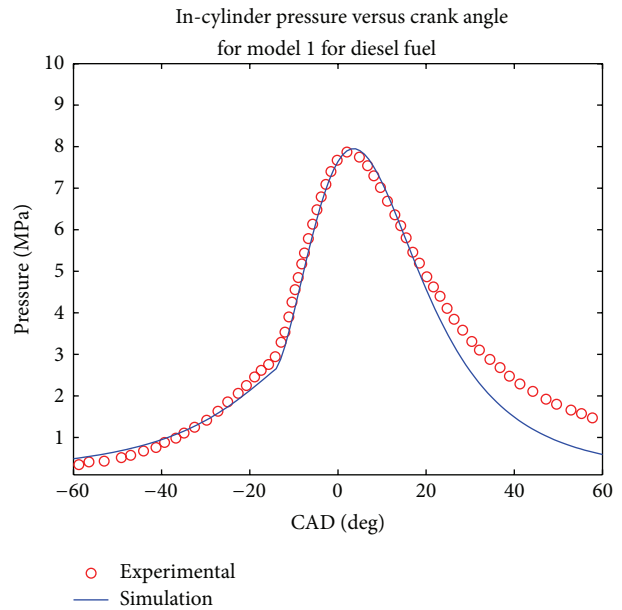


FIGURE 3: Comparison of computed and experimental pressure trace for model 1 for diesel fuel.

trend observed experimentally and in other works such as [19–22]. This was expected since biodiesel fuel has higher oxygen content; the combustion coefficient tends to be higher in that case. Another trend observed in the pressure trace is that the cylinder pressure tends to be under predicted during the exhaust phase, especially for biodiesel fuel; this could be explained by the experimental conditions uncertainty.

The values of computed parameters are given in Table 3 in terms of maximum pressure, imep, maximum pressure occurrence, and ignition delay. In order to have an evaluation

TABLE 3: Comparison of simulated engine's combustion performances with experimental data.

	Diesel			Biodiesel		
	Model 1	Model 2	Experiment	Model 1	Model 2	Experiment
Max pressure (MPa)	7.948	7.87	7.87	8.37	8.73	8.53
Imep (MPa)	0.52	0.47	0.6	0.522	0.6	0.7
Maximum pressure occurrence (CA after TDC)	4	3	5.8	3	3	5
Ignition delay (CAD)	8.69	8.69	8.5	4.37	4.37	4.3

TABLE 4: Krieger and Borman coefficients.

	0	1	2	3	4	5	6
a		0.692	$3.917e-5$	$5.29e-8$	$-2.29e-11$	$2.7758e-17$	
b	3049.33	-0.057	$-9.5e-5$	$2.153e-8$	$-2e-12$		
c_u	2.32584						
c_r	0.004186						
d	10.41066	7.85125		-3.71257			
e	-15001	-15838		9613			
f	-0.10329	-0.38656		0.154226	-14.763	118.27	14.503
r	-0.2977	11.98	-25442	-0.4354			

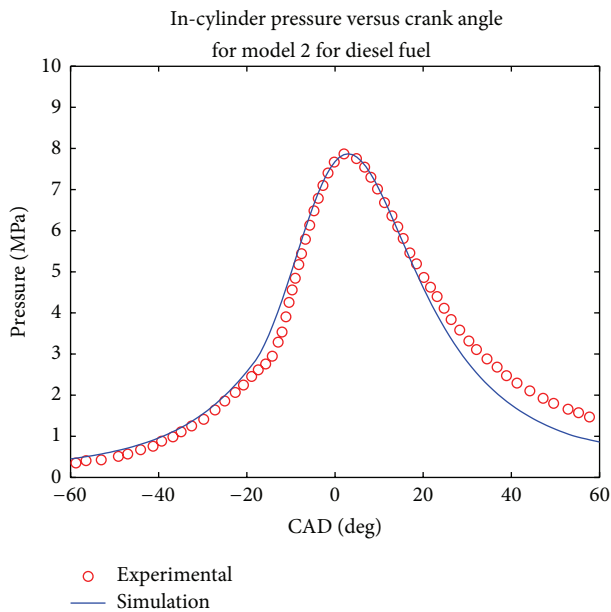


FIGURE 4: Comparison of computed and experimental pressure trace for model 2 for diesel fuel.

of the accuracy of both model, the mean relative error was calculated according to the four parameters given above, it was then observed that the first model gave a mean relative error of 18% while the second one had given a mean relative error of 11%.

5. Computation Speed

Another assessment made for the two models was the speed of computation; the first model was computed in 6

seconds, while the second took about 40 to 45 second to run completely on 2 Ghz dual core Pentium personal computer.

With this assessment, we can say that the first model could be suitable for real time engine control while the second could be used for engine's design and also emission evaluation since it computes in cylinder pressure by determining combustion species states at each time step. Another development that could be made for the second model can be the implementation of the Zeldovich mechanism [1, 11] to compute nitric oxide emissions.

6. Conclusion

The aim of the present study was to develop and implement two different models for diesel engine fuelled on biodiesel based on tabulated chemistry. The two models showed good predictability of engine performance, with the second approach giving a better accuracy. The first approach was faster to compute the cylinder pressure than the second and was found more suitable for engine monitoring and control while the second one was found better suited for engine design and emission prediction.

Appendix

For more details see Table 4.

Conflict of Interests

The authors declare that there is no conflict of interests regarding the publication of this paper.

References

- [1] P. A. Lakshminarayanan and Y. V. Aghav, *Modelling Diesel Combustion*, Springer, Amsterdam, The Netherlands, 2010.

- [2] B. Challen and R. Baranescu, *Diesel Engine Reference Book*, Butterworth-Heinemann, Boston, Mass, USA, 2nd edition, 1999.
- [3] N. F. Razleytsev, *Combustion Simulation and Optimization in Diesels*, Vischa Shkola, Kharkiv, Ukraine, 1980, (Russian).
- [4] A. S. Lyshevsky, *Fuel Atomization in Marine Diesels (In Russian)*, Leningrad, 1971.
- [5] A. S. Kuleshov, "Multi-zone diesel spray combustion model for thermodynamic simulation of engine with PCCI and high EGR level," *SAE International Journal of Engines*, vol. 2, no. 1, pp. 1811–1834, 2009.
- [6] H. O. Hardenberg and F. W. 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 790493, 1979.
- [7] Y. Aghav, V. Thatte, M. Kumar et al., "Predicting ignition delay and HC emission for DI diesel engine encompassing EGR and oxygenated fuels," Tech. Rep., SAE International, 2008.
- [8] O. Grondin, *Modélisation du moteur à allumage par compression dans la perspective du contrôle et du diagnostic [Ph.D. thesis]*, Université de Rouen, Rouen, France, 2004.
- [9] G. Woschni, "A universally applicable equation for the instantaneous heat transfer coefficient in the internal combustion engine," SAE Technical Paper no. 670931, 1967.
- [10] R. B. Borman and G. L. Krieger, "The computation of apparent heat release for internal combustion," in *ASME 66-WA/DGP-4*, ASME, 1966.
- [11] J. B. Heywood, *Internal Combustion Engine Fundamentals*, McGraw-Hill, New York, NY, USA, 1988.
- [12] C. Olikara and G. Borman, "A computer program for calculating properties of equilibrium combustion products with some applications to I.C. engines," SAE Technical Paper 750468, SAE International, 1975.
- [13] C. R. Ferguson and A. T. Kirkpatrick, *Internal Combustion Engines: Applied Thermosciences*, Wiley, New York, NY, USA, 2nd edition, 2000.
- [14] E. M. Fisher, W. J. Pitz, H. J. Curran, and C. K. Westbrook, "Detailed chemical kinetic mechanisms for combustion of oxygenated fuels," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 28, no. 2, pp. 1579–1586, 2000.
- [15] NIST, *JANAF Thermochemical Tables*, NSRDS-NBS 37, 1971.
- [16] D. R. Buttsworth, "Spark ignition internal combustion engine modeling using Matlab," Faculty of Engineering & Surveying Technical Reports, University of Southern Queensland, Toowoomba, Australia, 2002.
- [17] P. K. Sahoo and L. M. Das, "Combustion analysis of Jatropha, Karanja and Polanga based biodiesel as fuel in a diesel engine," *Fuel*, vol. 88, no. 6, pp. 994–999, 2009.
- [18] X. Wang, H. Zuohua, A. K. Olawole, Z. Wu, and N. Keiya, "An experimental investigation on spray, ignition and combustion characteristics of biodiesels," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 11, pp. 2071–2077, 2011.
- [19] M. Lapuerta, O. Armas, and J. Rodriguez-Fernandez, "Effect of biodiesel fuels on diesel engine emissions," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 34, no. 2, pp. 198–223, 2007.
- [20] G. Knothe, J. V. Gerpen, and J. Krahl, *The Biodiesel Handbook*, AOCS Press, Champaign, Ill, USA, 2005.
- [21] M. N. Azuwir, M. Z. Abdulmuin, and A. H. Adom, "Modelling and validation of automotive engine fuelled with palm oil biodiesel," *International Journal of Engineering and Technology*, vol. 3, no. 6, pp. 582–586, 2011.
- [22] B. Tesfa, R. Mishra, F. Gu, and A. D. Ball, "Combustion characteristics of CI engine running with biodiesel blends," in *Proceedings of the International Conference on Renewable Energies and Power Quality*, Environment and Power Quality European Association for the Development of Renewable Energies, Las Palmas, Spain, 2011.

**ARTICLE ENERGY AND POWER
ENGINEERING**

Simulation of a DI Diesel Engine Performance Fuelled on Biodiesel Using a Semi-Empirical 0D Model

Claude Valery Ngayihi Abbe^{1,2}, Robert Nzengwa^{1,2}, Raidandi Danwe²,
Zacharie Merlin Ayissi², Marcel Obounou³

¹Laboratory of Applied Mathematics, National Advanced School of Engineering, University of Yaoundé, Yaoundé, Cameroon

²Faculty of Industrial Engineering, University of Douala, Douala, Cameroon

³Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Yaoundé, Yaoundé, Cameroon

Email: ngayihiclaude@yahoo.fr

Received October 17, 2013; revised November 17, 2013; accepted November 24, 2013

Copyright © 2013 Claude Valery Ngayihi Abbe *et al.* This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited. In accordance of the Creative Commons Attribution License all Copyrights © 2013 are reserved for SCIRP and the owner of the intellectual property Claude Valery Ngayihi Abbe *et al.* All Copyright © 2013 are guarded by law and by SCIRP as a guardian.

ABSTRACT

Diesel engines have proven over the years important in terms of efficiency and fuel consumption to power generation ratio. Many research works show the potential of biodiesel as a substitute for conventional gasoil. Mainly, previous and recent researches have focused on experimental investigation of diesel engine performance fuelled by biodiesel. Researches on the mathematical description of diesel engine process running on biodiesel are scarce, and mostly about chemical and thermodynamic description of the combustion process of biodiesel rather than performance studies. This work describes a numerical investigation on the performance analysis of a diesel engine fuelled by palm oil biodiesel. The numerical investigation was made using a semi empirical 0D model based on Wiebe's and Watson's model which was implemented via the open access numerical calculation software Scilab. The model was validated first by comparing with experimental pressure and performance data of a one cylinder engine at rated speed and secondly by comparing with a six cylinders engine performance data at various crankshaft rotational speeds. Simulations were then made to analyze the engine performance when running on biodiesel. The calculations were made at constant combustion duration and constant coefficient of excess air. Results showed that the model matches the overall experimental data, such as the power output and peak cylinder pressure. The ignition delay was somehow underestimated by the model for the first experiment, which caused a slight gap on in cylinder pressure curve, whereas it predicted the average ignition delay fairly well for the second set of validation. The simulations of engine performance when running on biodiesel confirmed results obtained in previous experimental researches on biodiesel. The model will be further investigated for engine control when shifting to biodiesel fuel.

Keywords: Semi-Empirical 0D Model; Scilab; Biodiesel; Performance; Diesel Engine

1. Introduction

Reaching lower toxicity of exhaust gases, whilst reducing fuel consumption is one of the modern trends in automobile engineering research. The characteristics of fuel play an important role in the performances of the engine. Gasoil has been for years the main fuel for diesel engine but, due to the reducing availability of fossil energy resources and the stricter rules on engine emission [1], and researchers have been investigating the use of alternative fuels. Biodiesel, which is obtained through transesterification process of vegetable oil, has been proven to be a high potential substitute for conventional gasoil [1-3].

Simulation and mathematical modeling of diesel engine are scientific topics carried out by several research works. Nowadays, there mainly exist three types of approaches for diesel engine simulation: 0 dimensional thermodynamic, quasi dimensional and multi dimensional (Computational Fluid Dynamic). A well documented discussion on these models can be found in [4].

Many commercial computer codes based on computational fluid dynamic (CFD) [5] provide useful tools to simulate in diesel engine processes. CFD permits simulating real engine conditions with the aim of understanding how physical and chemical conditions will affect engine performances. One of the main disadvantages of

CFD tools is that they are too slow to be implemented in car vehicles control software and their use as optimization or simulation tools which have a very high computer cost. Car control software mostly uses semi empirical 0D model due to their simplify approach, their quickness of implementation inside the electronic unit control of the engine. For engine simulation and optimization, several commercial codes using semi empirical models exist [6, 7]. The cost for license acquisition and the access to source codes are some of the limitations of this software in term of scientific research. To get away from these limitations we used an open source numerical calculation software called Scilab [8] in which we implemented our model.

The model we implemented in our study is based on the engine performance Wiebe model [9]. It has been for years used in diesel engine simulation, and it requires adjustable experimental coefficients related to engine specification. Since the scope of the work is about defining effect of biodiesel on engine performances, the experimental coefficient can be considered constant since they don't depend on the fuel used.

One of the limitations of the Wiebe model is that it doesn't predict well the combustion during the premix phase of combustion. That limitation is overcome by Watson model of heat release in diesel engine [4,10]. Both Wiebe and Watson model don't take into account the ignition delay of the injected fuel in the cylinder, thus obliging us to find a suitable relationship to predict ignition delay. Pischinger *et al.* [11] defined a correlation between the length of the fuel spray at which ignition occurs and the temperature and pressure at the start of injection angle. Others strong relationship between ignition delay and start of injection angle was experimentally derived by Razlejtsev [12] and Lechivskii [13]. In these relationships, the ignition delay is described using an Arrhenius correlation between the pressure and temperature at start of injection angle and activation energy of the fuel. However, these relationships don't give a methodology to compute ignition delay for other types of fuels such as biodiesel. Most of the coefficients used in these relationships refer to experiments conducted in engine running under conventional diesel, thus leading one to the search of suited relationship which can take into account certain physical and chemical specificities of fuel used.

The present work, describes a semi empirical model used to predict how performances parameters such as thermal efficiency, specific fuel consumption, indicative pressure and indicative pressure will vary depending type of fuel used. The model is developed Fuel for diesel engine control purpose when running on biodiesel. Spray behavior of biodiesel is not covered in this work but some useful computational studies about the topic can be found in [14,15], and it will be inserted in further development of the model.

2. Governing Equations

The model used in the present study is a semi-empirical model, based on the work of I. I. Wiebe [1] and the heat release calculation model of Watson [2] and the work of Grondin [3], **Figure 1** shows a flow chart description of the model, where one can see the input information needed as well as the output data obtained from the model. The next section presents the main governing equations of the model as well as the constant used for our calculations. The model was implemented using an open source calculation code for rapid treatment of the information.

2.1. Ignition Delay Model

The initial Wiebe model was not taking into account the ignition delay period when calculating the combustion process. Wiebe model computes the heat release starting from the injection start angle, whereas it has been shown that ignition occurs after a certain amount of time after injection (ignition delay), due to complex chemistry processes.

In our model we used the model proposed by Hardenberg and Haze [4] which takes into account one of the main properties of the fuel which is believed to influence the delay period as in the cetane number.

$$ID = \left[0.36 + 0.22 \overline{U_p} \right] \exp \left[\frac{618840}{CN + 25} \cdot \left(\frac{1}{RT_{im} e^{n_c - 1}} - \frac{1}{17190} \right) + \left(\frac{21.2}{P_{im} e^{n_c} - 12.4} \right)^{0.63} \right], \quad (1)$$

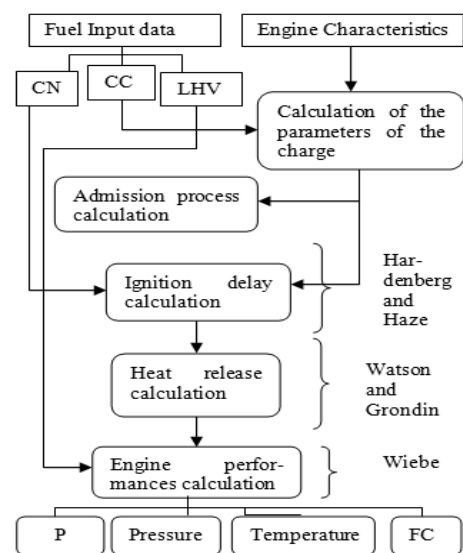


Figure 1. Model algorithm; CN—Cetane number; CC—Chemical composition; P—Power; FC—Fuel consumption; LHV—Lower heating value.

where U_p is the mean piston speed in m/s; R is the gas constant in J/kmol-K; ε is the compression ratio of the engine; CN is the cetane number of the fuel P_{im} and T_{im} are the pressure in bar and temperature in Kelvin at the intake manifold; n_c is the polytropic exponent for compression.

2.2. Step by Step Computation

The next step of the model is the fuel engine cycle model; here we determine the pressure inside the cylinder at any angle of rotation of the crankshaft taking into account the start of injection angle the duration of combustion and other parameters. As a result one will be able to determine the different parameters characterizing the efficiency of work of the engine, such as the specific consumption, the effective power and efficiency. The model computes the full process taking place inside the cylinder, with the calculations being made for each stroke of engine cycle.

2.3. Admission Stroke

The pressure of the working medium at the end of the admission stroke is given in Pascal by

$$P_a = \frac{1}{\varepsilon} \left[(\varepsilon - 1) \eta_v \cdot P_k \cdot \frac{T_k + \Delta T}{T_k} + P_r \right], \quad (2)$$

where η_v is the admission coefficient, P_k is the pressure at inlet valves in MPa, T_k the temperature at inlet valves in K, ΔT is the temperature gradient due to the heating of engine elements in MPa, P_r is the residual gases pressure in MPa.

The temperature of the working medium at the end of the admission stroke is given in Kelvin by

$$T_a = \frac{T_k + \Delta T + \zeta T_r}{1 + \zeta}, \quad (3)$$

where T_k is the temperature of residual gases in K, ζ is the coefficient of residual gases.

The theoretically necessary (stoichiometric) quantity of air for the combustion of 1 kg of fuel is given as L'_0 , its value is dependent of the chemical composition of the fuel used and is determined by

$$L'_0 = \frac{1}{0.23} \left(\frac{8}{3} C + 8H - O \right), \quad (4)$$

where, C , H and O are respectively, the ratio of carbon, hydrogen and oxygen in the fuel chemical composition.

The specific volume of the working medium at the end of the admission stroke is given in m^3/kg by

$$v_a = 0.008314 \frac{T_a}{\mu_{air} P_a}, \quad (5)$$

where μ_{air} is the molecular mass of air.

2.4. Compression Stroke

The parameters of the working medium during the compression stroke are computed using the polytropic process equation.

The pressure at a given time is given in MPa by

$$P = P_a \left(\frac{v_a}{v} \right)^{n_c} \quad (6)$$

where v is the current value of specific volume defined as

$$v = \left(\frac{v_a}{\varepsilon} \right) \left(1 + \frac{\varepsilon - 1}{2} \sigma \right), \quad (7)$$

σ is the kinematic function of the motion of the piston

$$\sigma = 1 - \cos \varphi + \frac{1}{\lambda} \left(1 - \cos(\arcsin(\lambda \sin \varphi)) \right), \quad (8)$$

where λ is the ratio of the lengths of the crankshaft and the connecting rod, φ is the current angle of rotation of the crankshaft.

The specific work of compression is then determined in MJ/Kg by

$$l_{ay} = \frac{(P_a v_a - P_y v_y)}{n_c - 1} \quad (9)$$

2.5. Power Stroke

2.5.1. Heat Release Model

The admission, compression and ignition delay phase being computed, the next step of the model is the heat release calculation. Our heat release model computes two phases of the combustion process, the premixed and diffusion phase.

The current fraction of fuel burnt $x = f(\varphi)$ —where φ is the current crankshaft position angle—is computed using a double Wiebe function [2], we then have

$$x = \beta x_p + (1 - \beta) x_d, \quad (10)$$

with x_p and x_d representing the fraction of fuel burnt in each phase of the combustion process, β representing the fraction of fuel injected during the premixed phase.

For each phase of the combustion phase (Equation 10) we can write

$$x_i = 1 - \exp \left[-a_i \left(\frac{\varphi - \varphi_{comb}}{\Delta \varphi_i} \right)^{m_i + 1} \right], \quad (11)$$

where a_i and m_i are experimental shaping coefficient of the Wiebe function; φ_{comb} is the start of ignition angle; $\Delta \varphi_i$ is the combustion duration for each phase.

The normalized combustion rate (1/deg) is computed by derivation of x_i about φ .

2.5.2. Combustion Model

The combustion effectiveness which accounts for heat loss (heat loss due to heat transfer to the walls, hydraulic losses due to the flow of gases) ratio is first defined by

$$\xi = \psi \delta \quad (12)$$

where δ is a heat release factor which takes into account the ration of unburned fuel; ψ —is a ratio of used heat.

The total specific heat of combustion used (instantaneous heat release) is given in MJ/Kg by

$$q_z = \frac{\xi H_u}{(1 + \gamma) \alpha L'_0 + 1}, \quad (13)$$

where H_u is the net calorific value of the used fuel in MJ/Kg and α is the coefficient of excess air and γ is the ratio of specific heat during the combustion process, according to [16] is value can be taken as constant going from 1.3 to 1.35.

Pressure calculation at any moment of the power stroke is computed using the first law of thermodynamic and can described for the evolution of the pressure/volume indicator diagram from a point 1 to 2 by

$$q_{1-2} = C_{v1-2} (T_2 - T_1) + \int_{v_1}^{v_2} p dv, \quad (14)$$

where: q_{1-2} specific heat used to increase the internal energy from point 1 to 2 in the diagram; C_{v1-2} is the average specific heat the working medium for constant pressure from point 1 to 2.

Assuming each volume step is small enough and using the trapezoidal method to simplify the integral in formula (14) and expressing C_{v1-2} in term of P_2 using the Mayer's formula, we determine the value of the pressure at any given time of the power stroke using the simplified equation

$$P_2 = \frac{2q_z \Delta x_{1-2} + p_1 \left(\left(\frac{\gamma+1}{\gamma-1} \right) \cdot v_1 - v_2 \right)}{\left(\frac{\gamma+1}{\gamma-1} \right) \cdot v_2 - v_1}, \quad (15)$$

Δx_{1-2} is the ratio of fuel burnt from point 1 to 2.

Specific work of gases during the combustion stroke is given in MJ/Kg by

$$L_{yz} = \sum_1^n \frac{p_1 + p_2}{2} (v_2 - v_1). \quad (16)$$

Further description of the model can be found in [9], here we presented the main equations for combustion that will have a greater impact on the engine performance calculation.

3. Results and Discussion

3.1. Model Validation

The validation of the model consisted in comparing ex-

perimental results from previous researches with simulation results using the model. For this purpose, experimental data obtained by Sahoo *et al.* [17] from a single cylinder diesel at rated speed were compared with the model simulation. To further investigate the validity of the model we proceeded to the simulation of a six cylinder direct injection diesel at different crankshaft rotational speed, results were compared with experimental data obtained by Ahmet *et al.* [18].

The simulation were performed on a 3 Go of RAM Dual core computer with a time step of 0.1 crank angle degrees, a full simulation took about 6 minutes to complete. The parameters of the model were adjusted to closely match the experimental results. The diffusive combustion duration was estimated about 75 and 60 degrees of rotation of the crankshaft for the first and second experiment respectively using least square fitting technique.

3.1.1. Experimental Setup

Tables 1 and 2 present the engines specifications for each experiment. The default injection timing for the second experiment was determined from the fuel line pressure diagram. The second experiment was performed under varying crankshaft rotational speed—1000, 1250, 1500, 1750 and 2000 rpm.

The calorific value of the diesel fuel was also modified for the second experiment to 42.5 MJ/kg to match experimental input data, remaining properties of the fuel were kept unchanged. To perform comparison we used fuel characteristics that were stated in the work of Sahoo *et al.* [17], but due to the lack of some relevant information that shall be given as entry parameters to our model we had to add them according to diesel fuel standards. Specifications of the validating fuel can be seen at **Table 3**.

3.1.2. Comparison of Experimental result with Simulation

Figure 2 shows the in cylinder pressure during the combustion phase for experiment number 1. It can be seen that the simulated curve has a similar shape with the experimental curve, the peak pressure, starting and ending pressure values are almost the same. The slight gap between the curves can be due to the fact that the ignition delay model underestimated the experimental ignition delay obtained.

Table 4 shows comparison of simulation results to experimental performances results. It can be seen than the peak pressure is estimated with good accuracy by the model. However the occurrence of the peak pressure is about six degrees earlier in the simulated result, this is an issue that should investigated in further researches. The break power is estimated with an accuracy of 95%,

Table 1. First experiment engine specifications.

No.	Particular	Specifications
1	Make	Kirloskar Oil engine
2	Model	DAF 8
3	Rated brake power (kW)	6
4	Rated speed (rpm)	1500
5	Number of cylinder	1
6	Bore × Stroke (mm)	95 × 110
7	Compression ratio	17.5:1
8	Fuel injection timing	23°

Table 2. Second experiment engine specifications.

No.	Particular	Specifications
1	Make	Ford
2	Model	6.0 Ford Cargo
3	Rated brake power (kW)	81
4	Rated speed (rpm)	2600
5	Number of cylinder	6
6	Bore × Stroke (mm)	104.8 × 114.9
7	Compression ratio	15.9:1
8	Fuel injection timing	20°

Table 3. Fuel specification used for model validation.

No.	Particular	Specifications
1	Make	Diesel
2	Calorific value	44 MJ/kg
3	Carbon content	87%
4	Hydrogen content	12.6%
5	Oxygen content	0.4%
6	Density (kg/m ³)	850
7	Viscosity at 40°C (Cst)	2.87
8	Cetane number	51

Table 4. First experiment comparison with simulation results.

	Experimental results	Simulation results
Ignition delay	8.5	6.88
Start of combustion BTDC	14.5	16.12
In cylinder maximum pressure (bar)	78.7	79.412
Peak pressure occurrence	5.8 ATDC	2.6 BTDC
Brake power	6	5.75

which is fairly acceptable. This proves that despite the slight gap observed our model can be used to estimate the overall performances for this particular engine.

The second experiment possessed a wider scope because it permitted to evaluate the model in a broader aspect. The compared experiment consisted in determining the engine performance at various crankshaft rotational speeds. **Table 5** shows the comparisons of engine per-

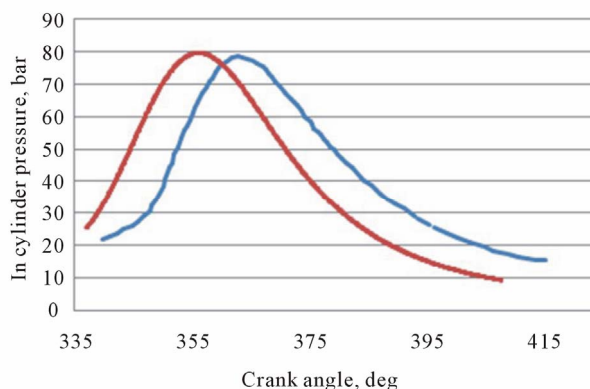


Figure 2. Experimental — and — simulated in cylinder pressure during combustion phase in the first experiment.

Table 5. Second experiment comparison with simulation results.

RPM	Brake power		Maximum in cylinder pressure, MPa		Maximum in cylinder pressure occurrence, CA ATDC	
	E	S	E	S	E	S
1000	32.3	33.38	8.04	7.89	5.3	5.8
1250	42.3	41.30	8.6	7.92	6.5	5.8
1500	52.5	48.83	7.95	7.85	6.2	6
1750	60.4	55.92	8.1	7.71	8.2	6.3
2000	68.3	62.56	8.04	7.56	7.4	6.4
RPM	BSFC, g/kWh		Ignition delay, CA			
	E	S	E	S		
1000	269.4	209.64	8.15	7.27		
1250	265.104	211.84	8.15	7.59		
1500	254.6	215.01	8.15	8.09		
1750	267.9	219.03	8.15	8.68		
2000	274.175	223.75	8.15	9.32		

CA—Crank angle, ATDC—After top dead center, E—Experiment, S—Simulation, BSFC—Break specific fuel consumption.

formances obtained from the experiment with those obtained using the present model.

As observed for the first experiment, the model predicts with good accuracy the power output and peak in cylinder pressure of the engine independently of crankshaft rotational speed.

The break specific fuel consumption is estimated with an accuracy of about 18%, this can be explained by the fact that the model doesn't take into account in a deeper aspect, the fuel injection process, the fuel flow, hydraulic losses, injector geometry and number. These parameters shall be investigated in future researches to improve the accuracy of the model.

The average simulated ignition delay matched the experimental result contrary to the result obtained in the first experiment. This lead to a reduction of the gap observed in the first simulation. It can be seen in **Figure 3**

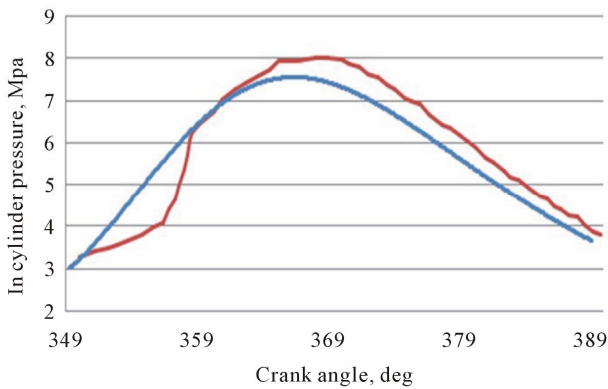


Figure 3. Experimental — and simulated — in cylinder pressure during combustion phase in the second experiment at 2000 rpm.

that the in cylinder curves better matched compared to the first experiment. This can be explained by the fact ignition delay models are often dependent of the experimental setup in which they were determined [4], thus giving slightly different results depending on the context where they are used. The motivation of the selection of our ignition delay model has been discussed above and the good accuracy of our results was encouraging.

These results show that the model predicts fairly well the overall engine performances of the investigated engines. It is worth noting that the model uses many experimental constant taken from [9,10,19,20]. The selection of these constants should be accurate to improve the accuracy of the model.

Most of the parameters of the model have to be adjusted in order to obtain a better fit with experimental results. A better use of the present model in engine setting-up and diagnostic situations can be achieved with preliminary experimental investigation on the specific engine investigated.

The model having been validated with relevant experimental results, and shown it can be used for engine performances predictions, it was further used for the evaluation of a direct injection engine fuelled by biodiesel fuel. This study follows in the next section.

3.1.3. Simulation of a DI Diesel Engine Performance Fuelled on Biodiesel

The final part of this study was the simulation of a DI diesel engine performance fuelled by palm oil biodiesel fuel. The properties of the biodiesel fuel are taken from [3] and are shown on **Table 6**.

Simulations were performed for unchanged engine parameters used for the first model validation. Result showed that peak cylinder was higher for biodiesel fuel as well as in cylinder temperature (**Figures 4 and 5**). This confirms results obtained from [3,17,21]. This can be due to the higher content of oxygen in biodiesel fuel that tends

Table 6. Biodiesel fuel specification.

No.	Particular	Specifications
1	Make	Biodiesel
2	Calorific value	40 MJ/kg
3	Carbon content	76.5%
4	Hydrogen content	12.3%
5	Oxygen content	11.1%
6	Density (kg/m ³)	883
7	Viscosity at 40°C (Cst)	6.83
8	Cetane number	52

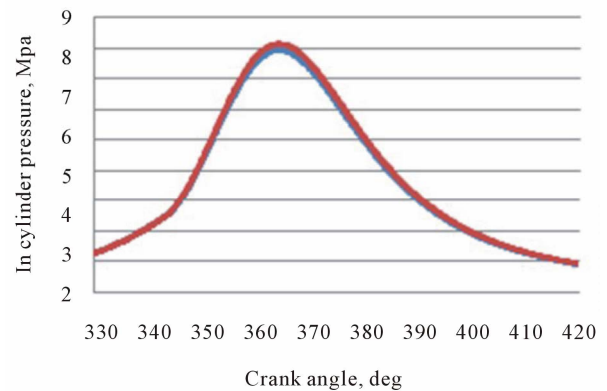


Figure 4. In cylinder pressure for diesel — and biodiesel — at nominal rpm.

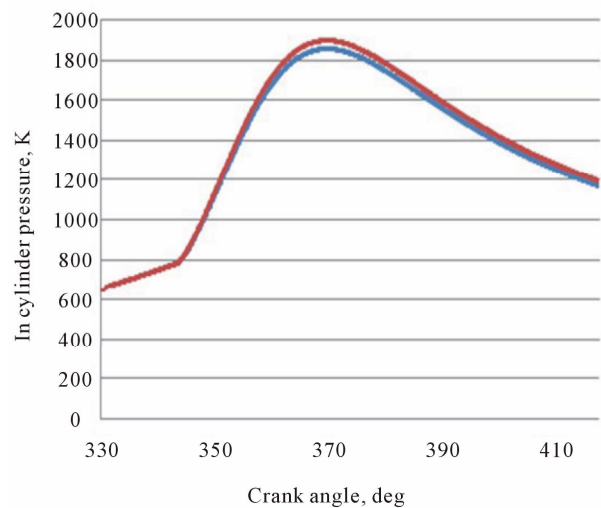


Figure 5. In cylinder temperature for diesel — and biodiesel — at nominal rpm.

to produce a higher heat release rate in the cylinder and a better burning rate.

Table 7 shows comparatives results of the engine performance when running on biodiesel and diesel fuel. The ignition delays value for both fuel are almost equal, this is due to their cetane numbers which are about the same value. Break powers obtained are also very close

Table 7. Comparison of simulated engine performance using biodiesel and diesel as fuel.

	Biodiesel	Diesel
Ignition delay	6.82	6.88
In cylinder maximum pressure (bar)	81.392	79.412
Break thermal efficiency	48.4%	48.0%
Brake power	5.748	5.747
Break specific fuel consumption (g/kWh)	185.73494	170.27237

with the biodiesel giving a slightly higher value. The main difference comes when analyzing the break specific fuel consumption (BSFC); it can be seen that BSFC is 10% higher for biodiesel than for conventional diesel. This is due to the lower value of the net calorific value of the biodiesel fuel. That means for equal power output one needs to spend more on fuel when using biodiesel as fuel for diesel.

Overall, the model is predicting well the trends observed in different previous researches, its further development is expected to provide an engine analysis tool for simulation, conception and diagnostic.

4. Conclusions

A semi empirical 0D model was elaborated to predict diesel engine performance when running on biodiesel. The model was first validated with experimental results from a single cylinder engine then simulations were made to analyze the engine performance when running on biodiesel compared to the performances obtained with diesel fuel. Final results of the study showed that, the model matches the overall experimental data, such as the power output and peak cylinder pressure. The simulations of engine performance when running on biodiesel were in good accordance with results obtained in previous experimental researches on biodiesel.

The ignition delay was underestimated by the model for the first experiment and well predicted for the second. A slight gap in cylinder pressure curve was observed for both experimental comparison but it didn't affect the overall engine performances prediction. The model can be extended to a "decision making" tool for diesel engine setup and diagnostic.

Further researches will be made to better the accuracy of the model and to account for fuel injection study. The model will be further investigated for engine control when shifting to biodiesel fuel.

5. Acknowledgements

The authors have greatly benefited from discussion and comments with Professor Manaswita BOSE from the Indian Institute of Technology of Bombay on the present research.

REFERENCES

- [1] D. Ayhan, "Progress and Recent Trends in Biofuels," *Progress in Energy and Combustion Science*, Elsevier, 2007, pp. 1-18.
- [2] M. Lapuerta, O. Armas and J. R. Fernandez, "Effect of Biodiesel Fuels on Diesel Engine Emissions," *Progress in Energy and Combustion Science*, Elsevier, 2008, pp. 198-223.
- [3] A. P. Sathiyagnanam and C. G. Saravanan. "Experimental Studies on the Combustion of a Direct Injection Engine Fueled with SCR," *Proceedings of the World Congress on Engineering*, 6-8 July 2011, London.
- [4] P. A. Lakshminarayanan and Y. V. Aghav, "Modelling Diesel Combustion," Springer, 2009.
- [5] Y. Shi, H.-W. Ge and R. D. Reitz, "Computational Optimization of Internal Combustion Engines," Springer, 2011. <http://dx.doi.org/10.1007/978-0-85729-619-1>
- [6] Technologies Gamma, "Gamma Technologies—Engine and Vehicle Simulation," 2013. <http://www.gtisoft.com/>
- [7] P. L. C. Ricardo, "Home—Ricardo," 2013. <http://www.ricardo.com/en-GB/>
- [8] S.A.S Scilab Enterprises, "Home—Scilab," Scilab Enterprises S.A.S, 2013. <http://www.scilab.org/en>
- [9] I. I. Wiebe, "Novelty on Working Process of Internal Combustion Engine (Speed of Combustion and Working Process in Engine) (In Russian)," MachGiz, Sverdlovsk, 1962.
- [10] G. Olivier, "Modélisation du Moteur à Allumage par Compression dans la Perspective du Contrôle et du Diagnostic (PhD Thesis)," Université de Rouen, Rouen, 2004.
- [11] F. Pischinger, E. Scheid and U. Reuter, "Influences of Fuel Quality and Injection Parameters on Self Ignition of Sprays," Warsaw, 1987.
- [12] N. F. Razleytsev, "Combustion Simulation and Optimization in Diesels (In Russian)," Vischa Shkola, Kharkov, 1980, p. 169.
- [13] A. S. Lyshevsky, "Fuel Atomization in Marine Diesels (In Russian)," Leningrad, 1971.
- [14] X. Wang, K. Li and W. H. Su, "Experimental and Numerical Investigations on Internal Flow Characteristics of Diesel Nozzle under Real Fuel Injection Conditions," *Experimental Thermal and Fluid Science*, Elsevier, 2012, pp. 204-211.
- [15] X. G. Wang, Z. H. Huang, O. A. Kutu, W. Zhang and K. Nishida, "An Experimental Investigation on Spray, Ignition and Combustion Characteristics of Biodiesels," *Proceedings of the Combustion Institute*, Elsevier, 2011, pp. 2071-2077.
- [16] J. Heywood, "Internal Combustion Engine Fundamentals," McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering, 1988, pp. 560-561.
- [17] P. K. Sahoo and L. M. Das, "Combustion Analysis of Jatropa, Karanja and Polanga Based Biodiesel as Fuel in a Diesel Engine," *Fuel*, Elsevier, 2009, pp. 994-999.
- [18] A. N. Ozsensen and M. Canakci, "Determination of Per-

formance and Combustion Characteristics of a Diesellengine Fueled with Canola and Waste Palm Oil Methyl Esters,” *Energy Conversion and Management*, Elsevier, 2011, pp. 108-116.

- [19] N. Watson, D. A. Pilley and M. Marzouk, “A Combustion Correlation for Diesel Engine Simulation,” Society of American Engineers, 1980.
<http://dx.doi.org/10.4271/800029>
- [20] F. W. Hardenberg and H. O. 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,” Society of Automotive Engineers, Warrendale, 1979.
- [21] B. Tesfa, R. Mishra, F. Gu and A. D. Ball, “Combustion Characteristics of CI Engine Running with Biodiesel Blends,” *Environment and Power Quality European Association for the Development of Renewable Energies, International Conference on Renewable Energies and Power Quality*, Las Palmas de Gran Canaria, 2011.

ANNEXE B

CORRELATION DE WOSCHNI

Ce modèle suppose un transfert de chaleur simple à partir d'un volume confiné entouré de tous côtés par des parois qui représentent la tête de cylindre, la chemise de cylindre, et les zones de face de piston exposée à la chambre de combustion. La superficie de chaque est simplement calculée à partir de la géométrie de l'alésage, de la course, de la longueur de la bielle, et la hauteur de la chambre de combustion. Le coefficient de Woschni se calcule comme

$$h = 3,26 \cdot D^{-0,2} P_{cyl}^{0,8} T^{-0,55} w^{0,8} \quad (1.14)$$

pour laquelle w est la vitesse des gaz dans le cylindre. Elle fonction des différents temps du cycle et s'exprime par :

$$w = \left[C_1 U_p + C_2 \frac{V_d T_r}{P_r V_r} (P_{cyl} - P_{ent}) \right] \quad (1.15)$$

avec P_r , T_r et V_r étant respectivement la pression, la température et le volume dans le cylindre au début de la combustion (PMH), V_d étant le volume déplacé, C_1 et C_2 étant des coefficients pris dépendamment du temps du cycle qui se calculent de la manière suivante

- Pour le temps d'admission

$$C_1 = 6,18 \quad C_2 = 0$$

- Pour le temps de compression

$$C_1 = 2,28 \quad C_2 = 0$$

- Pour le temps de combustion et détente

$$C_1 = 2,28 \quad C_2 = 3,24 \cdot 10^{-3}$$

La prise en compte du swirl modifie ces coefficients dépendamment de la vitesse instantanée du piston, dans ce cas ils sont égaux à

$$C_1 = 6,18 + 0,417 \frac{v_s}{U_p} \quad \text{pour le temps d'admission}$$

$$C_1 = 2,28 + 0,308 \frac{v_s}{U_p} \quad \text{pour les autres temps}$$

où v_s est le coefficient de swirl.

ANNEXE C
ELEMENTS DE LA MATRICE
JACOBIENNE [D]

Première colonne

$$D_{11} = 1 + \frac{1}{2} \frac{c_4 y_4^{1/2}}{y_3^{1/2}}; D_{12} = \frac{c_6 y_5 + c_5 y_6 + c_2 + c_4 y_3^{1/2} + c_3 y_6^{1/2}}{2 y_4^{1/2}} + 1;$$

$$D_{13} = 1 + c_6 y_4^{1/2}; D_{14} = c_5 y_4^{1/2} + \frac{c_1 + c_3 y_4^{1/2}}{2 y_6^{1/2}} + 1$$

Deuxième colonne

$$D_{21} = 0; D_{22} = \frac{2c_5 y_6 + c_3 y_6^{1/2} - d_1 c_6 y_5}{2 y_4^{1/2}};$$

$$D_{23} = -d_1 (1 + c_6 y_4^{1/2}); D_{24} = 2c_5 y_4^{1/4} + \frac{c_1 + c_3 y_4^{1/2}}{2 y_6^{1/2}} + 2$$

Troisième colonne

$$D_{31} = \frac{1}{2} \frac{c_4 y_4^{1/2}}{y_3^{1/2}}; D_{32} = \frac{(2 - d_2) c_6 y_5 + c_5 y_6 + c_2 + c_4 y_3^{1/2} + c_3 y_6^{1/2}}{2 y_4^{1/2}} + 2;$$

$$D_{33} = (2 - d_2) c_6 y_4^{1/2} + 1 - d_2; D_{34} = c_5 y_4^{1/2} + \frac{1}{2} \frac{c_3 y_4^{1/2}}{y_6^{1/2}};$$

Quatrième colonne

$$D_{41} = 2 + \frac{1}{2} \frac{c_4 y_4^{1/2}}{y_4^{1/2}}; D_{42} = \frac{c_4 y_3^{1/2} - d_3 c_6 y_5}{2 y_4^{1/2}};$$

$$D_{43} = d_3 (c_6 y_4^{1/2} - 1); D_{44} = 0;$$

$$\begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{2} \frac{c_4 y_4^{1/2}}{y_3^{1/2}} & \frac{c_6 y_5 + c_5 y_6 + c_2 + c_4 y_3^{1/2} + c_3 y_6^{1/2}}{2 y_4^{1/2}} + 1 & 1 + c_6 y_4^{1/2} & c_5 y_4^{1/2} + \frac{c_1 + c_3 y_4^{1/2}}{2 y_6^{1/2}} + 1 \\ 0 & \frac{2c_5 y_6 + c_3 y_6^{1/2} - d_1 c_6 y_5}{2 y_4^{1/2}} & -d_1 (1 + c_6 y_4^{1/2}) & 2c_5 y_4^{1/4} + \frac{c_1 + c_3 y_4^{1/2}}{2 y_6^{1/2}} + 2 \\ \frac{1}{2} \frac{c_4 y_4^{1/2}}{y_3^{1/2}} & \frac{(2 - d_2) c_6 y_5 + c_5 y_6 + c_2 + c_4 y_3^{1/2} + c_3 y_6^{1/2}}{2 y_4^{1/2}} + 2 & (2 - d_2) c_6 y_4^{1/2} + 1 - d_2 & c_5 y_4^{1/2} + \frac{1}{2} \frac{c_3 y_4^{1/2}}{y_6^{1/2}} \\ 2 + \frac{1}{2} \frac{c_4 y_4^{1/2}}{y_4^{1/2}} & \frac{c_4 y_3^{1/2} - d_3 c_6 y_5}{2 y_4^{1/2}} & d_3 (c_6 y_4^{1/2} - 1) & 0 \end{bmatrix}$$

ANNEXE D
DONNEES CALIBREES DE DIESEL RK

TABLEAUX DE RESULTATS DES ESSAIS MOETURS

1 - CARBURANT DIESEL

RPM 2800

2014-06-19 12-44-24 "Mercedes Om352"

Mode: #1 :: RPM=2800, PR=1.35;

Title: om 352 2800

www.Diesel-trk.bmstu.ru

Fuel: Diesel No. 2

```

----- PARAMETERS OF EFFICIENCY AND POWER -----
- RPM
- Engine Speed, rev/min
- Piston Engine Power, kW
- BMEP
- Brake Mean Effective Pressure, bar
- Brake Torque, N m
- m_f
- Mass of Fuel Supplied per cycle, g
- SFC
- Specific Fuel Consumption, kg/kWh
- Eta_f
- Efficiency of piston engine
- IMEP
- Indicated Mean Effective Pressure, bar
- Eta_i
- Indicated Efficiency
- FMEP
- Friction Mean Effective Pressure, bar
- Eta_m
- Mechanical Efficiency of Piston Engine

----- ENVIRONMENTAL PARAMETERS -----
- po_amb
- Total Ambient Pressure, bar
- To_amb
- Total Ambient Temperature, K
- p_Te
- Exhaust Back Pressure, bar (after turbine)
- po_afiltr
- Total Pressure after Induction Air Filter, bar

----- TURBOCHARGING AND GAS EXCHANGE -----
- p_C
- Pressure before Inlet Manifold, bar
- T_C
- Temperature before Inlet Manifold, K
- m_air
- Total Mass Airflow (+EGR) of Piston Engine, kg/s
- po_T
- Turbocharger Efficiency
- To_T
- Average Total Turbine Inlet Pressure, bar
- To_T
- Average Total Turbine Inlet Temperature, K
- m_gas
- Mass Exhaust Gasflow of Piston Engine, [g/s]
- A/F_eq.t
- Total Fuel Air Equivalence Ratio
- F/A_eq.t
- Total Fuel Air Equivalence Ratio
- PMEP
- Pumping Mean Effective Pressure, bar
- Eta_v
- Volumetric Efficiency
- x_r
- Residual Gas Mass Fraction
- Phi
- Coeff. of Scavenging (Delivery Ratio / Eta_v)
- BF_int
- Burnt Gas Fraction Backflowed into the Intake, %
- %Blow-by
- % of Blow-by through piston rings

----- INTAKE SYSTEM -----
- p_int
- Average Intake Manifold Pressure, bar
- T_int
- Average Intake Manifold Temperature, K
- Tw_int
- Average Intake Manifold Wall Temperature, K
- hc_int
- Heat Transfer Coeff. in Intake Manifold,
W/(m2*K)
- hc_int.p
- Heat Transfer Coeff. in Intake Port, W/(m2*K)

----- EXHAUST SYSTEM -----
- p_exh
- Average Exhaust Manifold Gas Pressure, bar
- T_exh
- Average Exhaust Manifold Gas Temperature, K
- v_exh
- Average Gas Velocity in exhaust manifold, m/s

```

```

8.1075 - Sh - Strouhal number: Sh=a*Tau/L (has to be: Sh > 8)
713.17 - Tw_exh - Average Exhaust Manifold Wall Temperature, K
185.88 - hc_exh - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Manifold,
W/(m2*K)
1200.2 - hc_exh.p - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Port, W/(m2*K)

```

```

----- COMBUSTION -----
- F/A_eq
- Air Fuel Equivalence Ratio in the Cylinder
- F/A_eq
- Fuel Air Equivalence Ratio in the Cylinder
- P_max
- Maximum Cylinder Pressure, bar
- T_max
- Maximum Cylinder Temperature, K
- CA_p.max
- Angle of Max. Cylinder Pressure, deg. A.TDC
- CA_t.max
- Angle of Max. Cylinder Temperature, deg. A.TDC
- dp/dtheta_max
- Max. Rate of Pressure Rise, bar/deg.
Injection: Custom Fuel Injection System
- p_inj.max
- Max. Injection Pres. (before nozzles), bar
- d_32
- Sauter Mean Diameter of Drops, microns
- Theta_i
- Injection / Ignition Timing, deg. B.TDC
- Phi_inj
- Duration of Injection, deg.
- Phi_id
- Ignition Delay Period, deg.
- X_e.id
- Fuel Mass Fraction Evaporated during Ignit.
Delay
- Phi_z
- Combustion duration, deg.
- Rs_tdc
- Swirl Ratio in the Combustion Chamber at TDC
- Rs_ivc
- Swirl Ratio in the Cylinder at IVC
- W_swirl
- Max. Air Swirl Velocity, m/s at cylinder R=

```

31

```

----- ECOLOGICAL PARAMETERS -----
- Hartridge
- Hartridge Smoke Level
- Bosh
- Bosch Smoke Number
- K,m-1
- Factor of Absolute Light Absorption, 1/m
- PM
- Specific Particulate Matter, g/kWh
- CO2
- Specific Carbon dioxide emission, g/kWh
- NOx.ppm
- Fraction of wet NOx in exh. gas, ppm
- NO, g/kWh
- Specif. NOx emiss. reduc. to NO, g/kWh
(zeldovich)
- SE
- Summary emission of PM and NOx
- SO2
- Specific SO2 emission, g/kWh

----- CYLINDER PARAMETERS -----
- p_ivc
- Pressure at IVC, bar
- T_ivc
- Temperature at IVC, K
- p_tdc
- Compression Pressure (at TDC), bar
- T_tdc
- Compression Temperature (at TDC), K
- p_evo
- Pressure at EVO, bar
- T_evo
- Temperature at EVO, K

----- HEAT EXCHANGE IN THE CYLINDER -----
- T_eq
- Average Equivalent Temperature of Cycle, K
- hc_c
- Aver. Factor of Heat Transfer in Cyl., Wt/m2/K
- Tw_pist
- Average Piston Crown Temperature, K
- Tw_liner
- Average Cylinder Liner Temperature, K
- Tw_head
- Average Head Wall Temperature, K
- Tw_cool
- Average Temperature of Cooled Surface
of Cylinder Head, K
- Tboil
- Boiling Temp. in Liquid Cooling System, K
- hc_cool
- Average Factor of Heat Transfer, W/(m2*K)
from head cooled surface to coolant
- q_head
- Heat Flow in a Cylinder Head, J/s
- q_pist
- Heat Flow in a Piston Crown, J/s

```

2106.6 - q_liner - Heat Flow in a Cylinder Liner, J/s

----- MAIN ENGINE CONSTRUCTION PARAMETERS -----

17.000 - CR - Compression Ratio
6.0000 - n_inj - Number of Injector Nozzles
0.19000 - d_inj - Injector Nozzles Bore, mm
26.000 - Fh_inj - Injection Duration for spec. Injection Profile, deg.

m_f_ip - Fuel Mass for specified Injection Profile, g
64.000 - EVO - Exhaust Valve Opening, deg. before BDC
15.000 - EVC - Exhaust Valve Closing, deg. after DC
10.000 - IVO - Intake Valve Opening, deg. before DC
42.000 - IVC - Intake Valve Closing, deg. after BDC

----- COMPRESSOR PARAMETERS HP stage -----

6.1135 - P_C.hp - Power of HPC, kW
0.72100 - Eta_C.hp - Adiabatic Efficiency of HPC
0.16440 - m_C.hp - Mass Airflow of HP Compressor, kg/s
2.8958 - m*_C.hp - Mass Airflow Parameter, kg SQRT(K)/(s bar)
0.16775 - m_cor Chp - Corrected Mass Airflow of HPC, kg/s
1.3500 - PR_C.hp - Pressure Ratio of HP Compressor
0.98000 - po_IC.hp - Inlet Total Pressure of HPC, bar
298.00 - To_IC.hp - Inlet Total Temperature of HPC, K
1.3230 - po_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, bar
335.00 - To_C.hp - Total Temperature after Inter-cooler,]

----- TURBINE PARAMETERS HP stage -----

6.1106 - P_T.hp - Effective Power of HPT, kW
0.70374 - Eta_T.hp - Internal turbine Efficiency of HPT
0.94600 - Eta_mT.hp - Mechanical Efficiency of HPT
0.16733 - m_T.hp - Mass Gasflow of HPT, kg/s
3.4890 - m*_T.hp - Mass Gasflow Parameter, kg SQRT(K)/s kPa
1.2934 - PR_T.hp - Expansion Pressure Ratio of HPT
5.1502 - B_T.hp - Relative Work: B=118.34 (1-PR**(1-k)/k) Eta_T)
1.3445 - po_T.hp - Inlet Total Pressure of HPT, bar
785.89 - To_T.hp - Inlet Total Temperature of HPT, K
1.0395 - po_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Pressure, bar
751.37 - To_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Temperature, K

THE ALLOCATION OF FUEL IN THE ZONES AT THE END OF INJECTION

=====
N! In plan! Spray! Impingment! Fractions of fuel in the zones %
s! Angle! Angle! Surface! Dilut. S.Core Piston Inters. Head Liner
1! 0.0 | 70.0 | pist. bowl | 68.98 0.00 31.02 7.71 0.00 0.00
Sum of all sprays % 100. | 53.81 13.88 21.63 10.45 0.20 0.00
=====
Evaporation constants bi | 5580 2130 540 456 397 11
=====
The note: "Inters." is column with fraction of fuel in a zone of
intersection of Near-Wall Flows formed by adjacents sprays.
Rs:Swirl! (Piston clearance,mm 1.00) !Optimal!-Geometric formula: 2.35
Ratio! Rs of piston bowl 1.73 | Rs | -by Razleytsev : 2.35

Versions: Kernel 24.09.08; RK-model 25.09.08; NOx-model 5.06.08

2014-06-19 12-46-23 "Mercedes Om352"

Mode: #2 :: RPM=2000, PR=1.35;

Title: om 352 2000

www.Diesel-rk.bmstu.ru

Fuel: Diesel No. 2

----- PARAMETERS OF EFFICIENCY AND POWER -----

2000.0 - RPM - Engine Speed, rev/min
150.56 - P_eng - Piston Engine Power, kW
15.917 - BMEP - Brake Mean Effective Pressure, bar
718.193 - Torque - Brake Torque, N m
0.09310 - m_f - Mass of Fuel Supplied per cycle, g
0.22261 - SFC - Specific Fuel Consumption, kg/kWh
0.38052 - Eta_f - Efficiency of piston engine
17.886 - IMEP - Indicated Mean Effective Pressure, bar
0.42757 - Eta_i - Indicated Efficiency
1.9455 - FMEP - Friction Mean Effective Pressure, bar
0.88995 - Eta_m - Mechanical Efficiency of Piston Engine

----- ENVIRONMENTAL PARAMETERS -----

1.0000 - po_amb - Total Ambient Pressure, bar
298.00 - To_amb - Total Ambient Temperature, K
1.0400 - p_Te - Exhaust Back Pressure, bar (after turbine)
0.98000 - po_afltr - Total Pressure after Induction Air Filter, bar

----- TURBOCHARGING AND GAS EXCHANGE -----

2.9400 - p_C - Pressure before Inlet Manifold, bar
450.40 - T_C - Temperature before Inlet Manifold, K
0.20686 - m_air - Total Mass Airflow (+EGR) of Piston Engine, kg/s
0.51392 - Eta_TC - Turbocharger Efficiency
2.6118 - po_T - Average Total Turbine Inlet Pressure, bar
915.38 - To_T - Average Total Turbine Inlet Temperature, K
0.21063 - m_gas - Mass Exhaust Gasflow of Piston Engine, [g/s
1.5331 - A/F_eq.t - Total Air Fuel Equivalence Ratio
0.65229 - F/A_eq.t - Total Fuel Air Equivalence Ratio
-0.02289 - FMEP - Pumping Mean Effective Pressure, bar
0.97089 - Eta_v - Volumetric Efficiency
0.02950 - x_r - Residual Gas Mass Fraction
0.99069 - Phi - Coeff. of Scavenging (Delivery Ratio / Eta_v)
0.0000 - BF_int - Burnt Gas Fraction Backflowed into the Intake, %
2.6306 - %Blow-by - % of Blow-by through piston rings

----- INTAKE SYSTEM -----

2.9327 - p_int - Average Intake Manifold Pressure, bar
452.15 - T_int - Average Intake Manifold Temperature, K
455.15 - Tw_int - Average Intake Manifold Wall Temperature, K
95.391 - hc_int - Heat Transfer Coeff. in Intake Manifold, W/(m2*K)
223.69 - hc_int,p - Heat Transfer Coeff. in Intake Port, W/(m2*K)

----- EXHAUST SYSTEM -----

2.5968 - p_exh - Average Exhaust Manifold Gas Pressure, bar
914.09 - T_exh - Average Exhaust Manifold Gas Temperature, K
59.538 - v_exh - Average Gas Velocity in exhaust manifold, m/s
12.259 - Sh - Strouhal number: Sh=a*Tau/L (has to be: Sh > 8)
814.20 - Tw_exh - Average Exhaust Manifold Wall Temperature, K
145.94 - hc_exh - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Manifold, W/(m2*K)
942.38 - hc_exh,p - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Port, W/(m2*K)

----- COMBUSTION -----

1.5474 - A/F_eq - Air Fuel Equivalence Ratio in the Cylinder
0.64623 - F/A_eq - Fuel Air Equivalence Ratio in the Cylinder
222.37 - P_max - Maximum Cylinder Pressure, bar
2295.4 - T_max - Maximum Cylinder Temperature, K
6.0000 - CA_P_max - Angle of Max. Cylinder Pressure, deg. A.TDC
13.0000 - CA_T_max - Angle of Max. Cylinder Temperature, deg. A.TDC
10.736 - dp/dtheta - Max. Rate of Pressure Rise, bar/Deg.
Injection: Custom Fuel Injection System
2113.3 - P_inj_max - Max. Injection Pres. (before nozzles), bar
10.544 - d_32 - Sauter Mean Diameter of Drops, microns
18.0000 - Theta_i - Injection / Ignition Timing, deg. B.TDC
20.909 - Phi_inj - Duration of Injection, deg.
3.2473 - Phi_ld - Ignition Delay Period, deg.
0.04984 - x_e.id - Fuel Mass Fraction Evaporated during Ignit.
Delay
77.600 - Phi_z - Combustion duration, deg.
1.7330 - Rs_tdc - Swirl Ratio in the Combustion Chamber at TDC
0.82972 - Rs_ivc - Swirl Ratio in the Cylinder at IVC
10.247 - W_swirl - Max. Air Swirl Velocity, m/s at cylinder R=

ECOLOGICAL PARAMETERS
0.40424 - Hartridge - Hartridge Smoke Level
0.04427 - Bosch - Bosch Smoke Number
0.00962 - K_m=1 - Factor of Absolute Light Absorption, 1/m
0.00381 - PM - Specific Particulate Matter, g/kWh
717.29 - CO2 - Specific Carbon dioxide emission, g/kWh
777.22 - NOx_ppm - Fraction of wet NOx in exh. gas, ppm
4.2414 - NO, g/kWh - Specif. NOx emiss. reduc. to NO, g/kWh
(zeldovich)
0.61861 - SE - Summary emission of PM and NOx
0.0000 - SO2 - Specific SO2 emission, g/kWh

CYLINDER PARAMETERS
3.3272 - P_ivc - Pressure at IVC, bar
496.38 - T_ivc - Temperature at IVC, K
129.64 - P_tdc - Compression Pressure (at TDC), bar
1265.3 - T_tdc - Compression Temperature (at TDC), K
9.9471 - P_evo - Pressure at EVO, bar
1246.7 - T_evo - Temperature at EVO, K

HEAT EXCHANGE IN THE CYLINDER
1442.1 - T_eq - Average Equivalent Temperature of Cycle, K
683.63 - hc_c - Aver. Factor of Heat Transfer in Cyl., Wt/m2/K
670.31 - Tw_pist - Average Piston Crown Temperature, K
420.00 - Tw_liner - Average Cylinder Liner Temperature, K
609.36 - Tw_head - Average Head Wall Temperature, K
407.86 - Tw_cool - Average Temperature of Cooled Surface of Cylinder Head, K
398.16 - Tboil - Boiling Temp. in Liquid Cooling System, K
11951. - hc_cool - Average Factor of Heat Transfer, W/(m2*K) from head cooled surface to coolant
4207.0 - q_head - Heat Flow in a Cylinder Head, J/s
3899.1 - q_pist - Heat Flow in a Piston Crown, J/s
3635.8 - q_liner - Heat Flow in a Cylinder Liner, J/s

MAIN ENGINE CONSTRUCTION PARAMETERS
17.000 - CR - Compression Ratio
6.0000 - r_inj - Number of Injector Nozzles
0.19000 - d_inj - Injector Nozzles Bore, mm

21.000 - Phi_inj - Injection Duration for spec. Injection Profile, deg.
0.0000 - m_f_ip - Fuel Mass for specified Injection Profile, g
64.000 - EVO - Exhaust Valve Opening, deg. before BDC
15.000 - EVC - Exhaust Valve Closing, deg. after DC
10.000 - IVO - Intake Valve Opening, deg. before DC
42.000 - IVC - Intake Valve Closing, deg. after BDC

COMPRESSOR PARAMETERS HP stage
31.683 - P_C.hp - Power of HPC, kW
0.72100 - Eta_C.hp - Adiabatic Efficiency of HPC
0.20686 - m_C.hp - Mass Airflow of HP Compressor, kg/s
3.6438 - m*_C.hp - Mass Airflow Parameter, kg SQRT(K)/(s bar)
0.21108 - m_cor C.hp - Corrected Mass Airflow of HPC, kg/s
3.0000 - PR_C.hp - Pressure Ratio of HP Compressor
0.98000 - po_ic.hp - Inlet Total Pressure of HPC, bar
298.00 - To_ic.hp - Inlet Total Temperature of HPC, K
2.9400 - po_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, bar
450.40 - To_C.hp - Total Temperature after Inter-cooler,]

TURBINE PARAMETERS HP stage
31.681 - P_T.hp - Effective Power of HPT, kW
0.75359 - Eta_T.hp - Internal turbine Efficiency of HPT
0.94600 - Eta_mT.hp - Mechanical Efficiency of HPT
0.21063 - m_T.hp - Mass Gasflow of HPT, kg/s
2.4400 - m*_T.hp - Mass Gasflow Parameter, kg SQRT(K)/s kPa
2.5107 - PR_T.hp - Expansion Pressure Ratio of HPT
18.211 - B_T.hp - Relative Work: B=118.34 {1-PR** (1-k)/k} Eta_T
2.6118 - po_T.hp - Inlet Total Pressure of HPT, bar
915.38 - To_T.hp - Inlet Total Temperature of HPT, K
1.0403 - po_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Pressure, bar
770.63 - To_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Temperature, K

THE ALLOCATION OF FUEL IN THE ZONES AT THE END OF INJECTION
=====

N!	In plan!	Spray/Impingment!	Angle!	Surface!	Dilut.	S.Core	Piston	Inters.	Head	Liner
1!	0.0	70.0	!pist.	!pist.	!pist.	!pist.	!pist.	!pist.	!pist.	!pist.
	Sum of all sprays	%	100.!	60.61	3.69	3.88	28.06	3.76	0.01	
	Evaporation constants	bi	!	18125	14869	5383	4548	2486	31	

The note: "Inters." is column with fraction of fuel in a zone of intersection of Near-Wall Flows formed by adjacents sprays.
Rs:Swirl! (Piston clearance,mm 1.00) !Optimal!-Geometric formula: 2.87
Ratio! Rs of piston bowl 1.73 ! Rs !-by Razleytsev : 2.14

Versions: Kernel 24.09.08; RK-model 25.09.08; NOx-model 5.06.08

2014-06-19 12:47-16 "Mercedes Om352"
 Mode: #3 : RPM=1600, PR=1.35;
 Title: om 352 1600
 www.Diesel-rk.bmstu.ru
 Fuel: Diesel No. 2

```

----- PARAMETERS OF EFFICIENCY AND POWER -----
1600.0 - RPM
117.59 - Engine Speed, rev/min
15.540 - P_eng - Piston Engine Power, kW
701.89 - BMEP - Brake Mean Effective Pressure, bar
0.09310 - Torque
0.22801 - m_f - Mass of Fuel Supplied per cycle, g
0.37150 - SFC - Specific Fuel Consumption, kg/kWh
17.375 - Eta_f - Efficiency of piston engine
0.41536 - IMEP - Indicated Mean Effective Pressure, bar
1.8273 - Eta_i - Indicated Efficiency
0.89440 - FMEP - Friction Mean Effective Pressure, bar
----- ENVIRONMENTAL PARAMETERS -----
1.0000 - po_amb - Total Ambient Pressure, bar
298.00 - To_amb - Total Ambient Temperature, K
1.0400 - p_te - Exhaust Back Pressure, bar (after turbine)
0.98000 - po_afltr - Total Pressure after Induction Air Filter, bar
----- TURBOCHARGING AND GAS EXCHANGE -----
2.9400 - p_c - Pressure before Inlet Manifold, bar
450.40 - T_c - Temperature before Inlet Manifold, K
0.16673 - m_air - Total Mass Airflow (+EGR) of Piston Engine, kg/s
0.51359 - Eta_TC - Turbocharger Efficiency
2.7247 - po_T - Average Total Turbine Inlet Pressure, bar
886.10 - To_T - Average Total Turbine Inlet Temperature, K
0.16863 - m_gas - Mass Exhaust Gasflow of Piston Engine, [g/s]
1.5446 - A/F_eq.t - Total Air Fuel Equivalence Ratio
0.64743 - F/A_eq.t - Total Fuel Air Equivalence Ratio
-0.00760 - FMEP - Pumping Mean Effective Pressure, bar
0.97804 - Eta_v - Volumetric Efficiency
0.03018 - x_r - Residual Gas Mass Fraction
0.99083 - Phi - Coeff. of Scavenging (Delivery Ratio / Eta_v)
0.0000 - BF_int - Burnt Gas Fraction Backflowed into the Intake, %
3.2790 - %Blow-by - % of Blow-by through piston rings
----- INTAKE SYSTEM -----
2.9369 - p_int - Average Intake Manifold Pressure, bar
451.87 - T_int - Average Intake Manifold Temperature, K
454.87 - Tw_int - Average Intake Manifold Wall Temperature, K
95.929 - hc_int - Heat Transfer Coeff. in Intake Manifold,
W/(m2*K)
184.62 - hc_int.p - Heat Transfer Coeff. in Intake Port, W/(m2*K)
----- EXHAUST SYSTEM -----
2.7158 - p_exh - Average Exhaust Manifold Gas Pressure, bar
885.40 - T_exh - Average Exhaust Manifold Gas Temperature, K
44.212 - v_exh - Average Gas Velocity in exhaust manifold, m/s
15.081 - Sh - Strouhal number: Sh=a*Tau/L (has to be: Sh > 8)
783.64 - Tw_exh - Average Exhaust Manifold Wall Temperature, K
121.25 - hc_exh - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Manifold,
W/(m2*K)
782.94 - hc_exh.p - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Port, W/(m2*K)
----- COMBUSTION -----

```

```

1.5589 - A/F_eq - Air Fiel Equivalence Ratio in the Cylinder
0.64149 - F/A_eq - Fuel Air Equivalence Ratio in the Cylinder
228.05 - P_max - Maximum Cylinder Pressure, bar
2312.7 - T_max - Maximum Cylinder Temperature, K
5.0000 - CA_P_max - Angle of Max. Cylinder Pressure, deg. A.TDC
12.000 - CA_T_max - Angle of Max. Cylinder Temperature, deg. A.TDC
10.300 - dp/dTheta - Max. Rate of Pressure Rise, bar/deg.
Injection: Custom Fuel Injection System
1330.0 - p_inj_max - Max. Injection Pres. (before nozzles), bar
11.853 - d_32 - Sauter Mean Diameter of Drops, microns
18.000 - Theta_i - Injection / Ignition Timing, deg. B.TDC
20.909 - Phi_inj - Duration of Injection, deg.
2.8759 - Phi_ld - Ignition Delay Period, deg.
0.04098 - x_e.id - Fuel Mass Fraction Evaporated during Ignit.
Delay
67.800 - Phi_z - Combustion duration, deg.
1.7330 - Rs_tdc - Swirl Ratio in the Combustion Chamber at TDC
0.81371 - Rs_ivc - Swirl Ratio in the Cylinder at IVC
8.1978 - W_swirl - Max. Air Swirl Velocity, m/s at cylinder R=
----- ECOLOGICAL PARAMETERS -----
0.22458 - Hartridge - Hartridge Smoke Level
0.02460 - Bosch - Bosch Smoke Number
0.00535 - K,m-1 - Factor of Absolute Light Absorption, 1/m
0.00192 - PM - Specific Particulate Matter, g/kWh
734.70 - CO2 - Specific Carbon dioxide emission, g/kWh
1040.3 - NOx,ppm - Fraction of wet NOx in exh. gas, ppm
5.8519 - NO - NO, g/kWh - Specif. NOx emiss. reduc. to NO, g/kWh
(Zeldovich)
0.84238 - SE - Summary emission of PM and NOx
0.0000 - SO2 - Specific SO2 emission, g/kWh
----- CYLINDER PARAMETERS -----
3.3183 - p_ivc - Pressure at IVC, bar
491.26 - T_ivc - Temperature at IVC, K
129.02 - p_tdc - Compression Pressure (at TDC), bar
1252.2 - T_tdc - Compression Temperature (at TDC), K
9.6238 - p_evo - Pressure at EVO, bar
1203.6 - T_evo - Temperature at EVO, K
----- HEAT EXCHANGE IN THE CYLINDER -----
1475.4 - T_eq - Average Equivalent Temperature of Cycle, K
616.61 - hc_c - Aver. Factor of Heat Transfer in Cyl., Wt/m2/K
657.44 - Tw_pist - Average Piston Crown Temperature, K
420.00 - Tw_liner - Average Cylinder Liner Temperature, K
597.67 - Tw_head - Average Head Wall Temperature, K
406.01 - Tw_cool - Average Temperature of Cooled Surface
of Cylinder Head, K
398.16 - Tboil - Boiling Temp. in Liquid Cooling System, K
11787. - hc_cool - Average Factor of Heat Transfer, W/(m2*K)
from head cooled surface to coolant
3999.2 - q_head - Heat Flow in a Cylinder Head, J/s
3726.9 - q_pist - Heat Flow in a Piston Crown, J/s
2958.7 - q_liner - Heat Flow in a Cylinder Liner, J/s
----- MAIN ENGINE CONSTRUCTION PARAMETERS -----
17.000 - CR - Compression Ratio
6.0000 - n_inj - Number of Injector Nozzles
0.19000 - d_inj - Injector Nozzles Bore, mm

```

21.000 - Phi_inj - Injection Duration for spec. Injection Profile, deg.

0.0000 - m_f_ip - Fuel Mass for specified Injection Profile, g
64.000 - EVO - Exhaust Valve Opening, deg. before BDC
15.000 - EVC - Exhaust Valve Closing, deg. after DC
10.000 - IVO - Intake Valve Opening, deg. before DC
42.000 - IVC - Intake Valve Closing, deg. after BDC

----- COMPRESSOR PARAMETERS HP stage -----
25.536 - P_C.hp - Power of HPC, kW
0.72100 - Eta_C.hp - Adiabatic Efficiency of HPC
0.16673 - m_C.hp - Mass Airflow of HP Compressor, kg/s
2.9369 - m*_C.hp - Mass Airflow Parameter, kg SQRT(K)/(s bar)
0.17013 - m_cor C.hp - Corrected Mass Airflow of HPC, kg/s
PR_C.hp - Pressure Ratio of HP Compressor
0.98000 - po_iC.hp - Inlet Total Pressure of HPC, bar
298.00 - To_iC.hp - Inlet Total Temperature of HPC, K
2.9400 - po_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, bar
450.40 - To_C.hp - Total Temperature after Inter-cooler,]

----- TURBINE PARAMETERS HP stage -----
25.537 - P_T.hp - Effective Power of HPT, kW
0.75359 - Eta_T.hp - Internal turbine Efficiency of HPT
0.94600 - Eta_mT.hp - Mechanical Efficiency of HPT
0.16863 - m_T.hp - Mass Gasflow of HPT, kg/s
1.8423 - m*_T.hp - Mass Gasflow Parameter, kg SQRT(K)/s kPa
2.6175 - PR_T.hp - Expansion Pressure Ratio of HPT
18.941 - B_T.hp - Relative Work: B=118.34 {1-PR** (1-k)/k} Eta_T}
2.7247 - po_T.hp - Inlet Total Pressure of HPT, bar
886.10 - To_T.hp - Inlet Total Temperature of HPT, K
1.0409 - po_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Pressure, bar
740.20 - To_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Temperature, K

THE ALLOCATION OF FUEL IN THE ZONES AT THE END OF INJECTION

=====
N! In plan! Spray! Impingment! Fractions of fuel in the zones %
s! Angle! Angle! Surface! Dilut. S.Core Piston Inters. Head Liner
1! 0.0! 70.0! pist. bowl! 76.83 2.29 17.29 11.96 3.58 0.01
Sum of all sprays % 100.0! 60.17 4.56 7.16 24.55 3.56 0.00
=====
Evaporation constants bi! 16822 14309 4248 3589 1974 28
The note: "Inters." is column with fraction of fuel in a zone of
intersection of Near-Wall Flows formed by adjacents sprays.
Rs:Swirl! (Piston clearance,mm 1.00)!Optimal!-Geometric formula: 2.87
Ratio! Rs of piston bowl 1.73! Rs -by Razlextsev : 2.14

Versions: Kernel 24.09.08; RK-model 25.09.08; NOx-model 5.06.08

2014-06-19 12:47:58 "Mercedes Om352"

Mode: #4 :: RPM=1400, PR=1.35;
Title: om 352 1400
www.Diesel-rk.bmstu.ru
Fuel: Diesel No. 2

----- PARAMETERS OF EFFICIENCY AND POWER -----
1400.0 - RPM
100.50 - Engine Speed, rev/min
15.179 - P_eng - Piston Engine Power, kW
685.159 - BMEP - Brake Mean Effective Pressure, bar
0.09310 - m_f - Brake Torque, N m
0.23343 - SFC - Mass of Fuel Supplied per cycle, g
0.36287 - Eta_f - Specific Fuel Consumption, kg/kWh
16.983 - IMEP - Efficiency of piston engine
0.40599 - Eta_i - Indicated Mean Effective Pressure, bar
1.7682 - FMEP - Indicated Efficiency
0.89380 - Eta_m - Friction Mean Effective Pressure, bar
Mechanical Efficiency of Piston Engine

----- ENVIRONMENTAL PARAMETERS -----
1.0000 - po_amb - Total Ambient Pressure, bar
298.00 - To_amb - Total Ambient Temperature, K
1.0400 - p_Te - Exhaust Back Pressure, bar (after turbine)
0.98000 - po_afiltr - Total Pressure after Induction Air Filter, bar

----- TURBOCHARGING AND GAS EXCHANGE -----
2.9400 - P_C - Pressure before Inlet Manifold, bar
450.40 - T_C - Temperature before Inlet Manifold, K
0.14649 - m_air - Total Mass Airflow (+EGR) of Piston Engine, kg/s
0.51435 - Eta_TC - Turbocharger Efficiency
2.7936 - po_T - Average Total Turbine Inlet Pressure, bar
869.11 - To_T - Average Total Turbine Inlet Temperature, K
0.14746 - m_gas - Mass Exhaust Gasflow of Piston Engine, [g/s
1.5509 - A/F_eq.t - Total Air Fuel Equivalence Ratio
0.64478 - F/A_eq.t - Total Fuel Air Equivalence Ratio
-0.03543 - PMEP - Pumping Mean Effective Pressure, bar
0.98218 - Eta_v - Volumetric Efficiency
0.03117 - x_r - Residual Gas Mass Fraction
0.99071 - Phi - Coeff. of Scavenging (Delivery Ratio / Eta_v)
0.0000 - BF_int - Burnt Gas Fraction Backflowed into the Intake, %
3.7425 - %Blow-by - % of Blow-by through piston rings

----- INTAKE SYSTEM -----
2.9374 - p_int - Average Intake Manifold Pressure, bar
451.74 - T_int - Average Intake Manifold Temperature, K
454.74 - Tw_int - Average Intake Manifold Wall Temperature, K
96.222 - hc_int - Heat Transfer Coeff. in Intake Manifold, W/(m2*K)
164.84 - hc_int.p - Heat Transfer Coeff. in Intake Port, W/(m2*K)

----- EXHAUST SYSTEM -----
2.7874 - p_exh - Average Exhaust Manifold Gas Pressure, bar
868.63 - T_exh - Average Exhaust Manifold Gas Temperature, K
36.665 - v_exh - Average Gas Velocity in exhaust manifold, m/s
17.071 - Sh - Strouhal number: Sh=a*Tau/L (has to be: Sh > 8)
766.17 - Tw_exh - Average Exhaust Manifold Wall Temperature, K
108.61 - hc_exh - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Manifold, W/(m2*K)
701.30 - hc_exh.p - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Port, W/(m2*K)

----- COMBUSTION -----

```

1.5655 - A/F_eq - Air Fuel Equivalence Ratio in the Cylinder
0.63878 - F/A_eq - Fuel Air Equivalence Ratio in the Cylinder
231.56 - P_max - Maximum Cylinder Pressure, bar
2321.9 - T_max - Maximum Cylinder Temperature, K
5.0000 - CA_P_max - Angle of Max. Cylinder Pressure, deg. A.TDC
11.000 - CA_T_max - Angle of Max. Cylinder Temperature, deg. A.TDC
10.190 - dp/dtheta - Max. Rate of Pressure Rise, bar/Deg.
Injection: Custom Fuel Injection System
1017.6 - P_inj_max - Max. Injection Pres. (before nozzles), bar
12.713 - d_32 - Sauter Mean Diameter of Drops, microns
18.000 - Theta_i - Injection / Ignition Timing, deg. B.TDC
20.909 - Phi_inj - Duration of Injection, deg.
2.6276 - Phi_ld - Ignition Delay Period, deg.
0.03555 - x_e.id - Fuel Mass Fraction Evaporated during Ignit.
Delay
62.800 - Phi_z - Combustion duration, deg.
1.7330 - Rs_tdc - Swirl Ratio in the Combustion Chamber at TDC
0.80494 - Rs_ivc - Swirl Ratio in the Cylinder at IVC
7.1731 - W_swirl - Max. Air Swirl Velocity, m/s at cylinder R=
----- ECOLOGICAL PARAMETERS -----
0.16892 - Hartridge - Hartridge Smoke Level
0.01850 - Bosch - Bosch Smoke Number
0.00402 - K_m=1 - Factor of Absolute Light Absorption, 1/m
0.00139 - PM - Specific Particulate Matter, g/kWh
752.18 - CO2 - Specific Carbon dioxide emission, g/kWh
1192.8 - NOx_ppm - Fraction of wet NOx in exh. gas, ppm
6.8958 - NO - NO, g/kWh - Specif. NOx emiss. reduc. to NO, g/kWh
(zeldovich)
0.98975 - SE - Summary emission of PM and NOx
0.0000 - SO2 - Specific SO2 emission, g/kWh
----- CYLINDER PARAMETERS -----
3.3221 - P_ivc - Pressure at IVC, bar
489.46 - T_ivc - Temperature at IVC, K
128.86 - P_tdc - Compression Pressure (at TDC), bar
1246.5 - T_tdc - Compression Temperature (at TDC), K
9.4235 - P_evo - Pressure at EVO, bar
1177.5 - T_evo - Temperature at EVO, K
----- HEAT EXCHANGE IN THE CYLINDER -----
1496.4 - T_eq - Average Equivalent Temperature of Cycle, K
581.50 - hc_c - Aver. Factor of Heat Transfer in Cyl., Wt/m2/K
650.59 - Tw_pist - Average Piston Crown Temperature, K
420.00 - Tw_liner - Average Cylinder Liner Temperature, K
591.44 - Tw_head - Average Head Wall Temperature, K
405.13 - Tw_cool - Average Temperature of Cooled Surface
of Cylinder Head, K
398.16 - Tboil - Boiling Temp. in Liquid Cooling System, K
11697. - hc_cool - Average Factor of Heat Transfer, W/(m2*K)
from head cooled surface to coolant
3888.7 - q_head - Heat Flow in a Cylinder Head, J/s
3634.6 - q_pist - Heat Flow in a Piston Crown, J/s
2625.1 - q_liner - Heat Flow in a Cylinder Liner, J/s
----- MAIN ENGINE CONSTRUCTION PARAMETERS -----
17.000 - CR - Compression Ratio
6.0000 - r_inj - Number of Injector Nozzles
0.19000 - d_inj - Injector Nozzles Bore, mm
21.000 - Phi_inj - Injection Duration for spec. Injection Profile,
deg.
0.0000 - m_f_ip - Fuel Mass for specified Injection Profile, g
64.000 - EVO - Exhaust Valve Opening, deg. before BDC
15.000 - EVC - Exhaust Valve Closing, deg. after DC
10.000 - IVO - Intake Valve Opening, deg. before DC
42.000 - IVC - Intake Valve Closing, deg. after BDC
----- COMPRESSOR PARAMETERS HP stage -----
22.436 - P_C.hp - Power of HPC, kW
0.72100 - Eta_C.hp - Adiabatic Efficiency of HPC
0.14649 - m_C.hp - Mass Airflow of HP Compressor, kg/s
2.5803 - m*_C.hp - Mass Airflow Parameter, kg SQRT(K)/(s bar)
0.14948 - m_cor Chp - Corrected Mass Airflow of HPC, kg/s
3.0000 - PR_C.hp - Pressure Ratio of HP Compressor
0.98000 - po_ic.hp - Inlet Total Pressure of HPC, bar
298.00 - To_ic.hp - Inlet Total Temperature of HPC, K
2.9400 - po_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, bar
450.40 - To_C.hp - Total Temperature after Inter-cooler, ]
----- TURBINE PARAMETERS HP stage -----
22.438 - P_T.hp - Effective Power of HPT, kW
0.75359 - Eta_T.hp - Internal turbine Efficiency of HPT
0.94600 - Eta_mt.hp - Mechanical Efficiency of HPT
0.14746 - m_T.hp - Mass Gasflow of HPT, kg/s
1.5561 - m*_T.hp - Mass Gasflow Parameter, kg SQRT(K)/s kPa
2.6884 - PR_T.hp - Expansion Pressure Ratio of HPT
19.405 - B_T.hp - Relative Work: B=118.34 {1-PR** (1-k) /k} Eta_T]
2.7936 - po_T.hp - Inlet Total Pressure of HPT, bar
869.11 - To_T.hp - Inlet Total Temperature of HPT, K
1.0391 - po_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Pressure, bar
722.39 - To_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Temperature, K
===== THE ALLOCATION OF FUEL IN THE ZONES AT THE END OF INJECTION =====
N! In plan! Spray! Impingment! Fractions of fuel in the zones %
s! Angle! Angle! Surface! Dilut. S.Core Piston Inters. Head Liner
1! 0.0! 70.0! pist. bowl! 77.14! 0.00! 19.55! 11.83! 3.31! 0.00
Sum of all sprays % 100.1! 60.73! 4.94! 8.64! 22.71! 2.98! 0.00
Evaporation constants bi! 15453! 13338! 3575! 3021! 1729! 26
The note: "Inters." is column with fraction of fuel in a zone of
intersection of Near-Wall Flows formed by adjacents sprays.
Rs:Swirl! (Piston clearance,mm 1.00)! Optimal! -Geometric formula: 2.87
Ratio! Rs of piston bowl 1.73! Rs! -by Razleytsev : 2.14
Versions: Kernel 24.09.08; RK-model 25.09.08; NOx-model 5.06.08

```

2014-06-19 12-48-36 "Mercedes Om352"
 Mode: #5 : RPM=1000, PR=1.35;
 Title: om 352 1000
 www.Diesel-rk.bmstu.ru
 Fuel: Diesel No. 2

```

----- PARAMETERS OF EFFICIENCY AND POWER -----
1000.0 - RPM
65.665 - Engine Speed, rev/min
13.884 - P_eng - Piston Engine Power, kW
627.10 - BMEP - Brake Mean Effective Pressure, bar
0.09310 - Torque - Brake Torque, N m
0.25520 - m_f - Mass of Fuel Supplied per cycle, g
0.33191 - SFC - Specific Fuel Consumption, kg/kWh
15.679 - Eta_f - Efficiency of piston engine
0.37483 - IMEP - Indicated Mean Effective Pressure, bar
1.6345 - Eta_i - Indicated Efficiency
0.88550 - FMEP - Friction Mean Effective Pressure, bar
----- ENVIRONMENTAL PARAMETERS -----
1.0000 - po_amb - Total Ambient Pressure, bar
298.00 - To_amb - Total Ambient Temperature, K
1.0400 - p_te - Exhaust Back Pressure, bar (after turbine)
0.98000 - po_afltr - Total Pressure after Induction Air Filter, bar
----- TURBOCHARGING AND GAS EXCHANGE -----
2.9400 - p_c - Pressure before Inlet Manifold, bar
450.40 - T_c - Temperature before Inlet Manifold, K
0.10452 - m_air - Total Mass Airflow (+EGR) of Piston Engine, kg/s
0.51430 - Eta_TC - Turbocharger Efficiency
3.0047 - po_T - Average Total Turbine Inlet Pressure, bar
828.77 - To_T - Average Total Turbine Inlet Temperature, K
0.10367 - m_gas - Mass Exhaust Gasflow of Piston Engine, [g/s]
1.5493 - A/F_eq.t - Total Air Fuel Equivalence Ratio
0.64547 - F/A_eq.t - Total Fuel Air Equivalence Ratio
-0.16082 - FMEP - Pumping Mean Effective Pressure, bar
0.98155 - Eta_v - Volumetric Efficiency
0.03516 - x_r - Residual Gas Mass Fraction
0.99028 - Phi - Coeff. of Scavenging (Delivery Ratio / Eta_v)
0.40329P-03 - BF_int - Burnt Gas Fraction Backflowed into the Intake, %
5.2261 - $Blow-by - % of Blow-by through piston rings
----- INTAKE SYSTEM -----
2.9364 - p_int - Average Intake Manifold Pressure, bar
451.78 - T_int - Average Intake Manifold Temperature, K
454.78 - Tw_int - Average Intake Manifold Wall Temperature, K
96.141 - hc_int - Heat Transfer Coeff. in Intake Manifold,
W/(m2*K)
124.91 - hc_int.p - Heat Transfer Coeff. in Intake Port, W/(m2*K)
----- EXHAUST SYSTEM -----
3.0020 - p_exh - Average Exhaust Manifold Gas Pressure, bar
828.58 - T_exh - Average Exhaust Manifold Gas Temperature, K
23.008 - v_exh - Average Gas Velocity in exhaust manifold, m/s
23.343 - Sh - Strouhal number: Sh=a*Tau/L (has to be: Sh > 8)
728.23 - Tw_exh - Average Exhaust Manifold Wall Temperature, K
90.000 - hc_exh - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Manifold,
W/(m2*K)
525.36 - hc_exh.p - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Port, W/(m2*K)
----- COMBUSTION -----

```

```

1.5644 - A/F_eq - Air Fiel Equivalence Ratio in the Cylinder
0.63923 - F/A_eq - Fuel Air Equivalence Ratio in the Cylinder
236.21 - p_max - Maximum Cylinder Pressure, bar
2339.4 - T_max - Maximum Cylinder Temperature, K
5.0000 - CA_P.max - Angle of Max. Cylinder Pressure, deg. A.TDC
10.000 - CA_T.max - Angle of Max. Cylinder Temperature, deg. A.TDC
10.113 - dp/dTheta - Max. Rate of Pressure Rise, bar/deg.
Injection: Custom Fuel Injection System
560.45 - p_inj.max - Max. Injection Pres. (before nozzles), bar
15.211 - d_32 - Sauter Mean Diameter of Drops, microns
18.000 - Theta_i - Injection / Ignition Timing, deg. B.TDC
20.909 - Phi_inj - Duration of Injection, deg.
2.0569 - Phi_ld - Ignition Delay Period, deg.
0.02361 - x_e.id - Fuel Mass Fraction Evaporated during Ignit.
Delay
52.600 - Phi_z - Combustion duration, deg.
1.7330 - Rs_tdc - Swirl Ratio in the Combustion Chamber at TDC
0.79088 - Rs_ivc - Swirl Ratio in the Cylinder at IVC
5.1236 - W_swirl - Max. Air Swirl Velocity, m/s at cylinder R=

```

31

```

----- ECOLOGICAL PARAMETERS -----
0.12386 - Hartridge - Hartridge Smoke Level
0.01357 - Bosch - Bosch Smoke Number
0.00295 - K,m-1 - Factor of Absolute Light Absorption, 1/m
0.00103 - PM - Specific Particulate Matter, g/kWh
822.33 - CO2 - Specific Carbon dioxide emission, g/kWh
1472.3 - NOx,ppm - Fraction of wet NOx in exh. gas, ppm
9.3009 - NO - NO, g/kWh - Specif. NOx emiss. reduc. to NO, g/kWh
(Zel'dovich)
1.3321 - SE - Summary emission of PM and NOx
0.0000 - SO2 - Specific SO2 emission, g/kWh
----- CYLINDER PARAMETERS -----
3.3052 - p_ivc - Pressure at IVC, bar
485.96 - T_ivc - Temperature at IVC, K
127.23 - p_tdc - Compression Pressure (at TDC), bar
1234.1 - T_tdc - Compression Temperature (at TDC), K
8.8265 - p_evo - Pressure at EVO, bar
1113.6 - T_evo - Temperature at EVO, K
----- HEAT EXCHANGE IN THE CYLINDER -----
1548.1 - T_eq - Average Equivalent Temperature of Cycle, K
502.66 - hc_c - Aver. Factor of Heat Transfer in Cyl., Wt/m2/K
633.28 - Tw_pist - Average Piston Crown Temperature, K
420.00 - Tw_liner - Average Cylinder Liner Temperature, K
575.71 - Tw_head - Average Head Wall Temperature, K
402.47 - Tw_cool - Average Temperature of Cooled Surface
of Cylinder Head, K
398.16 - Tboil - Boiling Temp. in Liquid Cooling System, K
11496. - hc_cool - Average Factor of Heat Transfer, W/(m2*K)
from head cooled surface to coolant
3612.0 - q_head - Heat Flow in a Cylinder Head, J/s
3398.2 - q_pist - Heat Flow in a Piston Crown, J/s
1952.4 - q_liner - Heat Flow in a Cylinder Liner, J/s
----- MAIN ENGINE CONSTRUCTION PARAMETERS -----
17.000 - CR - Compression Ratio
6.0000 - r_inj - Number of Injector Nozzles
0.19000 - d_inj - Injector Nozzles Bore, mm

```


21.000 - Phi_inj - Injection Duration for spec. Injection Profile, deg.

0.0000 - m_f_ip - Fuel Mass for specified Injection Profile, g
64.000 - EVO - Exhaust Valve Opening, deg. before BDC
15.000 - EVC - Exhaust Valve Closing, deg. after DC
10.000 - IVO - Intake Valve Opening, deg. before DC
42.000 - IVC - Intake Valve Closing, deg. after BDC

----- COMPRESSOR PARAMETERS HP stage -----
16.009 - P_C.hp - Power of HPC, kW
0.72100 - Eta_C.hp - Adiabatic Efficiency of HPC
0.10452 - m_C.hp - Mass Airflow of HP Compressor, kg/s
1.8411 - m*_C.hp - Mass Airflow Parameter, kg SQRT(K)/(s bar)
0.10665 - m_cor C.hp - Corrected Mass Airflow of HPC, kg/s
3.0000 - PR_C.hp - Pressure Ratio of HP Compressor
0.98000 - po_iC.hp - Inlet Total Pressure of HPC, bar
298.00 - To_iC.hp - Inlet Total Temperature of HPC, K
2.9400 - po_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, bar
450.40 - To_C.hp - Total Temperature after Inter-cooler,]

----- TURBINE PARAMETERS HP stage -----
15.998 - P_T.hp - Effective Power of HPT, kW
0.75359 - Eta_T.hp - Internal turbine Efficiency of HPT
0.94600 - Eta_mT.hp - Mechanical Efficiency of HPT
0.10367 - m_T.hp - Mass Gasflow of HPT, kg/s
0.99323 - m*_T.hp - Mass Gasflow Parameter, kg SQRT(K)/s kPa
2.8886 - PR_T.hp - Expansion Pressure Ratio of HPT
20.637 - B_T.hp - Relative Work: B=118.34 {1-PR** (1-k)/k} Eta_T}
3.0047 - po_T.hp - Inlet Total Pressure of HPT, bar
828.77 - To_T.hp - Inlet Total Temperature of HPT, K
1.0402 - po_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Pressure, bar
679.66 - To_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Temperature, K

THE ALLOCATION OF FUEL IN THE ZONES AT THE END OF INJECTION

N! In plan! Spray! Impingment! Fractions of fuel in the zones %
s! Angle! Angle! Surface! Dilut. S.Core Piston Inters. Head Liner
1! 0.0! 70.0! pist. bowl! 76.41 3.65 18.15 6.80 1.80 0.00
Sum of all sprays % 100.0! 60.74 6.29 13.11 17.87 1.74 0.00
Evaporation constants bi! 9757 8670 1802 1522 969 16
The note: "Inters." is column with fraction of fuel in a zone of
intersection of Near-Wall Flows formed by adjacents sprays.
Rs:Swirl! (Piston clearance,mm 1.00)!Optimal!-Geometric formula: 2.87
Ratio! Rs of piston bowl 1.73! Rs -by Razlextsev : 2.14

Versions: Kernel 24.09.08; RK-model 25.09.08; NOx-model 5.06.08

2014-06-19 12-49-16 "Mercedes Om352"

Mode: #6 :: RPM=900, PR=1.35;
Title: om 352 900
www.Diesel-rk.bmstu.ru
Fuel: Diesel No. 2

----- PARAMETERS OF EFFICIENCY AND POWER -----
900.00 - RPM - Engine Speed, rev/min
57.027 - P_eng - Piston Engine Power, kW
13.398 - BMEP - Brake Mean Effective Pressure, bar
605.112 - Torque - Brake Torque, N m
0.09310 - m_f - Mass of Fuel Supplied per cycle, g
0.26447 - SFC - Specific Fuel Consumption, kg/kWh
0.32028 - Eta_f - Efficiency of piston engine
15.196 - IMEP - Indicated Mean Effective Pressure, bar
0.36328 - Eta_i - Indicated Efficiency
1.5920 - FMEP - Friction Mean Effective Pressure, bar
0.88164 - Eta_m - Mechanical Efficiency of Piston Engine

----- ENVIRONMENTAL PARAMETERS -----
1.0000 - po_amb - Total Ambient Pressure, bar
298.00 - To_amb - Total Ambient Temperature, K
1.0400 - p_Te - Exhaust Back Pressure, bar (after turbine)
0.98000 - po_afltr - Total Pressure after Induction Air Filter, bar

----- TURBOCHARGING AND GAS EXCHANGE -----
2.9400 - P_C - Pressure before Inlet Manifold, bar
450.40 - T_C - Temperature before Inlet Manifold, K
0.09355 - m_air - Total Mass Airflow (+EGR) of Piston Engine, kg/s
0.51533 - Eta_TC - Turbocharger Efficiency
3.0677 - po_T - Average Total Turbine Inlet Pressure, bar
817.82 - To_T - Average Total Turbine Inlet Temperature, K
0.09227 - m_gas - Mass Exhaust Gasflow of Piston Engine, [g/s
1.5408 - A/F_eq.t - Total Air Fuel Equivalence Ratio
0.64902 - F/A_eq.t - Total Fuel Air Equivalence Ratio
-0.20660 - PMEP - Pumping Mean Effective Pressure, bar
0.97631 - Eta_v - Volumetric Efficiency
0.03752 - x_r - Residual Gas Mass Fraction
0.99002 - Phi - Coeff. of Scavenging (Delivery Ratio / Eta_v)
0.01128 - BF_int - Burnt Gas Fraction Backflowed into the Intake, %
5.8036 - %Blow-by - % of Blow-by through piston rings

----- INTAKE SYSTEM -----
2.9372 - p_int - Average Intake Manifold Pressure, bar
451.98 - T_int - Average Intake Manifold Temperature, K
454.98 - Tw_int - Average Intake Manifold Wall Temperature, K
95.733 - hc_int - Heat Transfer Coeff. in Intake Manifold, W/(m2*K)
114.67 - hc_int.p - Heat Transfer Coeff. in Intake Port, W/(m2*K)

----- EXHAUST SYSTEM -----
3.0656 - p_exh - Average Exhaust Manifold Gas Pressure, bar
817.68 - T_exh - Average Exhaust Manifold Gas Temperature, K
19.799 - v_exh - Average Gas Velocity in exhaust manifold, m/s
25.765 - Sh - Strouhal number: Sh=a*Tau/L (has to be: Sh > 8)
719.62 - Tw_exh - Average Exhaust Manifold Wall Temperature, K
90.000 - hc_exh - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Manifold, W/(m2*K)
479.52 - hc_exh.p - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Port, W/(m2*K)

----- COMBUSTION -----

```

1.5559 - A/F_eq - Air Fuel Equivalence Ratio in the Cylinder
0.6472 - F/A_eq - Fuel Air Equivalence Ratio in the Cylinder
234.92 - P_max - Maximum Cylinder Pressure, bar
2327.9 - T_max - Maximum Cylinder Temperature, K
5.0000 - CA_P_max - Angle of Max. Cylinder Pressure, deg. A.TDC
9.0000 - CA_T_max - Angle of Max. Cylinder Temperature, deg. A.TDC
9.9750 - dp/dTheta - Max. Rate of Pressure Rise, bar/Deg.
Injection: Custom Fuel Injection System
479.03 - P_inj_max - Max. Injection Pres. (before nozzles), bar
16.113 - d_32 - Sauter Mean Diameter of Drops, microns
18.000 - Theta_i - Injection / Ignition Timing, deg. B.TDC
20.909 - Phi_inj - Duration of Injection, deg.
1.8877 - Phi_ld - Ignition Delay Period, deg.
0.02017 - x_e.id - Fuel Mass Fraction Evaporated during Ignit.
Delay
53.200 - Phi_z - Combustion duration, deg.
1.7330 - Rs_tdc - Swirl Ratio in the Combustion Chamber at TDC
0.79375 - Rs_ivc - Swirl Ratio in the Cylinder at IVC
4.6113 - W_swirl - Max. Air Swirl Velocity, m/s at cylinder R=
----- ECOLOGICAL PARAMETERS -----
0.17275 - Hartridge - Hartridge Smoke Level
0.01892 - Bosch - Bosch Smoke Number
0.00411 - K,m=1 - Factor of Absolute Light Absorption, 1/m
0.00158 - PM - Specific Particulate Matter, g/kWh
852.20 - CO2 - Specific Carbon dioxide emission, g/kWh
1373.7 - NOx,ppm - Fraction of wet NOx in exh. gas, ppm
8.9531 - NO - NO, g/kWh - Specif. NOx emiss. reduc. to NO, g/kWh
(Zeldovich)
1.2843 - SE - Summary emission of PM and NOx
0.0000 - SO2 - Specific SO2 emission, g/kWh
----- CYLINDER PARAMETERS -----
3.2847 - P_ivc - Pressure at IVC, bar
484.71 - T_ivc - Temperature at IVC, K
126.04 - P_tdc - Compression Pressure (at TDC), bar
1229.3 - T_tdc - Compression Temperature (at TDC), K
8.6272 - P_evo - Pressure at EVO, bar
1097.2 - T_evo - Temperature at EVO, K
----- HEAT EXCHANGE IN THE CYLINDER -----
1558.3 - T_eq - Average Equivalent Temperature of Cycle, K
478.83 - hc_c - Aver. Factor of Heat Transfer in Cyl., Wt/m2/K
626.09 - Tw_pist - Average Piston Crown Temperature, K
420.00 - Tw_liner - Average Cylinder Liner Temperature, K
569.20 - Tw_head - Average Head Wall Temperature, K
401.91 - Tw_cool - Average Temperature of Cooled Surface
of Cylinder Head, K
398.16 - Tboil - Boiling Temp. in Liquid Cooling System, K
11440. - hc_cool - Average Factor of Heat Transfer, W/(m2*K)
from head cooled surface to coolant
3499.6 - q_head - Heat Flow in a Cylinder Head, J/s
3298.3 - q_pist - Heat Flow in a Piston Crown, J/s
1784.5 - q_liner - Heat Flow in a Cylinder Liner, J/s
----- MAIN ENGINE CONSTRUCTION PARAMETERS -----
17.000 - CR - Compression Ratio
6.0000 - r_inj - Number of Injector Nozzles
0.19000 - d_inj - Injector Nozzles Bore, mm

```

```

21.000 - Phi_inj - Injection Duration for spec. Injection Profile,
deg.
0.0000 - m_f_ip - Fuel Mass for specified Injection Profile, g
64.000 - EVO - Exhaust Valve Opening, deg. before BDC
15.000 - EVC - Exhaust Valve Closing, deg. after DC
10.000 - IVO - Intake Valve Opening, deg. before DC
42.000 - IVC - Intake Valve Closing, deg. after BDC
----- COMPRESSOR PARAMETERS HP stage -----
14.329 - P_C.hp - Power of HPC, kW
0.72100 - Eta_C.hp - Adiabatic Efficiency of HPC
0.09355 - m_C.hp - Mass Airflow of HP Compressor, kg/s
1.6480 - m*_C.hp - Mass Airflow Parameter, kg SQRT(K)/(s bar)
0.09546 - m_cor C.hp - Corrected Mass Airflow of HPC, kg/s
3.0000 - PR_C.hp - Pressure Ratio of HP Compressor
0.98000 - po_ic.hp - Inlet Total Pressure of HPC, bar
298.00 - To_ic.hp - Inlet Total Temperature of HPC, K
2.9400 - po_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, bar
450.40 - To_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, ]
----- TURBINE PARAMETERS HP stage -----
14.294 - P_T.hp - Effective Power of HPT, kW
0.75359 - Eta_T.hp - Internal turbine Efficiency of HPT
0.94600 - Eta_mT.hp - Mechanical Efficiency of HPT
0.09227 - m_T.hp - Mass Gasflow of HPT, kg/s
0.86012 - m*_T.hp - Mass Gasflow Parameter, kg SQRT(K)/s kPa
2.9501 - PR_T.hp - Expansion Pressure Ratio of HPT
20.995 - B_T.hp - Relative Work: B=118.34 {1-PR** (1-k) /k} Eta_T]
3.0677 - po_T.hp - Inlet Total Pressure of HPT, bar
817.82 - To_T.hp - Inlet Total Temperature of HPT, K
1.0399 - po_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Pressure, bar
668.04 - To_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Temperature, K

```

THE ALLOCATION OF FUEL IN THE ZONES AT THE END OF INJECTION

```

N! In plan! Spray! Impingment! Fractions of fuel in the zones %
s! Angle! Angle! Surface! Dilut. S.Core Piston Inters. Head Liner
1! 0.0! 70.0! pist. bowl! 76.60! 3.78! 18.16! 5.98! 1.46! 0.00
Sum of all sprays % 100.1 61.51 6.43 14.03 16.27 1.40 0.00
----- Evaporation constants bi -----
Evaporation constants bi : 8151 7248 1371 1158 772 13
The note: "Inters." is column with fraction of fuel in a zone of
intersection of Near-Wall Flows formed by adjacents sprays.
Rs:Swirl! (Piston clearance,mm 1.00) !Optimal! -Geometric formula: 2.87
Ratio! Rs of piston bowl 1.73! Rs ! -by Razleytsev : 2.14

```

Versions: Kernel 24.09.08; RK-model 25.09.08; NOx-model 5.06.08

RPM 2800

2014-06-19 13:08-39 "Mercedes Om352"

Mode: #1 : RPM=2800, PR=1.35;

Title: om 352bio 2800

www.Diesel-rk.bmstu.ru

Fuel: Biofuel RME B100

----- PARAMETERS OF EFFICIENCY AND POWER -----
 2800.0 - RPM
 85.030 - Engine Speed, rev/min
 85.030 - P_eng - Piston Engine Power, kW
 6.4209 - BMEP - Brake Mean Effective Pressure, bar
 290.01 - Torque
 0.04500 - m_f - Mass of Fuel Supplied per cycle, g
 0.26673 - SFC - Specific Fuel Consumption, kg/kWh
 0.34212 - Eta_f - Efficiency of piston engine
 8.3090 - IMEP - Indicated Mean Effective Pressure, bar
 0.44272 - Eta_i - Indicated Efficiency
 1.4524 - FMEP - Friction Mean Effective Pressure, bar
 0.77277 - Eta_m - Mechanical Efficiency of Piston Engine

----- ENVIRONMENTAL PARAMETERS -----
 1.0000 - po_amb - Total Ambient Pressure, bar
 298.00 - To_amb - Total Ambient Temperature, K
 1.0400 - P_te - Exhaust Back Pressure, bar (after turbine)
 0.98000 - po_afltr - Total Pressure after Induction Air Filter, bar

----- TURBOCHARGING AND GAS EXCHANGE -----
 1.3230 - P_C - Pressure before Inlet Manifold, bar
 335.00 - T_C - Temperature before Inlet Manifold, K
 0.16478 - m_air - Total Mass Airflow (+EGR) of Piston Engine, kg/s
 0.47836 - Eta_TC - Turbocharger Efficiency
 1.3512 - po_T - Average Total Turbine Inlet Pressure, bar
 783.86 - To_T - Average Total Turbine Inlet Temperature, K
 0.16600 - m_gas - Mass Exhaust Gasflow of Piston Engine, [g/s]
 2.0597 - A/F_eq.t - Total Air Fuel Equivalence Ratio
 0.48550 - F/A_eq.t - Total Fuel Air Equivalence Ratio
 -0.43569 - FMEP - Pumping Mean Effective Pressure, bar
 0.92129 - Eta_v - Volumetric Efficiency
 0.03571 - x_r - Residual Gas Mass Fraction
 0.98185 - Phi - Coeff. of Scavenging (Delivery Ratio / Eta_v)
 0.30986 - BF_int - Burnt Gas Fraction Backflowed into the Intake, %
 1.6649 - %Blow-by - % of Blow-by through piston rings

----- INTAKE SYSTEM -----
 1.3213 - p_int - Average Intake Manifold Pressure, bar
 339.40 - T_int - Average Intake Manifold Temperature, K
 342.40 - Tw_int - Average Intake Manifold Wall Temperature, K
 70.997 - hc_int - Heat Transfer Coeff. in Intake Manifold, W/(m2*K)
 360.55 - hc_int.p - Heat Transfer Coeff. in Intake Port, W/(m2*K)

----- EXHAUST SYSTEM -----
 1.3365 - p_exh - Average Exhaust Manifold Gas Pressure, bar
 781.71 - T_exh - Average Exhaust Manifold Gas Temperature, K
 77.632 - v_exh - Average Gas Velocity in exhaust manifold, m/s
 8.0974 - Sh - Strouhal number: Sh=a*Tau/L (has to be: Sh > 8)
 711.45 - Tw_exh - Average Exhaust Manifold Wall Temperature, K
 185.14 - hc_exh - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Manifold, W/(m2*K)
 1195.5 - hc_exh.p - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Port, W/(m2*K)

----- COMBUSTION -----
 2.0978 - A/F_eq - Air Fiel Equivalence Ratio in the Cylinder
 0.47669 - F/A_eq - Fuel Air Equivalence Ratio in the Cylinder
 90.639 - p_max - Maximum Cylinder Pressure, bar
 1746.3 - T_max - Maximum Cylinder Temperature, K
 6.0000 - CA_P_max - Angle of Max. Cylinder Pressure, deg. A.TDC
 19.000 - CA t_max - Angle of Max. Cylinder Temperature, deg. A.TDC
 3.4203 - dp/dTheta - Max. Rate of Pressure Rise, bar/deg.
 Injection: Custom Fuel Injection System
 603.40 - p_inj.max - Max. Injection Pres. (before nozzles), bar
 19.571 - d_32 - Sauter Mean Diameter of Drops, microns
 18.000 - Theta_i - Injection / Ignition Timing, deg. B.TDC
 25.498 - Phi_inj - Duration of Injection, deg.
 2.0201 - Phi_id - Ignition Delay Period, deg.
 0.01401 - x_e.id - Fuel Mass Fraction Evaporated during Ignit. Delay
 115.40 - Phi_z - Combustion duration, deg.
 1.7330 - Rs_tdc - Swirl Ratio in the Combustion Chamber at TDC
 0.87315 - Rs_ivc - Swirl Ratio in the Cylinder at IVC
 14.346 - W_swirl - Max. Air Swirl Velocity, m/s at cylinder R=

31

----- ECOLOGICAL PARAMETERS -----
 6.9498 - Hartridge - Hartridge Smoke Level
 0.76248 - Bosch - Bosch Smoke Number
 0.16875 - K,m-1 - Factor of Absolute Light Absorption, 1/m
 0.17205 - PM - Specific Particulate Matter, g/kWh
 760.68 - CO2 - Specific Carbon dioxide emission, g/kWh
 1866.5 - NOx,ppm - Fraction of wet NOx in exh. gas, ppm
 14.438 - NO, g/kWh - Specif. NOx emiss. reduc. to NO, g/kWh (Zeldovich)
 2.6361 - SE - Summary emission of PM and NOx
 0.00800 - SO2 - Specific SO2 emission, g/kWh

----- CYLINDER PARAMETERS -----
 1.5351 - p_ivc - Pressure at IVC, bar
 399.57 - T_ivc - Temperature at IVC, K
 62.481 - p_tdc - Compression Pressure (at TDC), bar
 1060.7 - T_tdc - Compression Temperature (at TDC), K
 4.9422 - p_evo - Pressure at EVO, bar
 1096.3 - T_evo - Temperature at EVO, K

----- HEAT EXCHANGE IN THE CYLINDER -----
 1070.3 - T_eq - Average Equivalent Temperature of Cycle, K
 457.62 - hc_c - Aver. Factor of Heat Transfer in Cyl., Wt./m2/K
 527.42 - Tw_pist - Average Piston Crown Temperature, K
 420.00 - Tw_liner - Average Cylinder Liner Temperature, K
 479.46 - Tw_head - Average Head Wall Temperature, K
 384.42 - Tw_cool - Average Temperature of Cooled Surface of Cylinder Head, K
 398.16 - Tboil - Boiling Temp. in Liquid Cooling System, K
 11428. - hc_cool - Average Factor of Heat Transfer, W/(m2*K) from head cooled surface to coolant
 1998.1 - q_head - Heat Flow in a Cylinder Head, J/s
 1835.9 - q_pist - Heat Flow in a Piston Crown, J/s
 2016.3 - q_liner - Heat Flow in a Cylinder Liner, J/s

----- MAIN ENGINE CONSTRUCTION PARAMETERS -----

2014-06-19 13-07-14 "Mercedes Om352"
 Mode: #2 :: RPM=2000, PR=1.35;
 Title: om 352bio 2000
 www.Diesel-rk.bmstu.ru
 Fuel: Biofuel RME B100

- CR - Compression Ratio
 - n_inj - Number of Injector Nozzles
 - d_inj - Injector Nozzles Bore, mm
 - Phi_inj - Injection Duration for spec. Injection Profile, deg.
 - m_f_ip - Fuel Mass for specified Injection Profile, g
 - EVO - Exhaust Valve Opening, deg. before BDC
 - EVC - Exhaust Valve Closing, deg. after DC
 - IVO - Intake Valve Opening, deg. before DC
 - IVC - Intake Valve Closing, deg. after BDC

----- COMPRESSOR PARAMETERS HP stage -----
 6.1276 - P_C.hp - Power of HPC, kW
 0.72100 - Eta_C.hp - Adiabatic Efficiency of HPC
 0.16478 - m_C.hp - Mass Airflow of HP Compressor, kg/s
 2.9025 - m*_C.hp - Mass Airflow Parameter, kg SQRT(K)/(s bar)
 0.16814 - m_cor C.hp - Corrected Mass Airflow of HPC, kg/s
 1.3500 - PR_C.hp - Pressure Ratio of HP Compressor
 0.98000 - po_ic.hp - Inlet Total Pressure of HPC, bar
 298.00 - To_IC.hp - Inlet Total Temperature of HPC, K
 1.3230 - po_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, bar
 335.00 - To_C.hp - Total Temperature after Inter-cooler,]

----- TURBINE PARAMETERS HP stage -----
 6.1271 - P_T.hp - Effective Power of HPT, kW
 0.70374 - Eta_T.hp - Internal turbine Efficiency of HPT
 0.94600 - Eta_mT.hp - Mechanical Efficiency of HPT
 0.16600 - m_T.hp - Mass Gasflow of HPT, kg/s
 3.4395 - m*_T.hp - Mass Gasflow Parameter, kg SQRT(K)/s kPa
 1.2980 - PR_T.hp - Expansion Pressure Ratio of HPT
 5.2189 - B_T.hp - Relative Work: B=118.34 (1-PR** (1-k)/k) Eta_T]
 1.3512 - po_T.hp - Inlet Total Pressure of HPT, bar
 783.86 - To_T.hp - Inlet Total Temperature of HPT, K
 1.0410 - po_ex.hp - HP Turbine Exhaust Back Pressure, bar
 748.96 - To_ex.hp - HP Turbine Exhaust Back Temperature, K

THE ALLOCATION OF FUEL IN THE ZONES AT THE END OF INJECTION
 =====
 N! In plan; Spray! Impingment! Fractions of fuel in the zones %
 s! Angle! Angle! Surface! Dilut. S.Core Piston Inters. Head Liner
 =====
 1! 0.0 | 70.0 | pist. bowl; 64.02 7.74 28.10 15.54 0.13 0.00
 =====
 Sum of all sprays % 100. | 42.72 19.32 15.47 21.42 0.59 0.00
 =====
 Evaporation constants bi | 34084 678 201 170 136 0
 =====
 The note: "Inters." is column with fraction of fuel in a zone of
 intersection of Near-Wall Flows formed by adjacents sprays.
 Rs:Swirl; (Piston clearance,mm 1.00) !Optimal!-Geometric formula: 2.35
 Ratio; Rs of piston bowl 1.73 | Rs | -by Razleytsev : 2.35

----- EXHAUST SYSTEM -----
 2.7391 - p_exh - Average Exhaust Manifold Gas Pressure, bar
 869.99 - T_exh - Average Exhaust Manifold Gas Temperature, K
 53.211 - v_exh - Average Gas Velocity in exhaust manifold, m/s
 11.959 - Sh - Strouhal number: Sh=a*tau/L (has to be: Sh > 8)
 775.47 - Tw_exh - Average Exhaust Manifold Wall Temperature, K
 138.31 - hc_exh - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Manifold, W/(m2*K)
 893.11 - hc_exh.p - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Port, W/(m2*K)

----- PARAMETERS OF EFFICIENCY AND POWER -----
 2000.0 - RPM
 - Engine Speed, rev/min
 137.46 - P_eng - Piston Engine Power, kW
 14.533 - BMEP - Brake Mean Effective Pressure, bar
 656.39 - Torque - Brake Torque, N m
 0.09310 - m_f - Mass of Fuel Supplied per cycle, g
 0.24382 - SFC - Specific Fuel Consumption, kg/kWh
 0.37427 - Eta_f - Efficiency of piston engine
 16.644 - IMEP - Indicated Mean Effective Pressure, bar
 0.42865 - Eta_i - Indicated Efficiency
 1.9348 - FMEP - Friction Mean Effective Pressure, bar
 0.87315 - Eta_m - Mechanical Efficiency of Piston Engine

----- ENVIRONMENTAL PARAMETERS -----
 1.0000 - po_amb - Total Ambient Pressure, bar
 298.00 - To_amb - Total Ambient Temperature, K
 1.0400 - p_Te - Exhaust Back Pressure, bar (after turbine)
 0.98000 - po_afiltr - Total Pressure after Induction Air Filter, bar

----- TURBOCHARGING AND GAS EXCHANGE -----
 - P_C - Pressure before Inlet Manifold, bar
 - T_C - Temperature before Inlet Manifold, K
 450.40 - m_air - Total Mass Airflow (+EGR) of Piston Engine, kg/s
 0.20647 - Eta_TC - Turbocharger Efficiency
 0.51425 - po_T - Average Total Turbine Inlet Pressure, bar
 2.7520 - To_T - Average Total Turbine Inlet Temperature, K
 871.01 - m_gas - Mass Exhaust Gasflow of Piston Engine, [g/s
 0.21025 - A/F_eq.t - Total Air Fuel Equivalence Ratio
 1.7465 - F/A_eq.t - Total Fuel Air Equivalence Ratio
 0.57257 - PMEP - Pumping Mean Effective Pressure, bar
 -0.17649 - Eta_v - Volumetric Efficiency
 0.97291 - x_r - Residual Gas Mass Fraction
 0.03269 - Phi - Coeff. of Scavenging (Delivery Ratio / Eta_v)
 0.98682 - BF_int - Burnt Gas Fraction Backflowed into the Intake, %
 0.00488 - %Blow-by - % of Blow-by through piston rings
 2.6348

----- INTAKE SYSTEM -----
 2.9362 - p_int - Average Intake Manifold Pressure, bar
 452.134 - T_int - Average Intake Manifold Temperature, K
 455.34 - Tw_int - Average Intake Manifold Wall Temperature, K
 95.235 - hc_int - Heat Transfer Coeff. in Intake Manifold, W/(m2*K)
 223.72 - hc_int.p - Heat Transfer Coeff. in Intake Port, W/(m2*K)

```

1.7699 - A/F_eq - Air Fuel Equivalence Ratio in the Cylinder
0.56501 - F/A_eq - Fuel Air Equivalence Ratio in the Cylinder
226.67 - P_max - Maximum Cylinder Pressure, bar
2289.2 - T_max - Maximum Cylinder Temperature, K
5.0000 - CA_P_max - Angle of Max. Cylinder Pressure, deg. A.TDC
11.000 - CA_T_max - Angle of Max. Cylinder Temperature, deg. A.TDC
8.8134 - dp/dtheta - Max. Rate of Pressure Rise, bar/deg.
Injection: Custom Fuel Injection System
2002.6 - p_inj_max - Max. Injection Pres. (before nozzles), bar
12.479 - d_32 - Sauter Mean Diameter of Drops, microns
18.000 - Theta_i - Injection / Ignition Timing, deg. B.TDC
20.909 - Phi_inj - Duration of Injection, deg.
1.0646 - Phi_ld - Ignition Delay Period, deg.
0.00611 - x_e.id - Fuel Mass Fraction Evaporated during Ignit.
Delay
62.400 - Phi_z - Combustion duration, deg.
1.7330 - Rs_tdc - Swirl Ratio in the Combustion Chamber at TDC
0.83667 - Rs_ivc - Swirl Ratio in the Cylinder at IVC
10.247 - W_swirl - Max. Air Swirl Velocity, m/s at cylinder R=
----- ECOLOGICAL PARAMETERS -----
0.01546 - Hartridge - Hartridge Smoke Level
0.00169 - Bosch - Bosch Smoke Number
0.36811E-03 - K,m=1 - Factor of Absolute Light Absorption, 1/m
0.81092E-04 - PM - Specific Particulate Matter, g/kWh
695.33 - CO2 - Specific Carbon dioxide emission, g/kWh
3105.4 - NOx,ppm - Fraction of wet NOx in exh. gas, ppm
18.635 - NO, g/kWh - Specific. NOx emiss. reduc. to NO, g/kWh
(Zeldevich)
2.6624 - SE - Summary emission of PM and NOx
0.00731 - SO2 - Specific SO2 emission, g/kWh
----- CYLINDER PARAMETERS -----
3.3297 - p_ivc - Pressure at IVC, bar
495.99 - T_ivc - Temperature at IVC, K
129.72 - p_tdc - Compression Pressure (at TDC), bar
1264.1 - T_tdc - Compression Temperature (at TDC), K
9.3619 - p_evo - Pressure at EVO, bar
1172.9 - T_evo - Temperature at EVO, K
----- HEAT EXCHANGE IN THE CYLINDER -----
1419.1 - T_eq - Average Equivalent Temperature of Cycle, K
685.15 - hc_c - Aver. Factor of Heat Transfer in Cyl., Wt/m2/K
664.90 - Tw_pist - Average Piston Crown Temperature, K
420.00 - Tw_liner - Average Cylinder Liner Temperature, K
604.46 - Tw_head - Average Head Wall Temperature, K
406.81 - Tw_cool - Average Temperature of Cooled Surface
of Cylinder Head, K
398.16 - Tboil - Boiling Temp. in Liquid Cooling System, K
11951. - hc_cool - Average Factor of Heat Transfer, W/(m2*K)
from head cooled surface to coolant
4124.3 - q_head - Heat Flow in a Cylinder Head, J/s
-----
3818.3 - q_pist - Heat Flow in a Piston Crown, J/s
3361.6 - q_liner - Heat Flow in a Cylinder Liner, J/s
----- MAIN ENGINE CONSTRUCTION PARAMETERS -----
17.000 - CR - Compression Ratio
6.0000 - n_inj - Number of Injector Nozzles
-----
- d_inj - Injector Nozzles Bore, mm
- Phi_inj - Injection Duration for spec. Injection Profile,
deg.
- m_f_ip - Fuel Mass for specified Injection Profile, g
- EVO - Exhaust Valve Opening, deg. before BDC
- EVC - Exhaust Valve Closing, deg. after DC
- IVO - Intake Valve Opening, deg. before DC
- IVC - Intake Valve Closing, deg. after BDC
----- COMPRESSOR PARAMETERS HP stage -----
31.624 - P_C.hp - Power of HPC, kW
0.72100 - Eta_C.hp - Adiabatic Efficiency of HPC
0.20647 - m_C.hp - Mass Airflow of HP Compressor, kg/s
3.6370 - m*_C.hp - Mass Airflow Parameter, kg SQRT(K)/(s bar)
0.21069 - m_cor_Chp - Corrected Mass Airflow of HPC, kg/s
3.0000 - PR_C.hp - Pressure Ratio of HP Compressor
0.98000 - po_ic.hp - Inlet Total Pressure of HPC, bar
298.00 - To_ic.hp - Inlet Total Temperature of HPC, K
2.9400 - po_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, bar
450.40 - To_C.hp - Total Temperature after Inter-cooler, ]
----- TURBINE PARAMETERS HP stage -----
31.628 - P_T.hp - Effective Power of HPT, kW
0.75359 - Eta_T.hp - Internal turbine Efficiency of HPT
0.94600 - Eta_mf.hp - Mechanical Efficiency of HPT
0.21025 - m_T.hp - Mass Gasflow of HPT, kg/s
2.2547 - m*_T.hp - Mass Gasflow Parameter, kg SQRT(K)/s kPa
2.6479 - PR_T.hp - Expansion Pressure Ratio of HPT
19.141 - B_T.hp - Relative Work: B=118.34 {1-PR**(1-k)/k} Eta_T}
2.7520 - po_T.hp - Inlet Total Pressure of HPT, bar
871.01 - To_T.hp - Inlet Total Temperature of HPT, K
1.0393 - po_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Pressure, bar
726.02 - To_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Temperature, K
-----
THE ALLOCATION OF FUEL IN THE ZONES AT THE END OF INJECTION
N:In plan; Spray;Impingment; Fractions of fuel in the zones %
S: Angle ; Angle; Surface ; Dilut. S.Core Piston Inters. Head Liner
1: 0.0 ; 70.0 ; pist. bowl; 73.92 0.11 19.55 19.55 6.39 0.03
-----
Sum of all sprays % 100.1 55.27 5.44 0.00 33.49 5.79 0.01
-----
Evaporation constants bi |110697 10110 5134 4338 1419 1
The note: "Inters." is column with fraction of fuel in a zone of
intersection of Near-Wall Flows formed by adjacents sprays.
Rs:Swirl; (Piston clearance,mm 1.00) ;Optimal;-Geometric formula: 2.87
Ratio; Rs of piston bowl 1.73 ; Rs | -by Razleytsev : 2.14
-----
Versions: Kernel 24.09.08; RK-model 25.09.08; NOx-model 5.06.08

```

RPM 1600

2014-06-19 13-06-09 "Mercedes Om352"
 Mode: #3 : RPM=1600, PR=1.35;
 Title: om_352bio_1600
 www.Diesel-rk.bmstu.ru
 Fuel: Biofuel RME B100

```

----- PARAMETERS OF EFFICIENCY AND POWER -----
1600.0 - RPM
106.84 - Engine Speed, rev/min
14.119 - P_eng - Piston Engine Power, kW
14.119 - BMEP - Brake Mean Effective Pressure, bar
637.69 - Torque - Brake Torque, N m
0.09310 - m_f - Mass of Fuel Supplied per cycle, g
0.25097 - SFC - Specific Fuel Consumption, kg/kWh
0.36361 - Eta_f - Efficiency of piston engine
16.096 - IMEP - Indicated Mean Effective Pressure, bar
0.41455 - Eta_i - Indicated Efficiency
1.8120 - FMEP - Friction Mean Effective Pressure, bar
0.87713 - Eta_m - Mechanical Efficiency of Piston Engine

----- ENVIRONMENTAL PARAMETERS -----
1.0000 - po_amb - Total Ambient Pressure, bar
298.00 - To_amb - Total Ambient Temperature, K
1.0400 - p_te - Exhaust Back Pressure, bar (after turbine)
0.98000 - po_afltr - Total Pressure after Induction Air Filter, bar

----- TURBOCHARGING AND GAS EXCHANGE -----
2.9400 - p_c - Pressure before Inlet Manifold, bar
450.40 - T_c - Temperature before Inlet Manifold, K
0.16624 - m_air - Total Mass Airflow (+EGR) of Piston Engine, kg/s
0.51373 - Eta_TC - Turbocharger Efficiency
2.8704 - po_T - Average Total Turbine Inlet Pressure, bar
845.54 - To_T - Average Total Turbine Inlet Temperature, K
0.16816 - m_gas - Mass Exhaust Gasflow of Piston Engine, [g/s]
1.7578 - A/F_eq.t - Total Air Fuel Equivalence Ratio
0.56890 - F/A_eq.t - Total Fuel Air Equivalence Ratio
-0.16586 - FMEP - Pumping Mean Effective Pressure, bar
0.97924 - Eta_v - Volumetric Efficiency
0.03372 - x_r - Residual Gas Mass Fraction
0.98675 - Phi - Coeff. of Scavenging (Delivery Ratio / Eta_v)
0.00142 - BF_int - Burnt Gas Fraction Backflowed into the Intake, %
3.2820 - %Blow-by - % of Blow-by through piston rings

----- INTAKE SYSTEM -----
2.9373 - p_int - Average Intake Manifold Pressure, bar
451.89 - T_int - Average Intake Manifold Temperature, K
454.89 - Tw_int - Average Intake Manifold Wall Temperature, K
95.740 - hc_int - Heat Transfer Coeff. in Intake Manifold, W/(m2*K)
184.65 - hc_int.p - Heat Transfer Coeff. in Intake Port, W/(m2*K)

----- EXHAUST SYSTEM -----
2.8627 - p_exh - Average Exhaust Manifold Gas Pressure, bar
844.97 - T_exh - Average Exhaust Manifold Gas Temperature, K
39.668 - v_exh - Average Gas Velocity in exhaust manifold, m/s
14.733 - Sh - Strouhal number: Sh=a*Tau/L (has to be: Sh > 8)
748.75 - Tw_exh - Average Exhaust Manifold Wall Temperature, K
115.15 - hc_exh - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Manifold, W/(m2*K)
743.55 - hc_exh.p - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Port, W/(m2*K)

----- COMBUSTION -----

```

```

1.7814 - A/F_eq - Air Fiel Equivalence Ratio in the Cylinder
0.56135 - F/A_eq - Fuel Air Equivalence Ratio in the Cylinder
230.99 - p_max - Maximum Cylinder Pressure, bar
2297.9 - T_max - Maximum Cylinder Temperature, K
5.0000 - CA_p_max - Angle of Max. Cylinder Pressure, deg. A.TDC
10.000 - CA_t_max - Angle of Max. Cylinder Temperature, deg. A.TDC
9.1087 - dp/dTheta - Max. Rate of Pressure Rise, bar/deg.
Injection: Custom Fuel Injection System
1262.0 - p_inj_max - Max. Injection Pres. (before nozzles), bar
14.031 - d_32 - Sauter Mean Diameter of Drops, microns
18.000 - Theta_i - Injection / Ignition Timing, deg. B.TDC
20.909 - Phi_inj - Duration of Injection, deg.
0.92999 - Phi_ld - Ignition Delay Period, deg.
0.00496 - x_e.id - Fuel Mass Fraction Evaporated during Ignit.
Delay
55.800 - Phi_z - Combustion duration, deg.
1.7330 - Rs_tdc - Swirl Ratio in the Combustion Chamber at TDC
0.81933 - Rs_ivc - Swirl Ratio in the Cylinder at IVC
8.1978 - W_swirl - Max. Air Swirl Velocity, m/s at cylinder R=

```

31

```

----- ECOLOGICAL PARAMETERS -----
0.01466 - Hartridge - Hartridge Smoke Level
0.00161 - Bosch - Bosch Smoke Number
0.34896E-03 - K,m-1 - Factor of Absolute Light Absorption, 1/m
0.78243E-04 - PM - Specific Particulate Matter, g/kWh
715.72 - CO2 - Specific Carbon dioxide emission, g/kWh
3036.9 - NOx,ppm - Fraction of wet NOx in exh. gas, ppm
18.865 - NO - NO, g/kWh - Specif. NOx emiss. reduc. to NO, g/kWh
(Zeldovich)
2.6952 - SE - Summary emission of PM and NOx
0.00753 - SO2 - Specific SO2 emission, g/kWh

----- CYLINDER PARAMETERS -----
3.3173 - p_ivc - Pressure at IVC, bar
490.69 - T_ivc - Temperature at IVC, K
128.96 - p_tdc - Compression Pressure (at TDC), bar
1250.5 - T_tdc - Compression Temperature (at TDC), K
9.0733 - p_evo - Pressure at EVO, bar
1134.9 - T_evo - Temperature at EVO, K

----- HEAT EXCHANGE IN THE CYLINDER -----
1446.7 - T_eq - Average Equivalent Temperature of Cycle, K
615.05 - hc_c - Aver. Factor of Heat Transfer in Cyl., Wt/m2/K
650.22 - Tw_pist - Average Piston Crown Temperature, K
420.00 - Tw_liner - Average Cylinder Liner Temperature, K
591.11 - Tw_head - Average Head Wall Temperature, K
404.81 - Tw_cool - Average Temperature of Cooled Surface of Cylinder Head, K
398.16 - Tboil - Boiling Temp. in Liquid Cooling System, K
11787. - hc_cool - Average Factor of Heat Transfer, W/(m2*K)
from head cooled surface to coolant
3888.8 - q_head - Heat Flow in a Cylinder Head, J/s
3620.2 - q_pist - Heat Flow in a Piston Crown, J/s
2736.1 - q_liner - Heat Flow in a Cylinder Liner, J/s

----- MAIN ENGINE CONSTRUCTION PARAMETERS -----
17.000 - CR - Compression Ratio
6.0000 - n_inj - Number of Injector Nozzles

```

RPM 1400

2014-06-19 13-05-03 "Mercedes Om352"

Mode: #4 : RPM=1400, PR=1.35;

Title: om 352bio 1400

www.Diesel-rk.bmstu.ru

Fuel: Biofuel RME B100

0.19000 - d_inj - Injector Nozzles Bore, mm
21.000 - Phi_inj - Injection Duration for spec. Injection Profile, deg.
0.0000 - m_f_ip - Fuel Mass for specified Injection Profile, g
64.000 - EVO - Exhaust Valve Opening, deg. before BDC
15.000 - IVC - Exhaust Valve Closing, deg. after DC
10.000 - IVO - Intake Valve Opening, deg. before DC
42.000 - IVC - Intake Valve Closing, deg. after BDC

----- COMPRESSOR PARAMETERS HP stage -----
25.462 - P_C.hp - Power of HPC, kW
0.72100 - Eta_C.hp - Adiabatic Efficiency of HPC
0.16624 - m_C.hp - Mass Airflow of HP Compressor, kg/s
2.9284 - m*_C.hp - Mass Airflow Parameter, kg SQR(T(K))/(s bar)
0.16964 - m_cor.Chp - Corrected Mass Airflow of HPC, kg/s
3.0000 - PR_C.hp - Pressure Ratio of HP Compressor
0.98000 - po_iC.hp - Inlet Total Pressure of HPC, bar
298.00 - To_iC.hp - Inlet Total Temperature of HPC, K
2.9400 - po_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, bar
450.40 - To_C.hp - Total Temperature after Inter-cooler, J

----- TURBINE PARAMETERS HP stage -----
25.462 - P_T.hp - Effective Power of HPT, kW
0.75359 - Eta_T.hp - Internal turbine Efficiency of HPT
0.94600 - Eta_mT.hp - Mechanical Efficiency of HPT
0.16816 - m_T.hp - Mass Gasflow of HPT, kg/s
1.7036 - m*_T.hp - Mass Gasflow Parameter, kg SQR(T(K))/s kPa
2.7582 - PR_T.hp - Expansion Pressure Ratio of HPT
19.847 - B_T.hp - Relative Work: B=118.34 (1-PR**(1-k)/k) Eta_T}
2.8704 - po_T.hp - Inlet Total Pressure of HPT, bar
845.54 - To_T.hp - Inlet Total Temperature of HPT, K
1.0407 - po_eT.hp - HP Turbine Exhaust Back Pressure, bar
699.43 - To_eT.hp - HP Turbine Exhaust Back Temperature, K

THE ALLOCATION OF FUEL IN THE ZONES AT THE END OF INJECTION

N: In plan; SprayImpingment; Fractions of fuel in the zones %
S: Angle; Angle; Surface; Dilut. S.Core; Piston; Inters. Head; Liner
I: 0.0; 70.0; pist. bowl; 72.67; 3.69; 18.33; 18.33; 5.30; 0.01
Sum of all sprays % 100.0; 54.25; 6.97; 1.16; 32.31; 5.28; 0.01
Evaporation constants bi 102747; 9503; 3547; 2998; 1069; 0

The note: "Inters." is column with fraction of fuel in a zone of intersection of Near-Wall Flows formed by adjacents sprays.
Rs:Swirl; (Piston clearance,mm 1.00) ;Optimal;-Geometric formula: 2.87
Ratio; Rs of piston bowl 1.73; Rs | -by Razleytsev : 2.14

----- Versions: Kernel 24.09.08; RK-model 25.09.08; NOx-model 5.06.08

----- PARAMETERS OF EFFICIENCY AND POWER -----
1400.0 - RPM - Engine Speed, rev/min
91.118 - P_eng - Piston Engine Power, kW
13.761 - BMEP - Brake Mean Effective Pressure, bar
621.56 - Torque - Brake Torque, N m
0.09310 - m_f - Mass of Fuel Supplied per cycle, g
0.25748 - SFC - Specific Fuel Consumption, kg/kWh
0.35441 - Eta_f - Efficiency of piston engine
15.698 - IMEP - Indicated Mean Effective Pressure, bar
0.40429 - Eta_i - Indicated Efficiency
1.7512 - FMEP - Friction Mean Effective Pressure, bar
0.87664 - Eta_m - Mechanical Efficiency of Piston Engine

----- ENVIRONMENTAL PARAMETERS -----
1.0000 - po_amb - Total Ambient Pressure, bar
298.00 - To_amb - Total Ambient Temperature, K
1.0400 - p_Te - Exhaust Back Pressure, bar (after turbine)
0.98000 - po_afltr - Total Pressure after Induction Air Filter, bar

----- TURBOCHARGING AND GAS EXCHANGE -----
2.9400 - P_C - Pressure before Inlet Manifold, bar
450.40 - T_C - Temperature before Inlet Manifold, K
0.14600 - m_air - Total Mass Airflow (+EGR) of Piston Engine, kg/s
0.51399 - Eta_TC - Turbocharger Efficiency
2.9460 - po_T - Average Total Turbine Inlet Pressure, bar
830.49 - To_T - Average Total Turbine Inlet Temperature, K
0.14699 - m_gas - Mass Exhaust Gasflow of Piston Engine, [g/s
1.7643 - A/F_eq.t - Total Air Fuel Equivalence Ratio
0.56680 - F/A_eq.t - Total Fuel Air Equivalence Ratio
-0.18529 - PMEP - Pumping Mean Effective Pressure, bar
0.98317 - Eta_v - Volumetric Efficiency
0.03500 - x_r - Residual Gas Mass Fraction
0.98644 - Phi - Coeff. of Scavenging (Delivery Ratio / Eta_v)
0.00523 - BF_int - Burnt Gas Fraction Backflowed into the Intake, %
3.7452 - %Blow-by - % of Blow-by through piston rings

----- INTAKE SYSTEM -----
2.9372 - p_int - Average Intake Manifold Pressure, bar
451.76 - T_int - Average Intake Manifold Temperature, K
454.76 - Tw_int - Average Intake Manifold Wall Temperature, K
96.007 - hc_int - Heat Transfer Coeff. in Intake Manifold, W/(m2*K)
164.89 - hc_int.p - Heat Transfer Coeff. in Intake Port, W/(m2*K)

----- EXHAUST SYSTEM -----
2.9403 - P_exh - Average Exhaust Manifold Gas Pressure, bar
830.09 - T_exh - Average Exhaust Manifold Gas Temperature, K
33.323 - v_exh - Average Gas Velocity in exhaust manifold, m/s
16.688 - Sh - Strouhal number: Sh=a*Tau/L (has to be: Sh > 8)
733.25 - Tw_exh - Average Exhaust Manifold Wall Temperature, K
103.20 - hc_exh - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Manifold, W/(m2*K)
666.38 - hc_exh.p - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Port, W/(m2*K)

```

17.000 - CR - Compression Ratio
6.0000 - n_inj - Number of Injector Nozzles
0.19000 - d_inj - Injector Nozzles Bore, mm
21.000 - Phi_inj - Injection Duration for spec. Injection Profile,
deg.
0.0000 - m_f_ip - Fuel Mass for specified Injection Profile, g
64.000 - EVO - Exhaust Valve Opening, deg. before BDC
15.000 - EVC - Exhaust Valve Closing, deg. after DC
10.000 - IVO - Intake Valve Opening, deg. before DC
42.000 - IVC - Intake Valve Closing, deg. after BDC
----- COMPRESSOR PARAMETERS HP stage -----
22.362 - P_C.hp - Power of HPC, kW
0.72100 - Eta_C.hp - Adiabatic Efficiency of HPC
0.14600 - m_C.hp - Mass Airflow of HP Compressor, kg/s
2.5718 - m*_C.hp - Mass Airflow Parameter, kg SQRT(K)/(s bar)
0.14898 - m.cor Chp - Corrected Mass Airflow of HPC, kg/s
3.0000 - PR_C.hp - Pressure Ratio of HP Compressor
0.98000 - po_iC.hp - Inlet Total Pressure of HPC, bar
298.00 - To_iC.hp - Inlet Total Temperature of HPC, K
2.9400 - po_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, bar
450.40 - To_C.hp - Total Temperature after Inter-cooler, ]
----- TURBINE PARAMETERS HP stage -----
22.362 - P_T.hp - Effective Power of HPT, kW
0.75359 - Eta_T.hp - Internal turbine Efficiency of HPT
0.94600 - Eta_mT.hp - Mechanical Efficiency of HPT
0.14699 - m_T.hp - Mass Gasflow of HPT, kg/s
1.4379 - m*_T.hp - Mass Gasflow Parameter, kg SQRT(K)/s kPa
2.8325 - PR_T.hp - Expansion Pressure Ratio of HPT
20.303 - B_T.hp - Relative Work: B=118.34 {1-PR** (1-k) /k} Eta_T}
2.9460 - po_T.hp - Inlet Total Pressure of HPT, bar
830.49 - To_T.hp - Inlet Total Temperature of HPT, K
1.0401 - po_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Pressure, bar
683.58 - To_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Temperature, K

```

```

----- THE ALLOCATION OF FUEL IN THE ZONES AT THE END OF INJECTION -----
N! In plan! Spray! Impingment! Fractions of fuel in the zones %
s! Angle! Angle! Surface! Dilut. S.Core Piston Inters. Head Liner
l! 0.0 | 70.0 | pist. bowl | 72.79 | 3.97 | 18.83 | 17.02 | 4.40 | 0.01
Sum of all sprays % 100. | 54.26 | 7.62 | 3.82 | 29.92 | 4.28 | 0.00
Evaporation constants bi | 94383 | 8885 | 2782 | 2350 | 903 | 0
The note: "Inters." is column with fraction of fuel in a zone of
intersection of Near-Wall Flows formed by adjacents sprays.
Rs:Swirl! (Piston clearance,mm 1.00) !Optimal! -Geometric formula: 2.87
Ratio! Rs of piston bowl 1.73 | Rs | -by Razleytsev : 2.14
Versions: Kernel 24.09.08; RK-model 25.09.08; NOx-model 5.06.08

```

RPM 1000

```

1.7886 - A/F_eq - Air Fiel Equivalence Ratio in the Cylinder
0.55910 - F/A_eq - Fuel Air Equivalence Ratio in the Cylinder
233.74 - P_max - Maximum Cylinder Pressure, bar
2303.6 - T_max - Maximum Cylinder Temperature, K
5.0000 - CA_P.max - Angle of Max. Cylinder Pressure, deg. A.TDC
10.000 - CA_T.max - Angle of Max. Cylinder Temperature, deg. A.TDC
9.2568 - dp/dTheta - Max. Rate of Pressure Rise, bar/deg.
Injection: Custom Fuel Injection System
967.57 - p_inj.max - Max. Injection Pres. (before nozzles), bar
15.050 - d_32 - Sauter Mean Diameter of Drops, microns
18.000 - Theta_i - Injection / Ignition Timing, deg. B.TDC
20.909 - Phi_inj - Duration of Injection, deg.
0.84518 - Phi_id - Ignition Delay Period, deg.
0.00430 - x_e.id - Fuel Mass Fraction Evaporated during Ignit.
Delay
52.000 - Phi_z - Combustion duration, deg.
1.7330 - Rs_tdc - Swirl Ratio in the Combustion Chamber at TDC
0.81212 - Rs_ivc - Swirl Ratio in the Cylinder at IVC
7.1731 - W_swirl - Max. Air Swirl Velocity, m/s at cylinder R=
----- ECOLOGICAL PARAMETERS -----
0.01743 - Hartridge - Hartridge Smoke Level
0.00191 - Bosch - Bosch Smoke Number
0.41491E-03 - K,m-1 - Factor of Absolute Light Absorption, 1/m
0.98807E-04 - PM - Specific Particulate Matter, g/kWh
734.30 - CO2 - Specific Carbon dioxide emission, g/kWh
2978.9 - NOx,ppm - Fraction of wet NOx in exh. gas, ppm
19.056 - NO, g/kWh - Specific. NOx emiss. reduc. to NO, g/kWh
(Zeldovich)
2.7226 - SE - Summary emission of PM and NOx
0.00772 - SO2 - Specific SO2 emission, g/kWh
----- CYLINDER PARAMETERS -----
3.3205 - p_ivc - Pressure at IVC, bar
488.85 - T_ivc - Temperature at IVC, K
128.78 - p_tdc - Compression Pressure (at TDC), bar
1244.8 - T_tdc - Compression Temperature (at TDC), K
8.8950 - p_evo - Pressure at EVO, bar
1111.7 - T_evo - Temperature at EVO, K
----- HEAT EXCHANGE IN THE CYLINDER -----
1465.4 - T_eq - Average Equivalent Temperature of Cycle, K
578.56 - hc_c - Aver. Factor of Heat Transfer in Cyl., Wt./m2/K
642.65 - Tw_pist - Average Piston Crown Temperature, K
420.00 - Tw_liner - Average Cylinder Liner Temperature, K
584.22 - Tw_head - Average Head Wall Temperature, K
404.07 - Tw_cool - Average Temperature of Cooled Surface
of Cylinder Head, K
398.16 - Tboil - Boiling Temp. in Liquid Cooling System, K
11697. - hc_cool - Average Factor of Heat Transfer, W/(m2*K)
from head cooled surface to coolant
3767.4 - q_head - Heat Flow in a Cylinder Head, J/s
----- MAIN ENGINE CONSTRUCTION PARAMETERS -----
3517.6 - q_pist - Heat Flow in a Piston Crown, J/s
2427.4 - q_liner - Heat Flow in a Cylinder Liner, J/s

```


2014-06-19 13-03-06 "Mercedes Om352"
 Mode: #5 : RPM=1000, PR=1.35;
 Title: om 352bio 1000
 www.Diesel-rk.bmstu.ru
 Fuel: Biofuel RME B100

```

-----
PARAMTERS OF EFFICIENCY AND POWER
-----
1000.0 - RPM
58.981 - Engine Speed, rev/min
12.471 - P_eng - Piston Engine Power, kW
563.27 - BMEP - Brake Mean Effective Pressure, bar
0.09310 - Torque
0.28412 - m_f - Mass of Fuel Supplied per cycle, g
0.32118 - SFC - Specific Fuel Consumption, kg/kWh
14.427 - IMEP - Indicated Mean Effective Pressure, bar
0.37156 - Eta_i - Indicated Efficiency
1.6146 - FMEP - Friction Mean Effective Pressure, bar
0.86441 - Eta_m - Mechanical Efficiency of Piston Engine

-----
ENVIRONMENTAL PARAMETERS
-----
1.0000 - po_amb - Total Ambient Pressure, bar
298.00 - To_amb - Total Ambient Temperature, K
1.0400 - p_Te - Exhaust Back Pressure, bar (after turbine)
0.98000 - po_afltr - Total Pressure after Induction Air Filter, bar

-----
TURBOCHARGING AND GAS EXCHANGE
-----
2.9400 - p_C - Pressure before Inlet Manifold, bar
450.40 - T_C - Temperature before Inlet Manifold, K
0.10371 - m_air - Total Mass Airflow (+EGR) of Piston Engine, kg/s
0.51340 - Eta_TC - Turbocharger Efficiency
3.1721 - po_T - Average Total Turbine Inlet Pressure, bar
794.77 - To_T - Average Total Turbine Inlet Temperature, K
0.10288 - m_gas - Mass Exhaust Gasflow of Piston Engine, [g/s]
1.7545 - A/F_eq.t - Total Air Fuel Equivalence Ratio
0.56995 - F/A_eq.t - Total Fuel Air Equivalence Ratio
-0.34164 - FMEP - Pumping Mean Effective Pressure, bar
0.97976 - Eta_v - Volumetric Efficiency
0.04167 - x_r - Residual Gas Mass Fraction
0.98448 - Phi - Coeff. of Scavenging (Delivery Ratio / Eta_v)
0.19466 - BF_int - Burnt Gas Fraction Backflowed into the Intake, %
5.2469 - $Blow-by - % of Blow-by through piston rings

-----
INTAKE SYSTEM
-----
2.9354 - p_int - Average Intake Manifold Pressure, bar
452.31 - T_int - Average Intake Manifold Temperature, K
455.31 - Tw_int - Average Intake Manifold Wall Temperature, K
95.545 - hc_int - Heat Transfer Coeff. in Intake Manifold, W/(m2*K)
124.95 - hc_int.p - Heat Transfer Coeff. in Intake Port, W/(m2*K)

-----
EXHAUST SYSTEM
-----
3.1697 - p_exh - Average Exhaust Manifold Gas Pressure, bar
794.62 - T_exh - Average Exhaust Manifold Gas Temperature, K
20.534 - v_exh - Average Gas Velocity in exhaust manifold, m/s
22.859 - Sh - Strouhal number: Sh=a*Tau/L (has to be: Sh > 8)
700.81 - Tw_exh - Average Exhaust Manifold Wall Temperature, K
90.000 - hc_exh - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Manifold, W/(m2*K)
498.113 - hc_exh.p - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Port, W/(m2*K)

-----
COMBUSTION
-----

```

```

1.7825 - A/F_eq - Air Fiel Equivalence Ratio in the Cylinder
0.56102 - F/A_eq - Fuel Air Equivalence Ratio in the Cylinder
236.94 - P_max - Maximum Cylinder Pressure, bar
2324.5 - T_max - Maximum Cylinder Temperature, K
5.0000 - CA_P_max - Angle of Max. Cylinder Pressure, deg. A.TDC
8.0000 - CA_T_max - Angle of Max. Cylinder Temperature, deg. A.TDC
9.4030 - dp/dTheta - Max. Rate of Pressure Rise, bar/deg.
Injection: Custom Fuel Injection System
537.46 - p_inj_max - Max. Injection Pres. (before nozzles), bar
18.014 - d_32 - Sauter Mean Diameter of Drops, microns
18.000 - Theta_i - Injection / Ignition Timing, deg. B.TDC
20.909 - Phi_inj - Duration of Injection, deg.
0.64981 - Phi_ld - Ignition Delay Period, deg.
0.00287 - x_e.id - Fuel Mass Fraction Evaporated during Ignit.
Delay
42.800 - Phi_z - Combustion duration, deg.
1.7330 - Rs_tdc - Swirl Ratio in the Combustion Chamber at TDC
0.79312 - Rs_ivc - Swirl Ratio in the Cylinder at IVC
5.1236 - W_swirl - Max. Air Swirl Velocity, m/s at cylinder R=

```

31

```

-----
ECOLOGICAL PARAMETERS
-----
0.03909 - Hartridge - Hartridge Smoke Level
0.00428 - Bosch - Bosch Smoke Number
0.93070E-03 - K,m-1 - Factor of Absolute Light Absorption, 1/m
0.28310E-03 - PM - Specific Particulate Matter, g/kWh
810.28 - CO2 - Specific Carbon dioxide emission, g/kWh
2782.0 - NOx,ppm - Fraction of wet NOx in exh. gas, ppm
19.600 - NO - NO, g/kWh - Specif. NOx emiss. reduc. to NO, g/kWh
(zelidovich)
2.8009 - SE - Summary emission of PM and NOx
0.00852 - SO2 - Specific SO2 emission, g/kWh

-----
CYLINDER PARAMETERS
-----
3.3004 - p_ivc - Pressure at IVC, bar
485.61 - T_ivc - Temperature at IVC, K
126.98 - p_tdc - Compression Pressure (at TDC), bar
1232.5 - T_tdc - Compression Temperature (at TDC), K
8.3433 - p_evo - Pressure at EVO, bar
1054.2 - T_evo - Temperature at EVO, K

-----
HEAT EXCHANGE IN THE CYLINDER
-----
1513.3 - T_eq - Average Equivalent Temperature of Cycle, K
497.40 - hc_c - Aver. Factor of Heat Transfer in Cyl., Wt/m2/K
624.35 - Tw_pist - Average Piston Crown Temperature, K
420.00 - Tw_liner - Average Cylinder Liner Temperature, K
567.60 - Tw_head - Average Head Wall Temperature, K
400.70 - Tw_cool - Average Temperature of Cooled Surface of Cylinder Head, K
398.16 - Tboil - Boiling Temp. in Liquid Cooling System, K
11496. - hc_cool - Average Factor of Heat Transfer, W/(m2*K)
from head cooled surface to coolant
3476.2 - q_head - Heat Flow in a Cylinder Head, J/s
3267.6 - q_pist - Heat Flow in a Piston Crown, J/s
1809.6 - q_liner - Heat Flow in a Cylinder Liner, J/s

-----
MAIN ENGINE CONSTRUCTION PARAMETERS
-----
17.000 - CR - Compression Ratio
6.0000 - n_inj - Number of Injector Nozzles

```

0.19000 - d_inj - Injector Nozzles Bore, mm
 21.000 - Phi_inj - Injection Duration for spec. Injection Profile, deg.

0.0000 - m_f_ip - Fuel Mass for specified Injection Profile, g
 64.000 - EVO - Exhaust Valve Opening, deg. before BDC
 15.000 - EVC - Exhaust Valve Closing, deg. after DC
 10.000 - IVO - Intake Valve Opening, deg. before DC
 42.000 - IVC - Intake Valve Closing, deg. after BDC

----- COMPRESSOR PARAMETERS HP stage -----
 15.885 - P_C.hp - Power of HPC, kW
 0.72100 - Eta_C.hp - Adiabatic Efficiency of HPC
 0.10371 - m_C.hp - Mass Airflow of HP Compressor, kg/s
 1.82669 - m*_C.hp - Mass Airflow Parameter, kg SQRT(K)/(s bar)
 0.10583 - m_cor_Chp - Corrected Mass Airflow of HPC, kg/s
 3.0000 - PR_C.hp - Pressure Ratio of HP Compressor
 0.98000 - po_IC.hp - Inlet Total Pressure of HPC, bar
 298.00 - To_IC.hp - Inlet Total Temperature of HPC, K
 2.9400 - po_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, bar
 450.40 - To_C.hp - Total Temperature after Inter-cooler, J

----- TURBINE PARAMETERS HP stage -----
 15.896 - P_T.hp - Effective Power of HPT, kW
 0.75359 - Eta_T.hp - Internal turbine Efficiency of HPT
 0.94600 - Eta_m_T.hp - Mechanical Efficiency of HPT
 0.10288 - m_T.hp - Mass Gasflow of HPT, kg/s
 0.91436 - m*_T.hp - Mass Gasflow Parameter, kg SQRT(K)/s kPa
 3.0481 - PR_T.hp - Expansion Pressure Ratio of HPT
 21.545 - B_T.hp - Relative Work: B=118.34 (1-PR**(1-k)/k) Eta_T
 3.1721 - po_T.hp - Inlet Total Pressure of HPT, bar
 794.77 - To_T.hp - Inlet Total Temperature of HPT, K
 1.0407 - po_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Pressure, bar
 645.26 - To_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Temperature, K

THE ALLOCATION OF FUEL IN THE ZONES AT THE END OF INJECTION
 N:In plan; SprayImpingment; Fractions of fuel in the zones %
 S:Angle; Angle; Surface; Dilut. S.Core; Piston; Inters. Head; Liner
 1: 0.0; 70.0; pist.bowl; 73.35; 4.74; 19.51; 13.26; 2.40; 0.00
 Sum of all sprays % 100.1; 54.83; 8.73; 8.35; 25.28; 2.35; 0.00
 Evaporation constants bi | 59603; 5757; 1185; 1001; 466; 0
 The note: "Inters." is column with fraction of fuel in a zone of intersection of Near-Wall Flows formed by adjacents sprays.
 Rs:Swirl; (Piston clearance,mm 1.00);Optimal;-Geometric formula: 2.87
 Ratio; Rs of piston bowl 1.73; Rs |-by Razleytsev : 2.14

 Versions: Kernel 24.09.08; RK-model 25.09.08; NOx-model 5.06.08

2014-06-19 13-01-37 "Mercedes Om352"
 Model: #6 : RPM=900, PR=1.35;
 Title: om 352bio 900
 www.Diesel-rk.bmstu.ru
 Fuel: Biofuel RME B100

----- PARAMETERS OF EFFICIENCY AND POWER -----
 900.00 - RPM
 51.123 - Engine Speed, rev/min
 12.011 - P_eng - Piston Engine Power, kW
 542.48 - Brake Mean Effective Pressure, bar
 0.09310 - m_f - Brake Torque, N m
 0.29502 - SFC - Mass of Fuel Supplied per cycle, g
 0.30932 - Eta_f - Specific Fuel Consumption, kg/kWh
 13.970 - IMEP - Efficiency of piston engine
 0.35979 - Eta_i - Indicated Mean Effective Pressure, bar
 1.5728 - FMEP - Indicated Efficiency
 0.85974 - Eta_m - Friction Mean Effective Pressure, bar
 - Mechanical Efficiency of Piston Engine

----- ENVIRONMENTAL PARAMETERS -----
 1.0000 - po_amb - Total Ambient Pressure, bar
 298.00 - To_amb - Total Ambient Temperature, K
 1.0400 - p_Te - Exhaust Back Pressure, bar (after turbine)
 0.98000 - po_afltr - Total Pressure after Induction Air Filter, bar

----- TURBOCHARGING AND GAS EXCHANGE -----
 2.9400 - P_C - Pressure before Inlet Manifold, bar
 450.40 - T_C - Temperature before Inlet Manifold, K
 0.09282 - m_air - Total Mass Airflow (+EGR) of Piston Engine, kg/s
 0.51442 - Eta_TC - Turbocharger Efficiency
 3.2455 - po_T - Average Total Turbine Inlet Pressure, bar
 783.93 - To_T - Average Total Turbine Inlet Temperature, K
 0.09155 - m_gas - Mass Exhaust Gasflow of Piston Engine, [g/s
 1.7448 - A/F_eq.t - Total Air Fuel Equivalence Ratio
 0.57314 - F/A_eq.t - Total Fuel Air Equivalence Ratio
 -0.38666 - PMEP - Pumping Mean Effective Pressure, bar
 0.97460 - Eta_v - Volumetric Efficiency
 0.04442 - x_r - Residual Gas Mass Fraction
 0.98397 - Phi - Coeff. of Scavenging (Delivery Ratio / Eta_v)
 0.31121 - BF_int - Burnt Gas Fraction Backflowed into the Intake, %
 5.8292 - %Blow-by - % of Blow-by through piston rings

----- INTAKE SYSTEM -----
 2.9368 - p_int - Average Intake Manifold Pressure, bar
 452.79 - T_int - Average Intake Manifold Temperature, K
 455.83 - Tw_int - Average Intake Manifold Wall Temperature, K
 95.042 - hc_int - Heat Transfer Coeff. in Intake Manifold, W/(m2*K)
 114.67 - hc_int,p - Heat Transfer Coeff. in Intake Port, W/(m2*K)

----- EXHAUST SYSTEM -----
 3.2436 - p_exh - Average Exhaust Manifold Gas Pressure, bar
 783.82 - T_exh - Average Exhaust Manifold Gas Temperature, K
 17.798 - v_exh - Average Gas Velocity in exhaust manifold, m/s
 25.226 - Sh - Strouhal number: Sh=a*Tau/L (has to be: Sh > 8)
 692.32 - Tw_exh - Average Exhaust Manifold Wall Temperature, K
 90.000 - hc_exh - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Manifold, W/(m2*K)
 451.42 - hc_exh,p - Heat Transfer Coeff. in Exhaust Port, W/(m2*K)

----- COMBUSTION -----

```

1.7725 - A/F_eq - Air Fuel Equivalence Ratio in the Cylinder
0.56419 - F/A_eq - Fuel Air Equivalence Ratio in the Cylinder
235.92 - P_max - Maximum Cylinder Pressure, bar
2323.9 - T_max - Maximum Cylinder Temperature, K
5.0000 - CA_P_max - Angle of Max. Cylinder Pressure, deg. A.TDC
8.0000 - CA_T_max - Angle of Max. Cylinder Temperature, deg. A.TDC
9.3377 - dp/dtheta - Max. Rate of Pressure Rise, bar/Deg.
Injection: Custom Fuel Injection System
460.75 - P_inj_max - Max. Injection Pres. (before nozzles), bar
19.082 - d_32 - Sauter Mean Diameter of Drops, microns
18.000 - Theta_i - Injection / Ignition Timing, deg. B.TDC
20.909 - Phi_inj - Duration of Injection, deg.
0.59531 - Phi_ld - Ignition Delay Period, deg.
0.00246 - x_e.id - Fuel Mass Fraction Evaporated during Ignit.
Delay
41.400 - Phi_z - Combustion duration, deg.
1.7330 - Rs_tdc - Swirl Ratio in the Combustion Chamber at TDC
0.80008 - Rs_ivc - Swirl Ratio in the Cylinder at IVC
4.6113 - W_swirl - Max. Air Swirl Velocity, m/s at cylinder R=
----- ECOLOGICAL PARAMETERS -----
0.05300 - Hartridge - Hartridge Smoke Level
0.00581 - Bosch - Bosch Smoke Number
0.00126 - K,m=1 - Factor of Absolute Light Absorption, 1/m
0.41962E-03 - PM - Specific Particulate Matter, g/kWh
841.34 - CO2 - Specific Carbon dioxide emission, g/kWh
2718.1 - NOx,ppm - Fraction of wet NOx in exh. gas, ppm
19.795 - NO - NO, g/kWh - Specif. NOx emiss. reduc. to NO, g/kWh
(Zeldovich)
2.8293 - SE - Summary emission of PM and NOx
0.00885 - SO2 - Specific SO2 emission, g/kWh
----- CYLINDER PARAMETERS -----
3.2800 - P_ivc - Pressure at IVC, bar
484.38 - T_ivc - Temperature at IVC, K
125.80 - P_tdc - Compression Pressure (at TDC), bar
1227.9 - T_tdc - Compression Temperature (at TDC), K
8.1457 - P_evo - Pressure at EVO, bar
1037.5 - T_evo - Temperature at EVO, K
----- HEAT EXCHANGE IN THE CYLINDER -----
1525.0 - T_eq - Average Equivalent Temperature of Cycle, K
473.78 - hc_c - Aver. Factor of Heat Transfer in Cyl., Wt/m2/K
617.79 - Tw_pist - Average Piston Crown Temperature, K
420.00 - Tw_liner - Average Cylinder Liner Temperature, K
561.62 - Tw_head - Average Head Wall Temperature, K
399.56 - Tw_cool - Average Temperature of Cooled Surface
of Cylinder Head, K
398.16 - Tboil - Boiling Temp. in Liquid Cooling System, K
11440. - hc_cool - Average Factor of Heat Transfer, W/(m2*K)
from head cooled surface to coolant
3372.8 - q_head - Heat Flow in a Cylinder Head, J/s
3176.2 - q_pist - Heat Flow in a Piston Crown, J/s
1651.7 - q_liner - Heat Flow in a Cylinder Liner, J/s
----- MAIN ENGINE CONSTRUCTION PARAMETERS -----
17.000 - CR - Compression Ratio
6.0000 - r_inj - Number of Injector Nozzles
0.19000 - d_inj - Injector Nozzles Bore, mm
21.000 - Phi_inj - Injection Duration for spec. Injection Profile,
deg.
0.0000 - m_f_ip - Fuel Mass for specified Injection Profile, g
64.000 - EVO - Exhaust Valve Opening, deg. before BDC
15.000 - EVC - Exhaust Valve Closing, deg. after DC
10.000 - IVO - Intake Valve Opening, deg. before DC
42.000 - IVC - Intake Valve Closing, deg. after BDC
----- COMPRESSOR PARAMETERS HP stage -----
14.217 - P_C.hp - Power of HPC, kW
0.72100 - Eta_C.hp - Adiabatic Efficiency of HPC
0.09282 - m_C.hp - Mass Airflow of HP Compressor, kg/s
1.6350 - m*_C.hp - Mass Airflow Parameter, kg SQRT(K)/(s bar)
0.09472 - m_cor Chp - Corrected Mass Airflow of HPC, kg/s
3.0000 - PR_C.hp - Pressure Ratio of HP Compressor
0.98000 - po_ic.hp - Inlet Total Pressure of HPC, bar
298.00 - To_ic.hp - Inlet Total Temperature of HPC, K
2.9400 - po_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, bar
450.40 - To_C.hp - Total Pressure after Inter-cooler, ]
----- TURBINE PARAMETERS HP stage -----
14.199 - P_T.hp - Effective Power of HPT, kW
0.75359 - Eta_T.hp - Internal turbine Efficiency of HPT
0.94600 - Eta_mt.hp - Mechanical Efficiency of HPT
0.09155 - m_T.hp - Mass Gasflow of HPT, kg/s
0.78976 - m*_T.hp - Mass Gasflow Parameter, kg SQRT(K)/s kPa
3.1186 - PR_T.hp - Expansion Pressure Ratio of HPT
21.928 - B_T.hp - Relative Work: B=118.34 {1-PR** (1-k) /k} Eta_T]
3.2455 - po_T.hp - Inlet Total Pressure of HPT, bar
783.93 - To_T.hp - Inlet Total Temperature of HPT, K
1.0407 - po_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Pressure, bar
633.75 - To_et.hp - HP Turbine Exhaust Back Temperature, K
----- THE ALLOCATION OF FUEL IN THE ZONES AT THE END OF INJECTION -----
N! In plan! Spray! Impingment! Fractions of fuel in the zones %
s! Angle! Angle! Surface! Dilut. S.Core Piston Inters. Head Liner
1! 0.0! 70.0! pist. bowl! 73.45 4.81 19.73 12.60 2.01 0.00
Sum of all sprays % 99.1 55.02 8.49 9.42 24.50 1.95 0.00
Evaporation constants bi : 49789 4801 857 724 362 0
The note: "Inters." is column with fraction of fuel in a zone of
intersection of Near-Wall Flows formed by adjacents sprays.
Rs:Swirl! (Piston clearance,mm 1.00) !Optimal!-Geometric formula: 2.87
Ratio! Rs of piston bowl 1.73 ! Rs !-by Razleytsev : 2.14
Versions: Kernel 24.09.08; RK-model 25.09.08; NOx-model 5.06.08

```

ANNEXE E

**CODE MATLAB POUR LA
DISTRIBUTION DU SPRAY**

ANNEXE F

CODE MATLAB MODIFIE POUR LES

EMISSIONS DE NOX

ANNEXE G
USER GUIDE RK-DIESEL

DIESEL - RK

Software for engine simulation and optimization

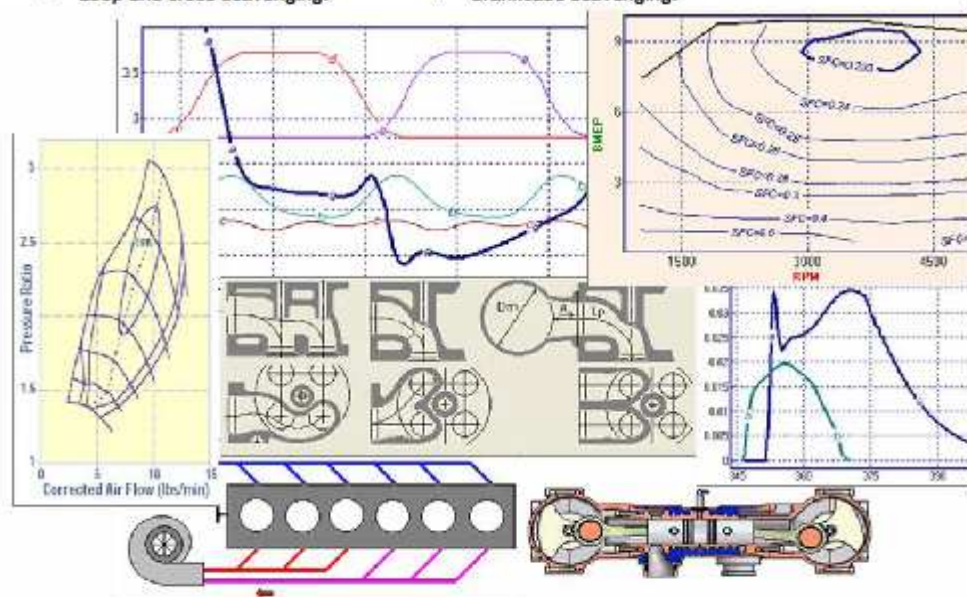
www.diesel-rk.bmstu.ru

The full cycle thermodynamic engine simulation software DIESEL-RK is designed for simulating and optimizing working processes of two- and four-stroke internal combustion engines with all types of boosting. The program can be used for modeling the following types of engines:

- DI Diesel engines (with PCCI).
- SI petrol engines.
- SI gas engines including prechamber systems.

For two-stroke engines the DIESEL-RK supports the following scavenging schemes:

- Uniflow scavenging.
- Junkers & OPOC schemes.
- Z-engine concept
- Loop and cross scavenging.
- Crankcase scavenging.



Typical applications include:

- Torque curve and other engine performances predictions.
- Fuel consumption prediction and optimization.
- Combustion and emission analysis and optimization.
- Knock prediction.
- Valve timing optimization.
- EGR analysis and optimization.
- Turbocharger and bypasses matching and optimization.
- Conversion of diesel engines into gas engines.

The program DIESEL-RK makes it possible to simulate the working process of any type of internal combustion engines with high accuracy of predictions with the use of minimum empirical coefficients. The values of these coefficients are constant for any configuration and operating modes of engines and over the whole operating range including part load and idling.

- The DIESEL-RK is a best tool for a new engine concept analysis because one allows creation of a new project very easily and fast. Philosophy of work of pre- and post-processors is focused on help to engineer.
- The modern models of combustion and emissions formations together with built-in optimization procedures allow optimal emission control corresponding with actual emission regulations. These functions were fully tested in industry.
- A model of the gas exchange takes into account the non-steady gas flow in ports, specifics of the port's design, the influence of the neighboring cylinders and the design features of the pulse converter. The two-stroke engine scavenging model is based on the perfect gas mixing law and the perfect displacement and short circuit hypotheses. Such the model allows engineers to numerically optimize the valve timing and also the design configuration of intake and exhaust ports of two-stroke engines.
- DIESEL-RK supports modeling and analysis of engines with two-stage turbocharging, Hyperbar concept, etc., and can be used for matching characteristics of piston engines with turbine and compressor maps.
- The DIESEL-RK solver may be run under the control of an external code. In that case the interface of the program includes input & output text files. Templates of these files are generated automatically.

ANNEXE H
STANDARD GAZOLE

DOSSIER RÉGLEMENTAIRE

Comité Professionnel Du Pétrole

Mise à jour au 06/06/2005

GAZOLE NF EN 590

CSR 408
 1er Mai 2005

annule et remplace la feuille CSR 407 du 17 Septembre 2004

SPECIFICATIONS (of nota)	a) DOUANIERES		b) ADMINISTRATIVES		c) INTERSYNDICALES
REFERENCES	Loi n° 66-523 du 14/12/66 Arrêté du 01/03/76	J.O. du 15/12/66 J.O. du 31/03/76	Arrêté du 23/12/1999 du 05/02/2004	J.O. du 29/12/1999 du 28/02/2004	
REFERENCE NORME AFNOR	NF EN 590 (1)				
DEFINITION ADMINISTRATIVE	Mélange d'hydrocarbures d'origine minérale ou de synthèse et, éventuellement, d'ester méthylique d'acide gras, destiné à l'alimentation des moteurs thermiques à allumage par compression.				
MASSE VOLUMIQUE à 15 °C (2) (NF EN ISO 3675:1998) (NF EN ISO 12185:1996+Cor1:2001)			de 820 à 845 kg/m ³		
DISTILLATION (% v/v) récupéré à 260 °C % (v/v) récupéré à 350 °C 95 % (v/v) récupéré à (NF EN ISO 3405:2000)	Inférieur à 65 % 85 % Minimum		Inférieur à 65 % 85 % Minimum 360 °C Maximum		
VISCOSITE à 40 °C (NF EN ISO 3104:1996)			de 2,00 à 4,50 mm ² /s		
TENEUR EN SOUFRE (3) (NF EN ISO 20846:2004) / (NF EN ISO 20884:2004) (NF EN ISO 20847:2004) (NF EN ISO 20846:2004) / (NF EN ISO 20884:2004)			50,0 mg/kg maximum jusqu'au 31/12/08 10,0 mg/kg maximum à compter du 01/01/09		
TENEUR EN EAU (NF EN ISO 12937:2001)			Maximum 200 mg/kg		
CONTAMINATION TOTALE (NF EN 12662:1998)			Maximum 24 mg/kg		
TENEUR EN CENDRES (NF EN ISO 6245:2002)			Maximum 0,01 % (m/m)		
INDICE DE CETANE mesuré (NF EN ISO 5165:1998) (8)			Minimum 51,0		
INDICE DE CETANE calculé (NF EN ISO 4264:1997)			Minimum 46,0		
RESIDU DE CARBONE (sur le résidu 10 % de distillation) (NF EN ISO 10370:1995) (4)			Maximum 0,30 % (m/m) (valeur basée sur un produit exempt d'améliorateur de cétane)		
CORROSION A LA LAME DE CUIVRE (3 h à 60 °C) (NF EN ISO 2160:1998)			Classe 1		
STABILITE A L'OXYDATION (NF EN ISO 12205:1996)			Maximum 25 g/m ³		
POINT D'ECLAIR (NF EN ISO 2718:2003)	Inférieur à 120 °C (NF T 60-103)		Supérieur à 55 °C		
POUVOIR LUBRIFIANT (5) (NF EN ISO 12156-1:2000) - méthode HFRR			diamètre de marque d'usure corrigée (wsd 1,4) à 60 °C maximum 460 µm		
POINT DE TROUBLE (NF EN 23015:1994)					Du 1er octobre au 31 mars Maximum - 5 °C Du 1er avril au 30 septembre Maximum + 5 °C
TEMPERATURE LIMITE DE FILTRABILITE (NF EN 116:1888)			Du 1er novembre au 31 mars - Classe E Maximum - 15 °C Du 1er avril au 31 octobre - Classe B Maximum 0 °C		Du 1er octobre au 31 mars - Classe E Maximum - 15 °C Du 1er avril au 30 septembre - Classe B Maximum 0 °C
HYDROCARBURES AROMATIQUES POLYCYCLIQUES (8) (NF EN 12916:2000)			11 % (m/m) Maximum		
CONDUCTIVITE ELECTRIQUE (7) ISO 6297:1997 (mesure) NF EN ISO 3170:2004 (prélèvements)					150 pS/m à 20 °C au minimum (seul additif antistatique autorisé : Stads 450)
TENEUR EN ESTER MÉTHYLIQUE D'ACIDE GRAS (8) (EMAG) (NF EN 14078:2004)			5 % (v/v) Maximum		

Notes (1) à (9) : voir au verso.

