



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur
et de la Recherche Scientifique
Université de Tissemsilt



Faculté des Sciences et de la Technologie
Département de Génie Civil, Génie Mécanique et de Transport

Mémoire de fin d'études pour l'obtention du diplôme
de Master académique en

Filière : **Génie mécanique**

Spécialité : **Installations énergétiques et turbomachines**

Présentée par : **Lamri Chahinez**

Thème

**Simulation CFD de la combustion dans le cylindre d'un moteur
diesel stationnaire alimenté par des mélanges
diesel-ammoniac.**

Soutenu le, 06 juillet 2026

Devant le Jury :

MADKOUR MIHOUB	Président	M.C.A.	Univ-Tissemsilt
ZEBBAR Djallel	Encadreur	Prof.	Univ-Tissemsilt
BENLEFKI ABDELAKRIM	Examinatrice	M.C.A.	Univ-Tissemsilt

Année universitaire : 2025-2026

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

À mon très cher père, pour son amour, son soutien indéfectible, ses sacrifices et ses encouragements tout au long de mon parcours. Que Dieu le protège et lui accorde santé et bonheur.

À la mémoire de ma très chère mère, dont l'absence demeure une douleur profonde. Son amour, ses sacrifices et ses prières continuent d'éclairer mon chemin. Qu'Allah lui accorde Sa miséricorde et l'accueille dans son vaste paradis.

À ma chère tante, qui a occupé auprès de moi la place d'une mère, pour son affection, sa bienveillance, son soutien et tous les efforts qu'elle a consentis pour mon éducation et ma réussite.

À mes frères et sœurs, pour leur présence, leur affection et leurs encouragements constants.

À mes neveux et nièces, source de joie et d'espoir, à qui je souhaite un avenir rempli de réussite et de bonheur.

À mon encadrant, pour son accompagnement, ses précieux conseils et son soutien tout au long de la réalisation de ce mémoire.

À tous ceux qui ont contribué, de près ou de loin, à ma formation et à l'aboutissement de ce travail.

Remerciements

Avant tout, je remercie Allah le Tout-Puissant de m'avoir accordé la force, la santé et la persévérance nécessaires pour mener à bien ce travail.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude et mes sincères remerciements à mon encadrant, Monsieur Zebbar Djallel pour son accompagnement exceptionnel tout au long de ce projet. Je le remercie chaleureusement pour sa disponibilité, sa patience, sa confiance, ainsi que pour ses précieux conseils scientifiques et méthodologiques. Son soutien constant, ses orientations pertinentes et la qualité de son encadrement ont été déterminants dans la réalisation de ce mémoire. Qu'il trouve ici l'expression de mon profond respect et de ma reconnaissance la plus sincère.

J'adresse également mes remerciements à l'ensemble de mes enseignants et professeurs de l'université, qui ont contribué à ma formation académique et scientifique durant toutes mes années d'études. Grâce à leurs connaissances, leur dévouement et leurs enseignements, j'ai pu acquérir les compétences nécessaires à l'accomplissement de ce travail.

Je remercie également les membres du jury qui ont accepté d'évaluer ce mémoire et d'y apporter leurs remarques constructives.

Liste des abréviations.

Abréviation	Signification
AMR	Adaptive Mesh Refinement
BDC	Bottom Dead Center
CAD	Crank Angle Degree
CA50	Angle vilebrequin correspondant à 50 % du dégagement de chaleur cumulé
CFD	Computational Fluid Dynamics
CO	Monoxyde de carbone
CO₂	Dioxyde de carbone
CONVERGE CFD	Logiciel de simulation CFD
ERS	Energy Replacement Share
H₂	Hydrogène
H₂O	Vapeur d'eau
HRR	Heat Release Rate
IC Engine	Internal Combustion Engine
NH₃	Ammoniaque
NO	Monoxyde d'azote
NO₂	Dioxyde d'azote
NO_x	Oxydes d'azote
N₂O	Protoxyde d'azote
O₂	Oxygène
OH	Radical hydroxyle
PMH	Point Mort Haut
PMB	Point Mort Bas
RNG	Renormalization Group
SAGE	Detailed Chemistry Solver de CONVERGE
SOI	Start Of Injection
Soot	Suie
TDC	Top Dead Center

Nomenclature

Symbole	Désignation	Unité
A	Facteur préexponentiel d'Arrhenius	–
CAD	Angle de vilebrequin	°CA
D	Coefficient de diffusion	m ² /s
E	Énergie spécifique totale	J/kg
Ea	Énergie d'activation	J/mol
Gk	Terme de production de turbulence	–
k	Énergie cinétique turbulente	m ² /s ²
K	Température absolue	K
p	Pression	Pa
R	Constante universelle des gaz parfaits	J/mol·K
Sh	Terme source d'énergie	-
T	Température	K
U	Vecteur vitesse	m/s
Yi	Fraction massique de l'espèce <i>i</i>	–
ρ	Masse volumique	kg/m ³
μ	Viscosité dynamique	Pa·s
ε	Taux de dissipation turbulente	m ² /s ³
ω _i	Taux de production ou de consommation chimique	kg/m ³ ·s
λ	Conductivité thermique	W/m·K

Liste des figures

N°	Titre de la figure	page de la figure
Fig. 1	Cycle de fonctionnement d'un moteur à gasoil à quatre temps	20
Fig. 2	Schéma d'un moteur Gasoil stationnaire.	21
Fig. 3	Ammoniaque comme vecteur énergétique et carburant alternatif.	28
Fig. 4	Configuration d'un moteur Gasoil–Ammoniaque en mode dual-fuel	30
Fig. 5	Exemple de maillage adaptatif utilisé dans la simulation CFD d'un moteur à combustion interne.	37
Fig. 6	Vue générale du moteur Lister Petter PH1.	49
Fig. 7	Géométrie de la chambre de combustion utilisée dans les simulations numériques.	52
Fig. 8	Géométrie du piston utilisée dans le modèle numérique.	53
Fig. 9	Domaine de calcul sectoriel (60°) utilisé dans les simulations numériques.	54
Fig. 10	Géométrie finale importée dans CONVERGE Studio.	55
Fig. 11	Maillage du domaine de calcul généré sous CONVERGE CFD.	56
Fig. 12	Positions du piston dans le domaine de calcul : (a) point mort haut (PMH) et (b) point mort bas (PMB)	58
Fig. 13	Exemple de raffinement adaptatif du maillage dans la chambre de combustion.	59
Fig. 14	Comparaison de la pression cylindre entre les résultats numériques et expérimentaux.	67
Fig. 15	Étude d'indépendance du maillage : pression cylindre en fonction de l'angle de vilebrequin pour différentes tailles de maille.	68
Fig. 16	Validation du modèle numérique par comparaison de la pression cylindre obtenue expérimentalement et numériquement.	72
Fig. 17	Distribution de la température au pic de combustion : (a) gasoil pur ; (b) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 50 %) ; (c) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 60 %)	74
Fig. 18	Distribution de la température à la fin de la combustion : (a) gasoil pur ; (b) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 50 %) ; (c) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 60 %).	77
Fig. 19	Distribution des oxydes d'azote (NOx) au pic de combustion : (a) gasoil pur ; (b) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 50 %) ; (c) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 60 %).	79
Fig. 20	Distribution des oxydes d'azote (NOx) à la fin de la combustion : (a) gasoil pur ; (b) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 50 %) ; (c) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 60 %).	81
Fig. 21	Distribution de la fraction massique du CO ₂ au pic de combustion pour les trois cas étudiés : Gasoil pur, Diesel/NH ₃ (ESR = 50 %) et Diesel/NH ₃ (ESR = 60 %).	83

Fig. 22	Distribution de la fraction massique du CO₂ en fin de combustion pour les trois cas étudiés : Gasoil pur, Diesel/NH₃ (ESR = 50 %) et Diesel/NH₃ (ESR = 60 %)	85
Fig. 23	Distribution de la fraction massique de suie (Hiroy_Soot) au pic de combustion pour les cas Gasoil pur, Diesel/NH₃ (ESR = 50 %) et Diesel/NH₃ (ESR = 60 %).	87
Fig. 24	Distribution de la fraction massique de suie (HIROY_SOOT) à la fin de la combustion pour les différents taux de substitution en ammoniac	89
Fig. 25	Distribution de la fraction massique du monoxyde de carbone (CO) au pic de combustion pour les cas Diesel, NH₃ 50 % et NH₃ 60 %.	91
Fig. 26	Distribution de la fraction massique du monoxyde de carbone (CO) à la fin de la combustion pour les cas Diesel, NH₃ 50 % et NH₃ 60 %.	93

Liste des tableaux

N°	Titre du tableau	Page
Tab. 1	Comparaison des principaux carburants alternatifs pour moteurs Diesel.	25
Tab. 2	Propriétés physicochimiques de l'ammoniaque.	27
Tab. 3	Synthèse des travaux antérieurs.	44
Tab. 4	Principales caractéristiques techniques du moteur Lister Petter PH1.	50
Tab. 5	Principaux modèles physiques et chimiques utilisés dans les simulations CFD.	63
Tab. 6	Composition du mécanisme chimique utilisé dans les simulations.	64
Tab. 7	Conditions initiales et aux limites utilisées dans les simulations CFD.	66
Tab. 8	Débits massiques de gasoil et d'ammoniaque utilisés pour les différents taux de substitution énergétique (ERS).	66

SOMMAIRE

Dédicace	2
Remerciements	3
Introduction générale	12
Chapitre 1 — Revue bibliographique	15
Introduction	16
1.1 Moteurs a gasoil stationnaires	16
1.1.1 Principe de fonctionnement	16
1.1.2 Caractéristiques des moteurs stationnaires	18
1.2 Paramètres influençant la combustion	19
1.3 Carburants alternatifs pour moteurs gasoil	19
1.3.1 Biogasoil	20
1.3.2 Gaz naturel	20
1.3.3 Hydrogène	20
1.3.4 Ammoniaque	21
1.4 Propriétés physicochimiques de l’ammoniaque	23
1.5 Combustion Gasoil–Ammoniaque	25
1.5.1 Modes d’injection	26
1.5.2 Stratégies de co-combustion	28
1.5.3 Difficultés de combustion	30
1.5.4 Formation des émissions	31
1.6 Simulation CFD des moteurs à combustion interne	32
1.6.1 Introduction à la CFD	32
1.6.2 Équations gouvernantes	34
Conservation de la masse	35
Conservation de la quantité de mouvement	35
Conservation de l’énergie	35
Équation de transport des espèces chimiques	36
1.6.3 Modèles de turbulence	36
Équation de transport de l’énergie cinétique turbulente (k)	37
Équation de transport de la dissipation turbulente (ϵ)	37
1.6.4 Modèles de combustion	39

1.6.5 Modèles d'émissions	40
Réactions de Zeldovich	40
1.7 Travaux antérieurs	41
1.7.1 Synthèse critique des études récentes	41
1.7.2 Lacunes scientifiques identifiées	42
1.8 Conclusion	43
CHAPITRE 2 — Modélisation numérique	45
Introduction	46
2.1 Présentation du moteur étudié	46
2.1.1 Description générale du moteur	47
2.1.2 Caractéristiques techniques du moteur	48
2.1.3 Conditions de fonctionnement	49
2.2 Domaine de calcul et géométrie de la chambre de combustion	49
2.2.1 Géométrie de la chambre de combustion	49
2.2.2 Géométrie du piston	50
2.2.3 Domaine de calcul	52
2.2.4 Création de la géométrie sous CONVERGE Studio	54
2.2.5 Maillage numérique	55
2.2.5.1 Génération du maillage	55
2.2.6 Maillage dynamique	57
2.2.6 Raffinement adaptatif du maillage (AMR)	58
2.2.7 Qualité du maillage	59
2.3 Modèles physiques et chimiques utilisés	60
2.3.1 Modèle de turbulence RNG k- ϵ	60
2.3.2 Modèle de pulvérisation KH-RT	60
2.3.3 Modèle d'évaporation Frössling	61
2.3.4 Modèle de combustion SAGE	61
2.3.5 Modèle de formation des NO _x	62
2.3.6 Modèle de formation des suies	62
2.4 Synthèse des modèles utilisés	62
2.5 Mécanisme chimique	63
2.5.1 Présentation du mécanisme réactionnel	63
2.5.2 Espèces chimiques et réactions élémentaires	63
2.5.3 Couplage avec le modèle SAGE	65

2.5.4 Conditions initiales et aux limites	65
2.6 Procédure de simulation numérique	67
2.6.1 Prétraitement	67
2.6.2 Calcul numérique	67
2.6.3 Critères de convergence	67
2.7 Validation du modèle numérique	68
2.7.1 Méthodologie de validation	68
2.7.2 Validation de la pression dans le cylindre	68
2.7.3 Analyse de l'erreur	69
2.7.4 Conclusion de la validation	70
2.8 Étude d'indépendance du maillage	67
Conclusion	68
Chapitre 3 — Résultats et discussion	73
Introduction	74
3.1 Validation du modèle numérique	74
3.1.1 Validation de la pression cylindre	74
3.2 Comparaison entre le gasoil pur et le cas NH3 (ERS = 50 %)	74
3.2.1 Distribution de la température dans la chambre de combustion	75
3.2.3 Distribution de la fraction massique du CO ₂	84
3.2.4 distribution de la fraction massique de suie (Hiroy_Soot)	88
Conclusion	96
Conclusion générale	98

Introduction générale

Face à l'augmentation continue de la demande énergétique mondiale et aux préoccupations croissantes liées aux changements climatiques, la réduction des émissions polluantes issues du secteur des transports constitue aujourd'hui un défi majeur. Les moteurs Diesel sont largement utilisés dans les secteurs industriel, agricole et du transport grâce à leur rendement élevé et leur robustesse. Cependant, leur fonctionnement repose principalement sur des carburants fossiles responsables des importantes émissions de dioxyde de carbone (CO_2), contribuant ainsi au réchauffement climatique.

Dans ce contexte, la recherche de carburants alternatifs capables de réduire l'empreinte carbone des moteurs à combustion interne suscite un intérêt croissant. Parmi les solutions envisagées, l'ammoniaque apparaît comme un vecteur énergétique prometteur en raison de son absence de carbone dans sa structure moléculaire, de sa forte densité énergétique volumique et de sa capacité à être produit à partir d'énergies renouvelables. Son utilisation dans les moteurs à combustion interne pourrait contribuer à la transition vers des systèmes énergétiques plus durables.

Malgré ces avantages, l'emploi de l'ammoniaque dans les moteurs Diesel présente plusieurs défis techniques, notamment sa faible réactivité, sa vitesse de combustion relativement lente et son impact potentiel sur les émissions polluantes. L'étude du comportement de la combustion et de la formation des émissions dans les moteurs alimentés par un mélange gasoil–ammoniaque est donc essentielle afin d'évaluer la faisabilité de cette solution énergétique.

L'objectif principal de ce mémoire est d'étudier numériquement l'influence de l'ammoniaque sur la combustion et les émissions polluantes d'un moteur Diesel monocylindre de type Lister Petter PH1 à l'aide du logiciel CONVERGE CFD. L'analyse porte sur trois cas de fonctionnement correspondant au gasoil pur ($\text{ERS} = 0\%$), ainsi qu'à des taux de substitution énergétique par l'ammoniaque de 50 % et 60 %.

La méthodologie adoptée repose sur la modélisation tridimensionnelle du moteur, la validation du modèle numérique à partir de données de référence issues de la littérature, puis l'analyse de l'évolution de la pression dans le cylindre, de la température et des émissions de NO_x , CO_2 , CO et de suie. Ce mémoire est structuré en trois chapitres. Le premier chapitre présente les généralités relatives aux moteurs Diesel, aux carburants alternatifs et à l'ammoniaque. Le deuxième chapitre décrit la méthodologie numérique, la géométrie du moteur ainsi que les modèles physiques utilisés dans les simulations. Enfin, le troisième chapitre est consacré à la validation du modèle et à l'analyse des résultats obtenus concernant la combustion et les émissions polluantes pour les différents taux de substitution énergétique étudiés.

Chapitre 1 — Revue bibliographique

Introduction

Ce premier chapitre est consacré à la présentation du cadre théorique et bibliographique de l'étude. Il vise à introduire les notions fondamentales relatives aux moteurs à gasoil stationnaires, aux carburants alternatifs et, plus particulièrement, à l'ammoniaque comme carburant de substitution.

Dans un premier temps, nous rappelons le principe de fonctionnement des moteurs à gasoil ainsi que les paramètres qui influencent la combustion. Nous présentons ensuite les principaux carburants alternatifs envisagés pour ce type de moteur, avant de nous focaliser sur les propriétés physicochimiques de l'ammoniaque et son intérêt dans les stratégies de décarbonation. Le chapitre examine par la suite les spécificités de la combustion Gasoil–Ammoniaque les modes d'injection, les stratégies de co-combustion ainsi que les principales difficultés liées à l'allumage et aux émissions polluantes.

Enfin, une dernière partie est dédiée à la simulation CFD des moteurs à combustion interne et à l'analyse des travaux antérieurs, afin de mettre en évidence les verrous scientifiques encore ouverts et de justifier l'intérêt de la présente étude.

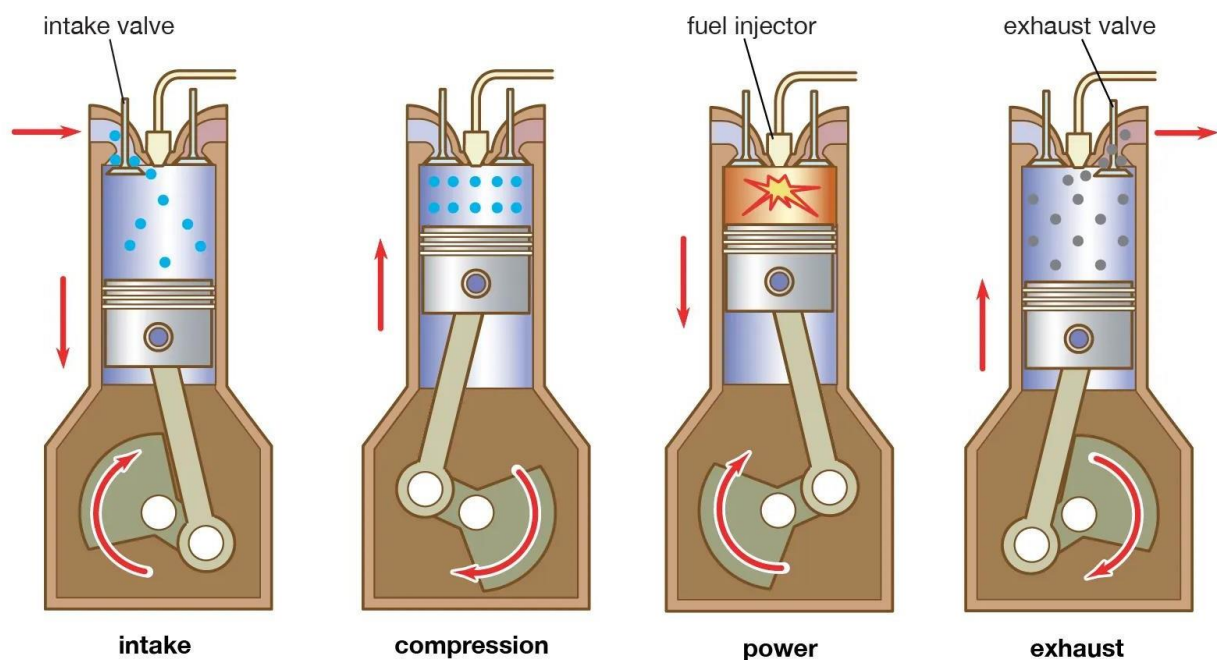
1.1 Moteurs à gasoil stationnaires

1.1.1 Principe de fonctionnement

Le moteur à gasoil est un moteur à combustion interne fonctionnant selon le principe de l'allumage par compression. Son fonctionnement repose sur l'admission d'air dans le cylindre, suivie d'une phase de compression qui provoque une augmentation importante de la pression et de la température de l'air. À proximité du point mort haut (PMH), le carburant est injecté dans l'air

fortement comprimé. Sous l'effet de la température élevée atteinte à la fin de la compression, le carburant s'enflamme spontanément sans nécessiter de système d'allumage externe. La combustion libère l'énergie chimique contenue dans le carburant, entraînant une augmentation de la pression à l'intérieur du cylindre et le déplacement du piston durant la phase de détente. Enfin, les gaz brûlés sont évacués lors de la phase d'échappement afin de préparer un nouveau cycle de fonctionnement. Ce mode de fonctionnement distingue les moteurs a gasoil des moteurs à allumage commandé, dans lesquels l'inflammation du mélange air-carburant est initiée par une étincelle produite par une bougie d'allumage [1].

Le moteur à gasoil à quatre temps fonctionne selon un cycle thermodynamique composé de quatre phases successives permettant la conversion de l'énergie chimique du carburant en énergie mécanique. Ce cycle est illustré à la Fig. 1.



© Encyclopædia Britannica, Inc.

Fig. 1 — Cycle de fonctionnement d'un moteur à gasoil à quatre temps [19].

Comme le montre la Fig. 1, le cycle Gasoil comprend les phases d'admission, de compression, de combustion-détente et d'échappement. Durant la compression, la température de l'air augmente

suffisamment pour provoquer l'auto-inflammation du carburant injecté à proximité du point mort haut.

1.1.2 Caractéristiques des moteurs stationnaires

Les moteurs à gasoil stationnaires sont conçus pour des applications fixes telles que la production d'électricité, l'alimentation de pompes, de compresseurs et de divers équipements industriels. Ils se distinguent par leur robustesse, leur fiabilité et leur capacité à fonctionner durant de longues périodes sous des conditions de charge constantes ou quasi constantes. Ces moteurs présentent généralement un rendement thermique élevé ainsi qu'une faible consommation spécifique de carburant par rapport à d'autres systèmes de conversion d'énergie. Leur conception privilégie la durabilité, la stabilité de fonctionnement et une disponibilité élevée en service. Grâce à ces caractéristiques, les moteurs a gasoil stationnaires sont largement utilisés dans les groupes électrogènes, les installations industrielles et les systèmes de production d'énergie de secours [1]. Les principaux composants constituant un moteur à gasoil stationnaire sont présentés à la Fig. 2.

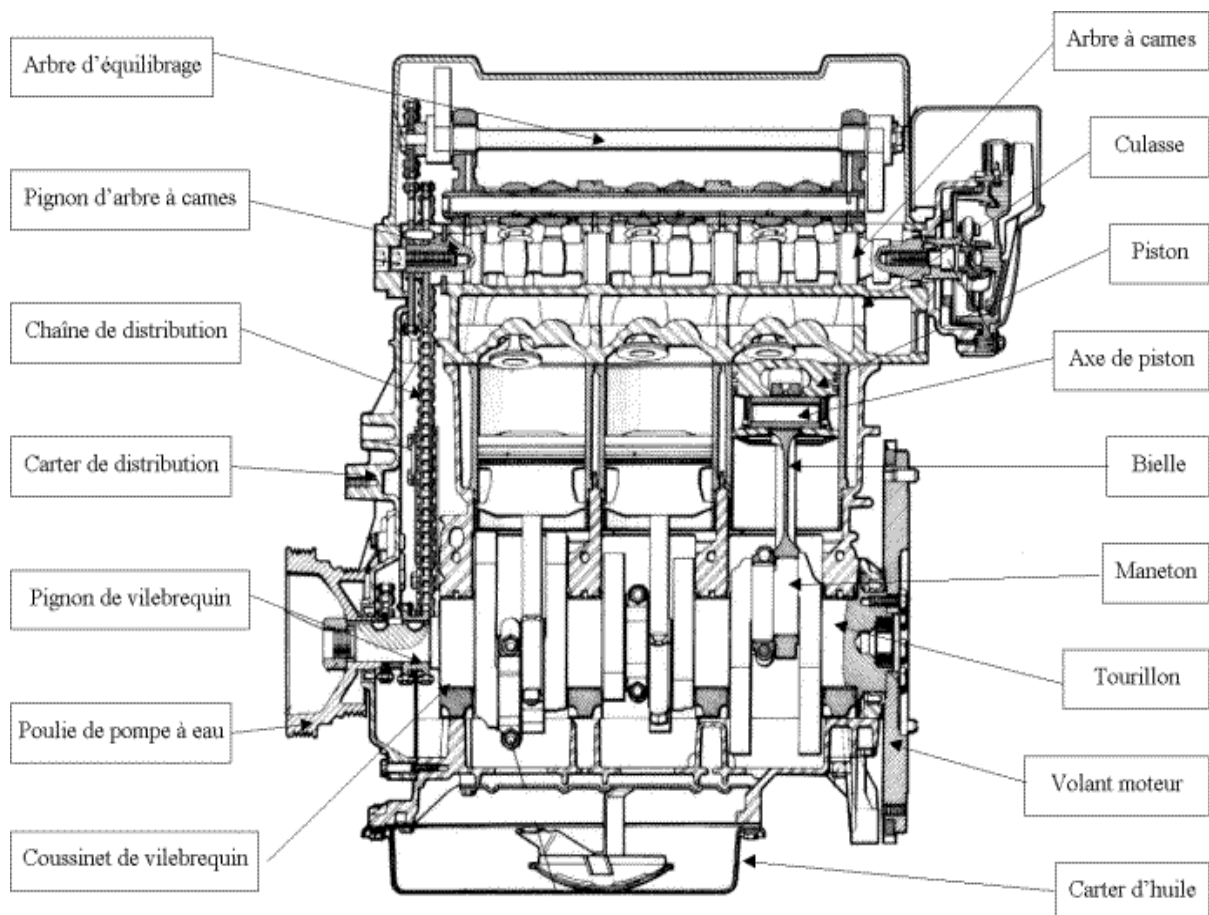


Fig. 2 — Schéma d'un moteur diesel stationnaire [1].

La Fig. 2 met en évidence les différents organes mécaniques du moteur, notamment le cylindre, le piston, la bielle, le vilebrequin et les soupapes. L'interaction de ces éléments assure la transformation du mouvement alternatif du piston en mouvement rotatif utilisable pour la production d'énergie mécanique.

1.2 Paramètres influençant la combustion

La combustion dans un moteur gasoil est influencée par plusieurs paramètres qui déterminent les performances du moteur, son rendement énergétique ainsi que le niveau des émissions polluantes. Parmi ces paramètres, le système d'injection joue un rôle fondamental, notamment à travers la pression d'injection, le calage de l'injection et les caractéristiques de pulvérisation du carburant. Ces facteurs conditionnent la qualité de l'atomisation du carburant et son mélange avec l'air dans la chambre de combustion.

Le délai d'auto-inflammation constitue également un paramètre important, car il influence le déroulement de la combustion et le taux de dégagement de chaleur. Ce délai dépend en grande partie des propriétés physicochimiques du carburant, en particulier de son indice de cétane, qui caractérise son aptitude à s'enflammer sous l'effet de la compression. Par ailleurs, les conditions thermodynamiques régnant dans le cylindre, telles que la température et la pression de l'air comprimé, ont une influence directe sur l'initiation et la propagation de la combustion.

D'autres paramètres, tels que le taux de compression, le rapport air-carburant, la géométrie de la chambre de combustion, la cylindrée du moteur et sa vitesse de rotation, affectent également le processus de combustion. Enfin, la qualité du mélange entre l'air et le carburant demeure un facteur déterminant pour assurer une combustion efficace, améliorer le rendement du moteur et réduire les émissions polluantes [1].

1.3 Carburants alternatifs pour moteurs gasoil

Face à l'épuisement progressif des ressources fossiles et au renforcement des réglementations environnementales visant à réduire les émissions de gaz à effet de serre, le développement de carburants alternatifs constitue une solution prometteuse pour le secteur des transports et de la

production d'énergie. Dans le domaine des moteurs gasoil, plusieurs carburants alternatifs ont été étudiés afin de réduire la dépendance aux combustibles pétroliers tout en limitant les émissions polluantes. Parmi les options les plus étudiées figurent le biodiesel, le gaz naturel, l'hydrogène et l'ammoniaque. Ces carburants présentent des propriétés physicochimiques différentes de celles du gasoil conventionnel, ce qui influence directement les performances du moteur, le rendement énergétique, les caractéristiques de combustion ainsi que les émissions de polluants. L'évaluation de ces carburants constitue aujourd'hui un axe majeur de recherche dans le cadre de la transition énergétique et de la décarbonation des systèmes de combustion interne [2][3].

1.3.1 Biogasoil

Le biogasoil est un carburant renouvelable produit à partir d'huiles végétales, de graisses animales ou d'huiles de cuisson usagées par un procédé de transestérification. Il est principalement constitué d'esters méthyliques d'acides gras (Fatty Acid Methyl Esters, FAME). Grâce à des propriétés physicochimiques relativement proches de celles du gazole conventionnel, le biogasoil peut être utilisé dans les moteurs Gasoil avec peu ou pas de modifications du système d'alimentation. En outre, il présente l'avantage d'être biodégradable, renouvelable et de contribuer à la réduction des émissions nettes de dioxyde de carbone (CO_2). Toutefois, son pouvoir calorifique inférieur est généralement plus faible que celui du gasoil conventionnel, ce qui peut entraîner une légère augmentation de la consommation spécifique de carburant [4][5].

1.3.2 Gaz naturel

Le gaz naturel est principalement composé de méthane (CH_4) et constitue l'un des carburants alternatifs les plus prometteurs pour les moteurs à combustion interne. Sa forte teneur en hydrogène et sa faible teneur en carbone permettent de réduire les émissions de dioxyde de carbone par unité d'énergie produite. De plus, sa combustion génère très peu de particules et pratiquement aucune émission d'oxydes de soufre. Dans les moteurs gasoil, le gaz naturel est fréquemment utilisé dans des systèmes à double carburant (dual-fuel), où une faible quantité de gasoil est injectée afin d'initier l'auto-inflammation du mélange gazeux. Cette technologie permet de conserver les avantages du moteur gasoil tout en réduisant les émissions polluantes et la consommation de carburants pétroliers [6][7].

1.3.3 Hydrogène

L'hydrogène est considéré comme l'un des carburants alternatifs les plus prometteurs pour les systèmes énergétiques du futur en raison de son potentiel à réduire les émissions de gaz à effet de serre. Lors de sa combustion, l'hydrogène ne produit pas directement de dioxyde de carbone, puisque sa molécule ne contient aucun atome de carbone. De plus, il présente une vitesse de flamme élevée ainsi qu'une large plage d'inflammabilité, ce qui favorise une combustion rapide et efficace. Ces caractéristiques permettent d'améliorer le rendement de combustion et d'étendre les limites de fonctionnement en mélange pauvre. Cependant, l'utilisation de l'hydrogène est confrontée à plusieurs défis techniques, notamment sa faible densité énergétique volumique, les contraintes liées à son stockage sous haute pression ou sous forme liquide, ainsi que les exigences de sécurité associées à sa manipulation. Malgré ces limitations, l'hydrogène est considéré comme un vecteur énergétique stratégique dans le cadre de la transition vers des systèmes de propulsion à faibles émissions de carbone [8][9].

1.3.4 Ammoniaque

L'ammoniaque (NH_3) est actuellement considérée comme l'un des carburants alternatifs les plus prometteurs pour la décarbonation des secteurs de l'énergie et du transport. Son principal avantage réside dans l'absence de carbone dans sa structure moléculaire, ce qui permet une combustion sans émissions directes de dioxyde de carbone. En outre, l'ammoniaque bénéficie d'une infrastructure mondiale déjà développée pour sa production, son stockage et son transport, en raison de son utilisation massive dans l'industrie des engrais.

L'ammoniaque présente également un intérêt particulier en tant que vecteur énergétique de l'hydrogène. En effet, il peut être décomposé en hydrogène et en azote, facilitant ainsi le stockage et le transport de l'hydrogène sous une forme plus stable et plus sûre. Cette caractéristique en fait un candidat potentiel pour les futurs systèmes énergétiques basés sur l'hydrogène.

Malgré ces avantages, l'utilisation de l'ammoniaque comme carburant présente plusieurs défis. Son pouvoir calorifique inférieur est relativement faible (environ 18,6 MJ/kg), ce qui nécessite des débits massiques plus importants pour fournir la même quantité d'énergie qu'un carburant conventionnel. De plus, sa température d'auto-inflammation élevée, sa faible vitesse de flamme et sa plage d'inflammabilité relativement étroite rendent son allumage et sa combustion plus difficiles dans les moteurs à combustion interne. Pour cette raison, l'ammoniaque est généralement utilisée

dans des systèmes de co-combustion avec un carburant pilote tel que le gasoil ou l'hydrogène afin d'assurer une combustion stable et efficace.

Par ailleurs, bien que la combustion de l'ammoniaque n'émette pas directement de CO₂, elle peut entraîner la formation d'oxydes d'azote (NO_x) ainsi que des émissions d'ammoniaque imbrûlé (NH₃ slip). Ces aspects constituent aujourd'hui des axes majeurs de recherche pour le développement de technologies de combustion propres utilisant l'ammoniaque comme carburant [3][10][11].

Plusieurs carburants alternatifs peuvent être utilisés pour réduire la dépendance aux combustibles fossiles et limiter les émissions polluantes. Une comparaison de leurs principales caractéristiques est présentée dans le Tab. 1.

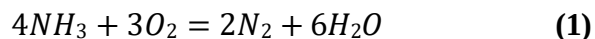
Tab. 1 — Comparaison des principaux carburants alternatifs pour moteurs Diesel.

Carburant	Avantages	Limites
Biodiesel	Renouvelable, biodégradable, réduction des émissions nettes de CO ₂	Pouvoir calorifique inférieur au diesel
Gaz naturel	Faibles émissions de CO ₂ et de particules	Nécessite souvent un fonctionnement dual-fuel
Hydrogène	Absence d'émissions directes de CO ₂	Difficultés de stockage et de sécurité
Ammoniaque	Absence de carbone, infrastructure existante	Allumage difficile, formation de NO _x

D'après le Tab. 1, chaque carburant présente des avantages et des limites spécifiques. L'ammoniaque se distingue par son absence de carbone, tandis que l'hydrogène possède une vitesse de combustion élevée. Le choix du carburant dépend donc des performances recherchées ainsi que des contraintes technologiques associées.

1.4 Propriétés physicochimiques de l'ammoniaque

L'ammoniaque (NH_3) est actuellement considérée comme l'un des carburants alternatifs les plus prometteurs pour réduire les émissions de carbone dans les secteurs de l'énergie et des transports. Son principal avantage réside dans l'absence de carbone dans sa structure moléculaire, ce qui permet une combustion sans émissions directes de dioxyde de carbone (CO_2). La réaction globale de combustion de l'ammoniaque peut être exprimée comme suit :



Cette caractéristique confère à l'ammoniaque un intérêt particulier dans les stratégies de décarbonation des moteurs à combustion interne et des systèmes énergétiques futurs [3,10].

Malgré ses avantages environnementaux, l'ammoniaque présente des propriétés énergétiques moins favorables que les carburants conventionnels. Son pouvoir calorifique inférieur (PCI) est d'environ 18,6 MJ/kg, soit nettement inférieur à celui du gasoil. Cette faible densité énergétique implique l'injection de quantités plus importantes de carburant pour fournir une même quantité d'énergie. Toutefois, l'ammoniaque bénéficie déjà d'une infrastructure mondiale de production, de stockage et de transport largement développée grâce à son utilisation massive dans l'industrie des engrais [3][10].

Du point de vue de la combustion, l'ammoniaque possède un indice d'octane élevé, supérieur à 130, lui conférant une excellente résistance au cliquetis. Il est également considéré comme un vecteur énergétique de l'hydrogène, car sa décomposition permet de produire de l'hydrogène et de l'azote. Cette propriété facilite le stockage et le transport de l'hydrogène dans de nombreuses applications énergétiques [3][10].

D'après le Tab. 1, chaque carburant présente des avantages et des limites spécifiques. L'ammoniaque se distingue par son absence de carbone, tandis que l'hydrogène possède une vitesse de combustion élevée. Le choix du carburant dépend donc des performances recherchées ainsi que des contraintes technologiques associées.

Tab. 2 — Propriétés physicochimiques de l'ammoniaque [3 et 15].

Propriété	Valeur
Formule chimique	NH ₃
Pouvoir calorifique inférieur (PCI)	18,6 MJ/kg
Température d'auto-inflammation	651 °C
Vitesse de flamme laminaire	≈ 12 cm/s
Indice d'octane	>130
Présence de carbone	Aucune

Le Tab. 2 montre que l'ammoniaque possède un pouvoir calorifique inférieur à celui du gasoil ainsi qu'une température d'auto-inflammation relativement élevée. Ces caractéristiques peuvent affecter la stabilité de la combustion et nécessitent souvent l'utilisation d'un carburant pilote pour initier l'inflammation.

Cependant, l'utilisation de l'ammoniaque comme carburant présente plusieurs défis techniques. Sa température d'auto-inflammation est relativement élevée, de l'ordre de 651 °C, contre environ 230 °C pour le gasoil. De plus, sa vitesse de flamme laminaire est faible, avoisinant 12 cm/s, ce qui ralentit la propagation de la combustion. Sa plage d'inflammabilité relativement étroite rend également son allumage plus difficile dans les moteurs à combustion interne conventionnels [10][11].

En raison de ces limitations, l'ammoniaque est généralement utilisée dans des systèmes à double carburant où un combustible pilote, tel que le gasoil ou l'hydrogène, est employé pour initier la combustion. Cette stratégie permet d'améliorer la stabilité de la combustion, d'augmenter l'efficacité énergétique et de favoriser l'utilisation de fortes proportions d'ammoniaque tout en maintenant des performances acceptables du moteur [11].

L'ammoniaque est aujourd'hui considérée comme l'un des carburants alternatifs les plus prometteurs pour la décarbonation du secteur énergétique. Son rôle comme vecteur énergétique est illustré à la Fig. 3.

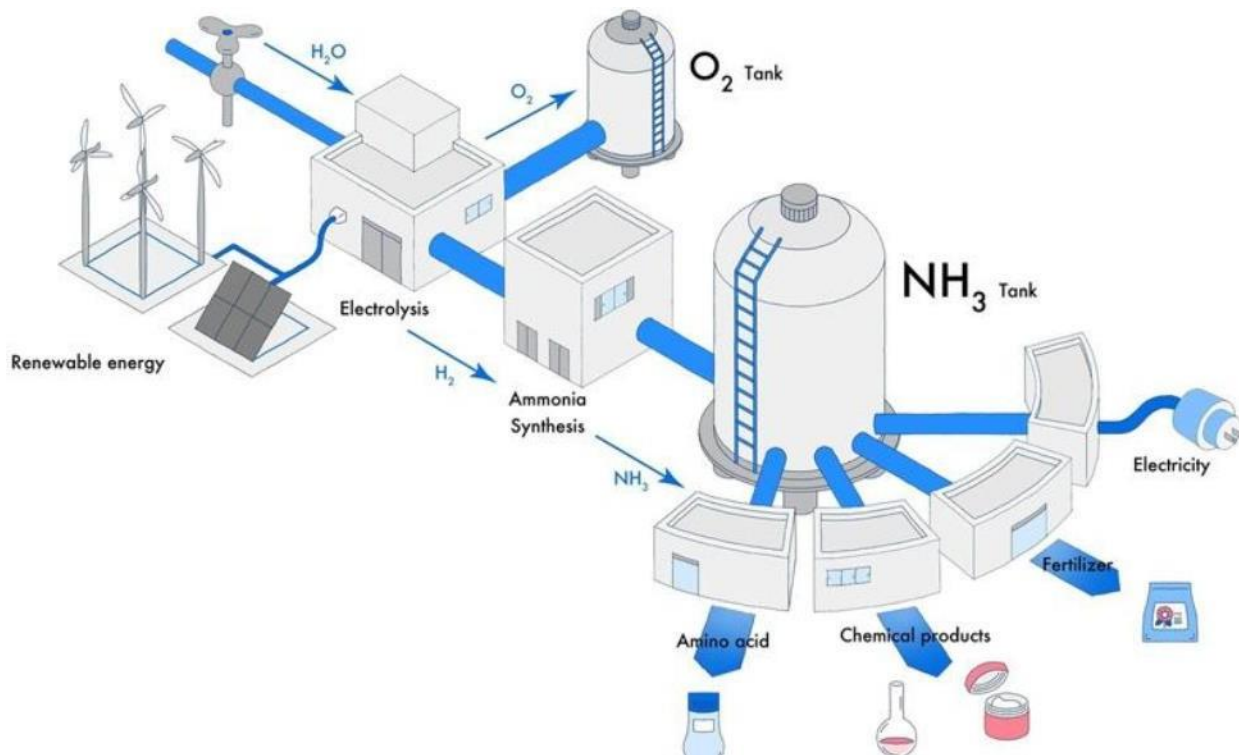


Fig. 3 — Ammoniaque comme vecteur énergétique et carburant alternatif [3].

Comme indiqué à la Fig. 3, l'ammoniaque peut être produit à partir de différentes sources d'énergie renouvelables puis stocké et transporté plus facilement que l'hydrogène. Son utilisation comme carburant permet théoriquement d'éliminer les émissions directes de CO_2 liées à la combustion.

1.5 Combustion Gasoil–Ammoniaque

La combustion de l'ammoniaque dans les moteurs à combustion interne présente plusieurs défis liés à ses propriétés physicochimiques. En particulier, sa température d'auto-inflammation élevée, sa faible vitesse de flamme et sa plage d'inflammabilité relativement étroite limitent son utilisation comme carburant unique dans les moteurs Gasoil conventionnels. Afin de surmonter ces contraintes, la stratégie la plus étudiée consiste à utiliser une configuration à double carburant (dual-fuel), associant l'ammoniaque à un carburant plus réactif tel que le gasoil [3][10].

Dans cette configuration, l'ammoniaque est généralement introduite dans le conduit d'admission ou directement dans le cylindre afin de former un mélange avec l'air. Une faible quantité de gasoil, appelée carburant pilote (pilot fuel), est ensuite injectée à haute pression à proximité du point mort

haut. Grâce à son indice de cétane élevé et à sa capacité d'auto-inflammation, le gasoil s'enflamme rapidement sous l'effet de la compression et génère les conditions nécessaires à l'allumage du mélange air-ammoniaque [11].

La combustion Gasoil–Ammoniaque permet d'augmenter significativement le taux de substitution du gasoil tout en maintenant un fonctionnement stable du moteur. Plusieurs études ont montré qu'il est possible de remplacer une part importante de l'énergie fournie par le gasoil par de l'ammoniaque, tout en conservant des performances acceptables en termes de pression dans le cylindre, de rendement thermique et de stabilité de combustion [11][12].

Cependant, l'introduction d'ammoniaque modifie les caractéristiques de combustion. L'allongement du délai d'allumage et la réduction de la vitesse de propagation de la flamme peuvent entraîner une combustion plus lente et une diminution de la température maximale dans la chambre de combustion. Ces phénomènes influencent directement la pression maximale, le taux de dégagement de chaleur (HRR) et les performances globales du moteur [10][12].

Du point de vue environnemental, l'utilisation de l'ammoniaque permet de réduire fortement les émissions de dioxyde de carbone grâce à l'absence de carbone dans sa structure moléculaire. Toutefois, cette technologie peut favoriser la formation d'oxydes d'azote (NOx) ainsi que la présence d'ammoniaque imbrûlé dans les gaz d'échappement. Ces émissions constituent actuellement l'un des principaux défis pour le développement des moteurs Gasoil–Ammoniaque à faibles impacts environnementaux [3][10].

Ainsi, la combustion Gasoil–Ammoniaque représente une solution prometteuse pour la décarbonation des moteurs à combustion interne, mais nécessite encore des travaux d'optimisation concernant les stratégies d'injection, les conditions de fonctionnement et les techniques de post-traitement des émissions [3][10][11][12].

1.5.1 Modes d'injection

L'utilisation de l'ammoniaque dans les moteurs à gasoil nécessite l'adoption de stratégies d'injection spécifiques afin de compenser sa faible réactivité chimique et sa température d'auto-inflammation élevée. Contrairement au Gasoil l'ammoniaque ne peut généralement pas s'auto-enflammer dans les conditions normales de fonctionnement d'un moteur Gasoil à allumage par compression. Pour cette raison, les systèmes Gasoil–Ammoniaque fonctionnent le plus souvent

selon une configuration à double carburant (*dual-fuel*), dans laquelle un carburant pilote est utilisé pour initier la combustion [3][10].

La stratégie la plus courante consiste à injecter l'ammoniaque dans le conduit d'admission afin de former un mélange homogène avec l'air avant l'entrée dans le cylindre. Une faible quantité de gasoil est ensuite injectée directement dans la chambre de combustion à haute pression à proximité du point mort haut. Grâce à son indice de cétane élevé, le Gasoil s'auto-enflamme rapidement sous l'effet de la compression et fournit l'énergie nécessaire à l'allumage du mélange air-ammoniaque [11].

La Fig. 4 présente le dispositif expérimental d'un moteur Gasoil–Ammoniaque fonctionnant en mode double carburant (*dual-fuel*). L'ammoniaque est injectée à l'aide d'un système d'injection dédié (*ammonia common rail*), tandis qu'une faible quantité de gasoil est injectée comme carburant pilote afin de déclencher l'auto-inflammation et d'initier la combustion du mélange air–ammoniaque [20].

Afin d'améliorer la réactivité du mélange et d'assurer une combustion stable, l'ammoniaque peut être utilisé en association avec un carburant pilote. La configuration du moteur fonctionnant en mode Gasoil–Ammoniaque est représentée à la Fig. 4.

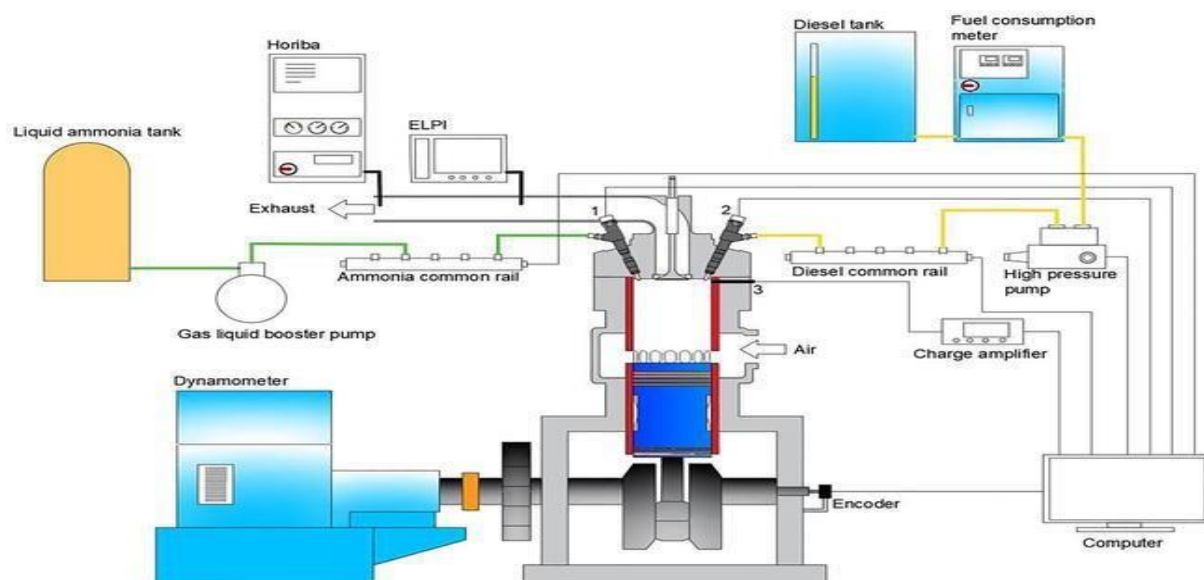


Fig. 4 — Configuration d'un moteur Gasoil–Ammoniaque en mode dual-fuel

La Fig. 4 montre que le gasoil est injecté comme carburant pilote afin d'amorcer l'auto-inflammation du mélange dans la chambre de combustion. L'ammoniaque fournit quant à lui une partie importante de l'énergie libérée, ce qui permet de réduire la consommation de carburant fossile.

D'autres stratégies ont également été étudiées, notamment l'injection directe d'ammoniaque dans le cylindre. Cette technique permet un meilleur contrôle de la quantité de carburant introduite et réduit les risques de déplacement de l'air admis, ce qui peut améliorer le rendement volumétrique du moteur. L'injection directe offre également la possibilité d'optimiser la stratification du mélange et de limiter certaines pertes liées à la combustion incomplète. Toutefois, elle nécessite des systèmes d'injection adaptés aux propriétés physicochimiques de l'ammoniaque, notamment sa pression de vapeur élevée et son caractère corrosif pour certains matériaux [3][10].

Une autre approche consiste à combiner plusieurs injections de gasoil pilote avec une injection d'ammoniaque afin d'améliorer la stabilité de la combustion. Les stratégies d'injection multiple permettent de contrôler plus précisément le délai d'allumage, le taux de dégagement de chaleur et la pression maximale dans le cylindre. Elles contribuent également à réduire les émissions polluantes et à améliorer le rendement thermique du moteur [10].

Le choix du mode d'injection influence fortement les performances du moteur et les émissions produites. Une injection d'ammoniaque dans l'admission favorise généralement une meilleure homogénéité du mélange, tandis que l'injection directe permet un contrôle plus précis de la combustion. Dans les deux cas, la quantité et le moment d'injection du gasoil pilote jouent un rôle essentiel dans l'initiation de la combustion et dans la stabilité du fonctionnement du moteur [11].

Ainsi, l'optimisation des stratégies d'injection constitue un enjeu majeur pour le développement des moteurs Gasoil–Ammoniaque. Les recherches actuelles visent à maximiser le taux de substitution du gasoil par l'ammoniaque tout en maintenant des performances élevées et en limitant les émissions de NOx ainsi que les rejets d'ammoniaque imbrûlé [3][10][11].

1.5.2 Stratégies de co-combustion

En raison de ses propriétés de combustion défavorables, notamment sa faible vitesse de flamme, sa température d'auto-inflammation élevée et sa faible réactivité chimique, l'ammoniaque est rarement utilisé comme carburant unique dans les moteurs à combustion interne. Afin d'améliorer

son allumage et d'assurer une combustion stable, différentes stratégies de co-combustion ont été développées. Ces approches consistent à associer l'ammoniaque à un carburant plus réactif capable de favoriser l'initiation et la propagation de la combustion [3][10].

La stratégie la plus étudiée est la co-combustion Gasoil–Ammoniaque. Dans cette configuration, une faible quantité de gasoil est injectée comme carburant pilote afin de déclencher l'auto-inflammation sous l'effet de la compression. L'énergie libérée par la combustion du gasoil permet ensuite l'allumage du mélange air-ammoniaque présent dans la chambre de combustion. Cette technique offre l'avantage de conserver l'architecture générale des moteurs à gasoil tout en réduisant significativement la consommation de carburants fossiles et les émissions de dioxyde de carbone [11].

Une autre stratégie consiste à associer l'ammoniaque à l'hydrogène. Grâce à sa très grande réactivité, sa vitesse de flamme élevée et sa large plage d'inflammabilité, l'hydrogène améliore considérablement les caractéristiques de combustion de l'ammoniaque. L'ajout d'hydrogène permet de réduire le délai d'allumage, d'accélérer la propagation de la flamme et d'augmenter la stabilité de combustion, en particulier dans les conditions de fonctionnement à faible charge. Cette approche est considérée comme particulièrement prometteuse pour les futurs systèmes énergétiques à faibles émissions de carbone [3][10].

Le diméthyléther (DME) constitue également une solution intéressante comme carburant promoteur de combustion. En raison de son indice de cétane élevé et de son excellente aptitude à l'auto-inflammation, le DME facilite le déclenchement de la combustion de l'ammoniaque et contribue à améliorer le rendement global du moteur. Plusieurs études ont montré que l'utilisation du DME permet de réduire les difficultés d'allumage associées à l'ammoniaque tout en maintenant des performances satisfaisantes [10].

D'autres carburants promoteurs, tels que le biogasoil ou certains carburants oxygénés, ont également été étudiés afin d'améliorer les caractéristiques de combustion de l'ammoniaque. Le choix de la stratégie de co-combustion dépend principalement des objectifs recherchés en termes de rendement énergétique, de stabilité de combustion, de réduction des émissions polluantes et de faisabilité technique [3][10].

Ainsi, les stratégies de co-combustion représentent aujourd'hui une solution essentielle pour permettre l'utilisation de fortes proportions d'ammoniaque dans les moteurs à combustion interne. Elles constituent un axe majeur de recherche visant à développer des systèmes de propulsion plus durables tout en conservant des performances comparables à celles des moteurs conventionnels [3][10][11].

1.5.3 Difficultés de combustion

Malgré ses avantages environnementaux, l'utilisation de l'ammoniaque comme carburant dans les moteurs à combustion interne est confrontée à plusieurs difficultés liées à ses propriétés physicochimiques. Ces limitations influencent directement l'allumage, la stabilité de combustion, le rendement thermique et les émissions polluantes du moteur [3][10].

La principale difficulté est associée à la température d'auto-inflammation élevée de l'ammoniaque, qui est d'environ 651 °C. Cette valeur est nettement supérieure à celle du gasoil conventionnel, ce qui rend l'initiation de la combustion plus difficile dans les moteurs à allumage par compression. En conséquence, l'utilisation d'un carburant pilote tel que le gasoil ou l'hydrogène est généralement nécessaire afin de fournir l'énergie requise pour déclencher la combustion du mélange air-ammoniaque [10][11].

Une autre limitation importante concerne la faible vitesse de flamme laminaire de l'ammoniaque, qui est de l'ordre de 12 cm/s dans les conditions atmosphériques. Cette faible vitesse ralentit la propagation de la combustion à l'intérieur de la chambre de combustion et peut entraîner une augmentation de la durée de combustion. Par conséquent, le rendement thermique du moteur peut être affecté et une partie du carburant risque de ne pas être totalement consommée avant l'ouverture de la soupape d'échappement [3][10].

L'ammoniaque présente également une plage d'inflammabilité relativement étroite comparativement à d'autres carburants gazeux. Cette caractéristique réduit la flexibilité des conditions de fonctionnement et complique l'allumage dans certaines situations, notamment à faible charge ou lorsque la proportion d'ammoniaque dans le mélange est élevée. Ces phénomènes peuvent provoquer un allongement du délai d'allumage ainsi qu'une instabilité de combustion [10].

Par ailleurs, la forte chaleur latente de vaporisation de l'ammoniaque entraîne un refroidissement du mélange air-carburant lors de son évaporation. Cette diminution de température peut ralentir davantage les réactions chimiques initiales et rendre le démarrage de la combustion plus difficile. Cet effet est particulièrement important dans les moteurs fonctionnant avec des taux élevés de substitution du gasoil par l'ammoniaque [3].

Lorsque la fraction énergétique d'ammoniaque devient importante, ces limitations peuvent conduire à une combustion incomplète. Il peut alors apparaître des émissions d'ammoniaque imbrûlé (NH_3 slip), une diminution du rendement de combustion ainsi qu'une dégradation des performances globales du moteur. Ces difficultés constituent aujourd'hui l'un des principaux obstacles au déploiement à grande échelle des moteurs alimentés par l'ammoniaque [3][10][11].

Ainsi, l'amélioration des caractéristiques de combustion de l'ammoniaque demeure un domaine de recherche actif. Les travaux actuels portent notamment sur l'optimisation des stratégies d'injection, l'utilisation de carburants promoteurs de combustion et l'adaptation des paramètres de fonctionnement du moteur afin de garantir une combustion stable et efficace [3][10]

1.5.4 Formation des émissions

L'un des principaux avantages de l'ammoniaque comme carburant réside dans l'absence de carbone dans sa structure moléculaire. Par conséquent, sa combustion ne génère pas directement de dioxyde de carbone (CO_2), contrairement aux carburants fossiles conventionnels. De plus, l'absence de carbone réduit fortement la formation de particules de suie (soot), qui sont généralement produites lors de la combustion incomplète des hydrocarbures [3][10].

Cependant, l'utilisation de l'ammoniaque dans les moteurs à combustion interne s'accompagne de défis importants liés à la formation de polluants azotés. Les émissions d'oxydes d'azote (NO_x) constituent la principale préoccupation environnementale. Ces composés sont formés à la fois par l'oxydation de l'azote contenu dans l'ammoniaque (fuel- NO_x) et par les mécanismes thermiques favorisés par les températures élevées atteintes dans la chambre de combustion. Les émissions de NO_x peuvent augmenter lorsque les conditions de combustion favorisent une conversion importante de l'azote en monoxyde d'azote (NO) et en dioxyde d'azote (NO_2) [10][13].

Un autre phénomène caractéristique des moteurs alimentés à l'ammoniaque est l'émission d'ammoniaque imbrûlé, généralement appelée *ammonia slip*. Ce phénomène apparaît lorsque la combustion est incomplète ou lorsque le temps disponible pour l'oxydation complète de l'ammoniaque est insuffisant. La présence d'ammoniaque imbrûlé dans les gaz d'échappement représente un problème environnemental et sanitaire qui nécessite l'utilisation de systèmes de post-traitement adaptés [3][10].

Par ailleurs, certaines conditions de fonctionnement peuvent favoriser la formation de protoxyde d'azote (N_2O). Ce composé est particulièrement préoccupant en raison de son potentiel de réchauffement global, largement supérieur à celui du dioxyde de carbone. La formation du N_2O dépend fortement de la température de combustion, de la richesse du mélange et des mécanismes réactionnels impliqués dans l'oxydation de l'ammoniaque [10][13].

Bien que les émissions de particules et de CO_2 soient fortement réduites avec l'utilisation de l'ammoniaque, l'optimisation des paramètres de fonctionnement demeure essentielle afin de limiter simultanément les émissions de NO_x , de N_2O et d'ammoniaque imbrûlé. Les stratégies les plus étudiées reposent sur l'optimisation de l'avance à l'injection, du taux de substitution de l'ammoniaque, de la température d'admission ainsi que sur l'utilisation de systèmes de post-traitement des gaz d'échappement [3][10][11][13].

Ainsi, la maîtrise des émissions constitue l'un des principaux défis technologiques pour le développement des moteurs Gasoil–Ammoniaque. Les recherches actuelles visent à exploiter les avantages environnementaux de l'ammoniaque tout en minimisant les polluants azotés associés à sa combustion [3][10].

1.6 Simulation CFD des moteurs à combustion interne

1.6.1 Introduction à la CFD

La dynamique des fluides numérique (Computational Fluid Dynamics, CFD) est une branche de la mécanique des fluides qui utilise des méthodes numériques et des algorithmes informatiques pour résoudre les équations gouvernant l'écoulement des fluides, les transferts thermiques et les phénomènes de transport. Cette approche permet de prédire le comportement des fluides dans des systèmes complexes où les mesures expérimentales sont souvent difficiles à réaliser [14].

Dans le domaine des moteurs à combustion interne, la CFD est devenue un outil indispensable pour l'étude des phénomènes physiques et chimiques se déroulant à l'intérieur de la chambre de combustion. Elle permet d'analyser les écoulements d'air, les processus d'injection du carburant, l'atomisation des gouttelettes, l'évaporation, le mélange air-carburant, la combustion ainsi que la formation des émissions polluantes. Grâce à la résolution spatiale et temporelle des équations de conservation, la CFD fournit des informations détaillées sur les distributions locales de pression, de température, de vitesse et de concentration des espèces chimiques [14][15].

L'un des principaux avantages de la simulation CFD réside dans sa capacité à accéder à des paramètres difficilement mesurables expérimentalement. Elle permet notamment de visualiser l'évolution des jets de carburant, les phénomènes d'auto-inflammation, la propagation de la flamme et les mécanismes de formation des polluants à l'intérieur du cylindre. Ces informations sont essentielles pour comprendre les processus de combustion et optimiser les performances des moteurs [15].

Par ailleurs, la CFD constitue un complément précieux aux essais expérimentaux. Elle permet de réduire le nombre d'essais nécessaires, de diminuer les coûts de développement et d'explorer rapidement un grand nombre de configurations de fonctionnement. Cette approche est particulièrement intéressante dans le cadre de l'étude des carburants alternatifs tels que l'ammoniaque, où de nombreux paramètres doivent être évalués avant la mise en œuvre expérimentale [15].

Grâce aux progrès des capacités de calcul et au développement de logiciels spécialisés tels que CONVERGE CFD, ANSYS Fluent ou OpenFOAM, la simulation numérique est devenue un outil incontournable pour la conception, l'analyse et l'optimisation des moteurs à combustion interne modernes [14].

La précision des simulations CFD dépend fortement de la qualité du maillage utilisé pour discrétiser le domaine de calcul. Un exemple de maillage adaptatif est présenté à la Fig. 5.

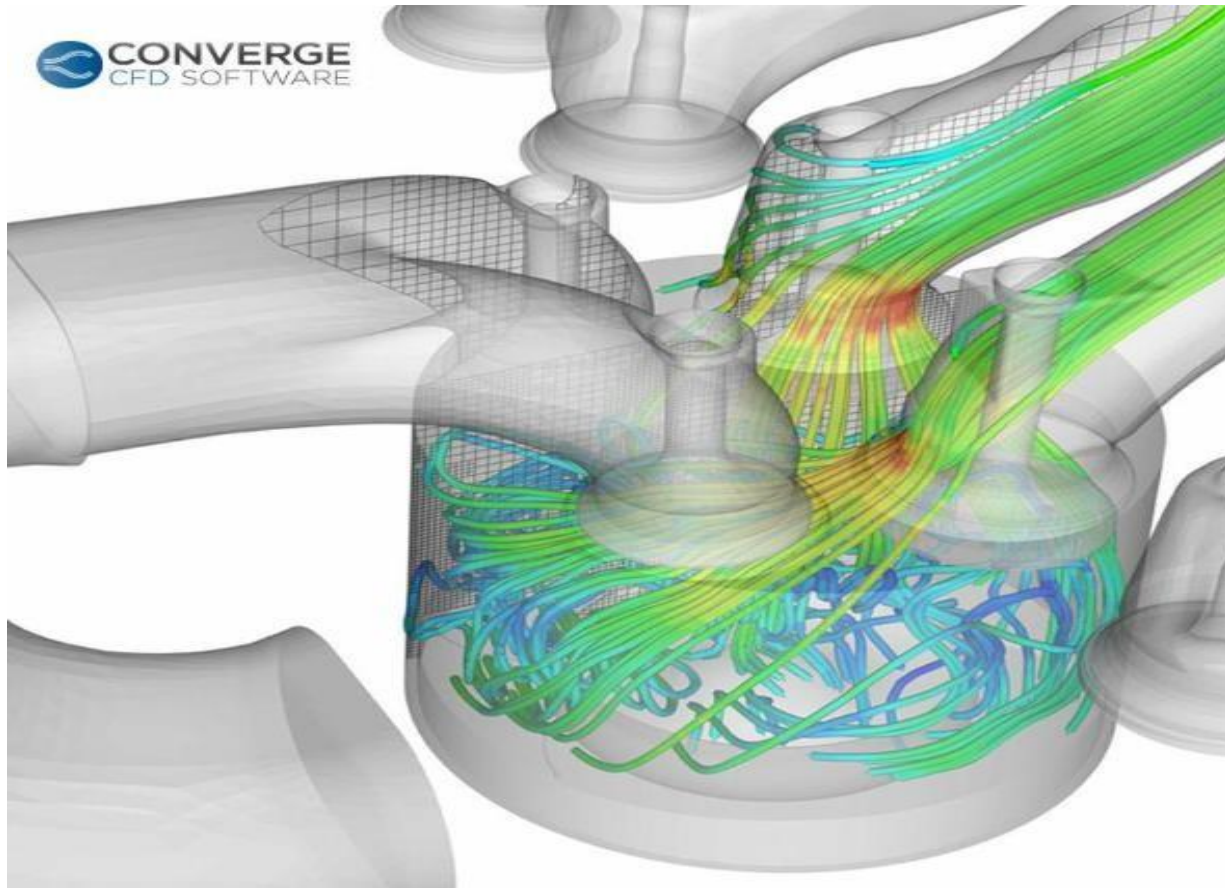


Fig. 5 — Exemple de maillage adaptatif utilisé dans la simulation CFD d'un moteur à combustion interne [17].

Comme illustré à la Fig. 5, le raffinement adaptatif permet d'augmenter la résolution numérique dans les zones où les gradients de pression, de température ou de concentration sont importants. Cette approche améliore la précision des résultats tout en limitant le coût de calcul.

1.6.2 Équations gouvernantes

La simulation CFD repose sur la résolution numérique des équations fondamentales de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces chimiques. Ces équations permettent de décrire les phénomènes physiques se produisant dans la chambre de combustion des moteurs à combustion interne [14].

Conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \vec{u}) = 0 \quad (2)$$

où:

- ρ est la masse volumique du fluide (kg/m³);
- T est le temps (s) ;
- U est le vecteur vitesse du fluide (m/s) ;
- $\nabla \cdot$ représente l'opérateur divergence.

Cette équation traduit le principe de conservation de la masse dans le domaine de calcul. Elle indique que la masse ne peut être ni créée ni détruite au cours de l'écoulement du fluide [14].

Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u u) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho g \quad (3)$$

où :

p : pression

τ : tenseur des contraintes visqueuses

g : accélération gravitationnelle

Cette équation décrit la conservation de la quantité de mouvement et permet de prédire l'évolution des écoulements à l'intérieur de la chambre de combustion [14].

Conservation de l'énergie

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot [(\rho E + p)U] = \nabla \cdot (k \nabla T) + S_h \quad (4)$$

où:

- E est l'énergie totale spécifique (J/kg) ;

- ρ est la masse volumique (kg/m³);
- P est la pression (Pa) ;
- U est le vecteur vitesse (m/s) ;
- K est la conductivité thermique (W/m. K) ;
- T est la température (K) ;
- Sh représente les termes sources liés à la combustion et aux transferts thermiques.

Cette équation décrit la conservation de l'énergie dans le fluide. Elle permet de calculer les variations de température et les échanges thermiques associés aux phénomènes de compression, d'injection et de combustion dans le moteur [14][17].

Équation de transport des espèces chimiques

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U Y_i) = \nabla \cdot (D_i \nabla Y_i) + \dot{\omega}_i \quad (5)$$

où:

- Y_i est la fraction massique de l'espèce chimique i ;
- D_i est le coefficient de diffusion de l'espèce i (m²/s) ;
- $\dot{\omega}_i$ est le taux de production ou de consommation chimique de l'espèce i ;
- ρ est la masse volumique (kg/m³);
- U est le vecteur vitesse (m/s).

Cette équation permet de suivre l'évolution des différentes espèces chimiques présentes dans la chambre de combustion, telles que NH₃, O₂, N₂, CO₂, NO_x et H₂O. Elle est essentielle pour l'étude de la combustion et de la formation des émissions polluantes [17].

1.6.3 Modèles de turbulence

Dans les moteurs à combustion interne, les écoulements sont fortement turbulents en raison des mouvements complexes générés lors de l'admission, de la compression et de l'injection du

carburant. La turbulence influence directement le mélange air-carburant, le transfert de chaleur, la vitesse de combustion ainsi que la formation des émissions polluantes [16].

Afin de représenter ces phénomènes, les simulations CFD utilisent des modèles de turbulence. Parmi les modèles les plus employés figure le modèle **RNG k-ε**, largement utilisé dans les simulations des moteurs Diesel. Ce modèle repose sur la résolution de deux équations de transport correspondant à l'énergie cinétique turbulente (k) et à son taux de dissipation (ε).

Équation de transport de l'énergie cinétique turbulente (k)

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} k) = \nabla \cdot (\alpha_k \mu_{eff} \nabla k) + G_k - \rho \quad (6)$$

où:

- **K** : énergie cinétique turbulente (m²/s²) ;
- **ρ**: masse volumique (kg/m³);
- **U** : vecteur vitesse (m/s) ;
- **Gk**: production de turbulence;
- **ε**: taux de dissipation turbulente;
- **μeff**: viscosité effective.

Équation de transport de la dissipation turbulente (ε)

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \varepsilon) = \nabla \cdot (\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \nabla \varepsilon) + C_{1\varepsilon} k_\varepsilon Gk - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (7)$$

où:

- **ε**: taux de dissipation turbulente;
- **C_{1ε}** et **C_{2ε}** : constantes empiriques du modèle ;
- **Gk** : terme de production de turbulence.

Le modèle RNG k-ε permet de reproduire correctement les phénomènes de mélange dans les moteurs à combustion interne tout en conservant un coût de calcul raisonnable. Pour cette raison,

il est fréquemment utilisé dans les simulations CFD sous CONVERGE [16][17].

1.6.4 Modèles de combustion

La modélisation de la combustion vise à reproduire les réactions chimiques se produisant entre le carburant et l'oxydant dans la chambre de combustion. Dans les simulations CFD des moteurs Gasoil–Ammoniaque, le modèle **SAGE Detailed Chemistry Solver** est largement utilisé en raison de sa capacité à résoudre les mécanismes cinétiques détaillés [17].

Le modèle SAGE repose sur la résolution des équations de transport des espèces chimiques ainsi que sur les lois de cinétique chimique décrivant les réactions élémentaires.

La vitesse d'une réaction chimique peut être représentée par la loi d'Arrhenius :

$$k = AT^{\beta} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (8)$$

où:

- **K** : constante de vitesse de réaction ;
- **A**: facteur préexponentiel;
- **β**: exposant de température;
- **Ea** : énergie d'activation (J/mol) ;
- **R** : constante universelle des gaz parfaits ;
- **T**: température (K).

Cette relation permet de calculer les vitesses des réactions chimiques impliquées dans la combustion du gasoil et de l'ammoniaque. Le modèle SAGE permet ainsi de prédire:

- le délai d'allumage;
- La pression dans le cylindre ;
- Le taux de dégagement de chaleur (HRR) ;
- la température;
- l'évolution des espèces chimiques.

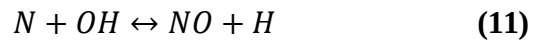
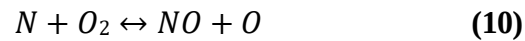
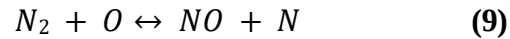
Cette approche est particulièrement adaptée à l'étude de la combustion de l'ammoniaque , dont le comportement dépend fortement de la cinétique chimique [3][10][17].

1.6.5 Modèles d'émissions

La prédiction des émissions polluantes constitue un aspect essentiel des simulations CFD. Les principaux polluants étudiés dans les moteurs Gasoil–Ammoniaque sont les oxydes d'azote (NOx), les particules de suie, le monoxyde de carbone (CO), les hydrocarbures imbrûlés (HC) et l'ammoniaque non brûlé (NH₃ slip) [17].

Pour la formation des NOx, les simulations utilisent généralement le mécanisme thermique de Zeldovich.

Réactions de Zeldovich



Ces réactions décrivent la formation des oxydes d'azote à haute température dans la chambre de combustion [18].

Pour les émissions de suie, les modèles prennent en compte :

- la nucléation;
- la croissance des particules;
- l'agglomération;
- l'oxydation.

Cependant, dans le cas de l'ammoniaque , la formation de suie est fortement réduite en raison de l'absence de carbone dans le carburant [3][10].

Les modèles CFD permet également de prédire :

- les émissions de CO;
- les hydrocarbures imbrûlés (HC);

- l'ammoniaque résiduel (NH_3 slip);
- Le protoxyde d'azote (N_2O).

Ces prédictions sont essentielles pour optimiser les stratégies d'injection et réduire l'impact environnemental des moteurs Gasoil–Ammoniaque [10][13][17].

1.7 Travaux antérieurs

1.7.1 Synthèse critique des études récentes

Au cours des dernières années, l'ammoniaque a suscité un intérêt croissant en tant que carburant alternatif pour les moteurs à combustion interne en raison de son absence de carbone et de son potentiel de réduction des émissions de CO_2 . Plusieurs travaux ont étudié son utilisation dans des moteurs à allumage commandé, des turbines à gaz ainsi que des moteurs a gasoil fonctionnant en mode dual-fuel [3][10].

Reiter et Kong [11] ont étudié expérimentalement un moteur à gasoil alimenté par un mélange Gasoil–Ammoniaque. Leurs résultats ont montré qu'il est possible de remplacer une part importante du gasoil par de l'ammoniaque tout en maintenant un fonctionnement stable du moteur. Cependant, l'augmentation de la fraction d'ammoniaque a entraîné un allongement du délai d'allumage ainsi qu'une diminution de l'efficacité de combustion.

Kobayashi et al. [10] ont réalisé une revue approfondie des technologies de combustion de l'ammoniaque. Les auteurs ont souligné que la faible vitesse de flamme, la température élevée d'auto-inflammation et la formation potentielle de NO_x constituent les principaux défis associés à l'utilisation de l'ammoniaque comme carburant.

Valera-Medina et al. [3] ont montré que l'ammoniaque peut jouer un rôle important dans la transition énergétique grâce à son potentiel de stockage et de transport de l'énergie renouvelable. Toutefois, les auteurs ont indiqué que des améliorations sont nécessaires pour optimiser la stabilité de combustion et limiter les émissions polluantes.

Plus récemment, Bonaiti [15] a utilisé la simulation CFD pour étudier la combustion de l'ammoniaque dans les moteurs à combustion interne. Ses résultats ont montré que les outils numériques permettent d'analyser en détail les phénomènes d'injection, de mélange, de

combustion et de formation des émissions. L'étude a également confirmé l'intérêt de l'approche CFD pour l'optimisation des stratégies d'injection et des paramètres de fonctionnement.

Dans l'ensemble, les travaux publiés démontrent que la combustion Gasoil–Ammoniaque représente une solution prometteuse pour réduire les émissions de carbone tout en conservant les avantages des moteurs Diesel. Néanmoins, plusieurs difficultés liées à l'allumage, à la stabilité de combustion et à la formation des NOx demeurent encore présentes [3][10][11].

Plusieurs études ont été consacrées à l'utilisation de l'ammoniaque dans les moteurs à combustion interne. Une synthèse des principaux travaux recensés dans la littérature est présentée dans le Tab. 3.

Tab. 3 — Synthèse des travaux antérieurs.

Référence	Type d'étude	Résultat principal
Reiter & Kong [11]	Expérimentale	Remplacement partiel du gasoil par l'ammoniaque possible
Kobayashi et al. [10]	Revue bibliographique	Défis liés à l'auto-inflammation et aux NOx
Valera-Medina et al. [3]	Revue bibliographique	Potentiel élevé de l'ammoniaque pour la transition énergétique
Bonaiti [15]	CFD	Utilité de la CFD pour l'étude de la combustion NH ₃

Le Tab. 3 montre que l'utilisation de l'ammoniaque dans les moteurs a gasoil suscite un intérêt croissant en raison de son potentiel de réduction des émissions de carbone. Toutefois, plusieurs défis subsistent, notamment la faible vitesse de combustion de l'ammoniaque et la maîtrise des émissions de NOx.

1.7.2 Lacunes scientifiques identifiées

Malgré les progrès réalisés dans le domaine de la combustion Gasoil–Ammoniaque, plusieurs lacunes scientifiques subsistent. Premièrement, les mécanismes détaillés de combustion de

l'ammoniaque dans les moteurs a gasoil ne sont pas encore totalement compris, notamment en ce qui concerne les interactions entre la cinétique chimique de l'ammoniaque et les phénomènes turbulents présents dans la chambre de combustion [10].

Deuxièmement, les effets du taux de substitution énergétique de l'ammoniaque sur les performances du moteur et sur les émissions polluantes restent insuffisamment documentés pour certaines conditions de fonctionnement. Les résultats publiés dans la littérature montrent parfois des divergences selon les configurations expérimentales utilisées [3][11].

Troisièmement, les émissions spécifiques liées à l'ammoniaque, telles que les NO_x, le protoxyde d'azote (N₂O) et l'ammoniaque imbrûlé (NH₃ slip), nécessitent encore des investigations approfondies afin de développer des stratégies efficaces de réduction des polluants [10][13].

Enfin, le nombre d'études CFD portant sur les moteurs a gasoil stationnaires alimentés par des mélanges Gasoil–Ammoniaque demeure relativement limité. Il est donc nécessaire de développer davantage de modèles numériques capables de prédire avec précision les performances de combustion et les émissions dans différentes conditions de fonctionnement. Cette problématique constitue la principale motivation du présent travail de recherche [15].

1.8 Conclusion

Les bases théoriques nécessaires à la compréhension de la combustion gasoil–ammoniaque dans les moteurs diesel stationnaires ont été développées dans ce chapitre. Après avoir rappelé le principe de fonctionnement des moteurs a gasoil et les principaux paramètres influençant la combustion, une revue des carburants alternatifs a été réalisée avec un intérêt particulier porté à l'ammoniaque. Les propriétés physicochimiques de l'ammoniaque, ses avantages ainsi que ses limitations ont été analysés. Les différentes stratégies de co-combustion Gasoil–Ammoniaque et les problématiques liées à la formation des émissions polluantes ont également été présentées.

Par ailleurs, les fondements de la simulation CFD appliquée aux moteurs à combustion interne ont été exposés à travers les équations gouvernantes ainsi que les principaux modèles de turbulence, de combustion et d'émissions. Enfin, une synthèse des travaux récents a permis d'identifier les principales lacunes scientifiques justifiant la réalisation de cette étude.

Le chapitre suivant sera consacré à la description du moteur étudié, à la méthodologie numérique adoptée ainsi qu'aux modèles physiques utilisés pour la simulation CFD de la combustion Gasoil–Ammoniaque

CHAPITRE 2 — Modélisation numérique

Introduction

L'étude des phénomènes de combustion dans les moteurs à allumage par compression nécessite une compréhension approfondie des interactions complexes entre l'écoulement de l'air, l'injection du carburant, les réactions chimiques et la formation des émissions polluantes. La réalisation d'essais expérimentaux permet d'obtenir des informations précieuses sur ces phénomènes, mais elle reste souvent coûteuse, longue à mettre en œuvre et limitée dans l'accès aux paramètres internes de la chambre de combustion.

Le développement des outils de mécanique des fluides numérique (Computational Fluid Dynamics – CFD) offre aujourd'hui une alternative efficace pour analyser et prédire le comportement des moteurs à combustion interne. Ces outils permettent de simuler les processus de pulvérisation, d'évaporation, de mélange, de combustion et de formation des polluants avec un niveau élevé de précision tout en réduisant le nombre d'essais expérimentaux nécessaires.

Dans le cadre de ce travail, une modélisation tridimensionnelle du moteur à gasoil monocylindre Lister Petter PH1 a été réalisée à l'aide du logiciel CONVERGE CFD. Le modèle numérique développé repose sur la géométrie réelle du moteur ainsi que sur des modèles physiques et chimiques adaptés à la simulation de la combustion dans les moteurs a gasoil. Une attention particulière est accordée à la représentation des phénomènes de turbulence, d'atomisation du carburant, d'évaporation, de combustion et de formation des émissions.

Ce chapitre présente tout d'abord les caractéristiques du moteur étudié ainsi que la géométrie retenue pour le domaine de calcul. La stratégie de maillage, les conditions aux limites et les modèles numériques utilisés sont ensuite détaillés. Enfin, une étape de validation du modèle est réalisée par comparaison avec des résultats expérimentaux issus de la littérature afin de vérifier la fiabilité de l'approche numérique adoptée avant son application à l'étude de l'influence de l'ammoniaque sur les performances et les émissions du moteur.

2.1 Présentation du moteur étudié

2.1.1 Description générale du moteur

Le moteur utilisé dans cette étude est un moteur à gasoil monocylindre à quatre temps de type **Lister Petter PH1**, équipé d'un système d'injection directe. Ce moteur appartient à une gamme de moteurs stationnaires largement utilisés dans les applications agricoles, industrielles et de production d'énergie en raison de leur robustesse, de leur simplicité de conception et de leur fiabilité en fonctionnement.

Le choix de ce moteur est motivé par la disponibilité de ses caractéristiques techniques et géométriques dans la documentation du constructeur ainsi que par son utilisation fréquente dans les études numériques relatives à la combustion et aux émissions des moteurs à allumage par compression. Les dimensions principales du moteur ont été utilisées pour construire le modèle numérique sous le logiciel CONVERGE CFD.

Dans le cadre de cette étude, le moteur est utilisé comme support pour l'analyse de la combustion d'un mélange Gasoil–Ammoniaque. Les phénomènes physiques étudiés comprennent l'injection du carburant, la pulvérisation, l'évaporation, le mélange air-carburant, la combustion ainsi que la formation des émissions polluantes.[21]

Le moteur utilisé comme cas d'étude dans ce travail est un moteur à gasoil monocylindre de type Lister Petter PH1. Sa configuration générale est présentée à la Fig. 6.

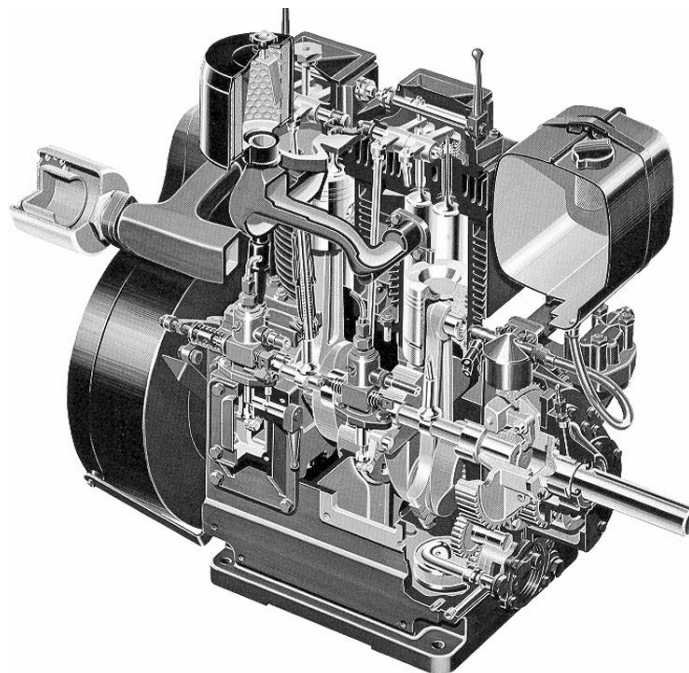


Fig. 6 — Vue générale du moteur Lister Petter PH1 [21]

La Fig. 6 présente la vue générale du moteur Lister Petter PH1 utilisé dans cette étude. Ce moteur est largement utilisé dans les applications stationnaires grâce à sa robustesse et sa simplicité de fonctionnement. Ses caractéristiques géométriques et opérationnelles servent de base à la construction du modèle numérique.

2.1.2 Caractéristiques techniques du moteur

Les principales caractéristiques géométriques et techniques du moteur étudié sont regroupées dans le tableau suivant. Ces paramètres constituent les données d'entrée nécessaires à la construction du modèle numérique ainsi qu'à la définition des conditions de fonctionnement appliquées dans les simulations CFD.[21]

Les principales caractéristiques géométriques et techniques du moteur étudié sont regroupées dans le **Tab. 4**

Tab. 4 — Principales caractéristiques techniques du moteur Lister Petter PH1.
Source : Lister Petter Ltd., Workshop Manual PH1, PH2, PHW1 and PHW2 Engines.

Vue générale du moteur Lister Petter PH1	Valeur
Modèle	Lister Petter PH1
Type	Gasoil monocylindre
Cycle	4 temps
Système d'injection	Injection directe
Alésage	87,3 mm
Course	110 mm
Cylindrée	659 cm ³
Rapport de compression	16,5:1
Longueur de bielle	192,5 mm
Régime nominal	1500 tr/min
Puissance maximale	5,07 kW
Couple maximal	25 N·m

Ces caractéristiques permettent de reproduire avec précision le comportement du moteur réel lors des simulations numériques. Les dimensions géométriques influencent directement le volume de la chambre de combustion, le mouvement du piston ainsi que les conditions thermodynamiques régnant à l'intérieur du cylindre pendant le cycle moteur.[21]

2.1.3 Conditions de fonctionnement

Les simulations numériques ont été réalisées dans des conditions représentatives du fonctionnement nominal du moteur. Le régime de rotation a été fixé à **1500 tr/min**, conformément aux conditions généralement utilisées pour ce type de moteur stationnaire.

Afin de prendre en compte les échanges thermiques entre les gaz de combustion et les surfaces solides du moteur, des températures constantes ont été imposées aux différentes parois du domaine de calcul. Les températures de la culasse, du piston et de la chemise du cylindre ont été respectivement fixées à 470 K, 500 K et 420 K. Ces valeurs permettent de représenter de manière réaliste les transferts thermiques intervenant au cours du cycle moteur.

Les conditions initiales de pression et de température appliquées dans le cylindre ont été définies de manière à reproduire les conditions réelles de fonctionnement avant le début de l'injection du carburant. L'ensemble de ces paramètres constitue la base des simulations réalisées sous CONVERGE CFD.

Les détails relatifs aux conditions initiales et aux conditions aux limites seront présentés dans une section spécifique de ce chapitre.[21]

2.2 Domaine de calcul et géométrie de la chambre de combustion

2.2.1 Géométrie de la chambre de combustion

La géométrie de la chambre de combustion constitue l'un des éléments les plus importants dans la simulation numérique des moteurs à combustion interne. Elle influence directement l'écoulement de l'air dans le cylindre, la pulvérisation du carburant, la formation du mélange air-carburant ainsi que le déroulement de la combustion. Une représentation précise de cette géométrie est donc indispensable pour obtenir des résultats fiables lors des simulations CFD.

Dans cette étude, la chambre de combustion a été reconstruite à partir des caractéristiques géométriques du moteur Lister Petter PH1. Les dimensions du cylindre, du piston et de la culasse

ont été utilisées afin de reproduire fidèlement le volume réel de la chambre de combustion au cours du cycle moteur.

La géométrie adoptée comprend le cylindre, la culasse, le piston ainsi que le volume de combustion situé au-dessus du piston. Cette configuration permet de représenter les principaux phénomènes physiques intervenant lors de l'injection, de la combustion et de la détente des gaz.[6]

La représentation géométrique de la chambre de combustion constitue une étape essentielle dans la préparation du modèle numérique. La géométrie retenue est illustrée à la Fig. 7.

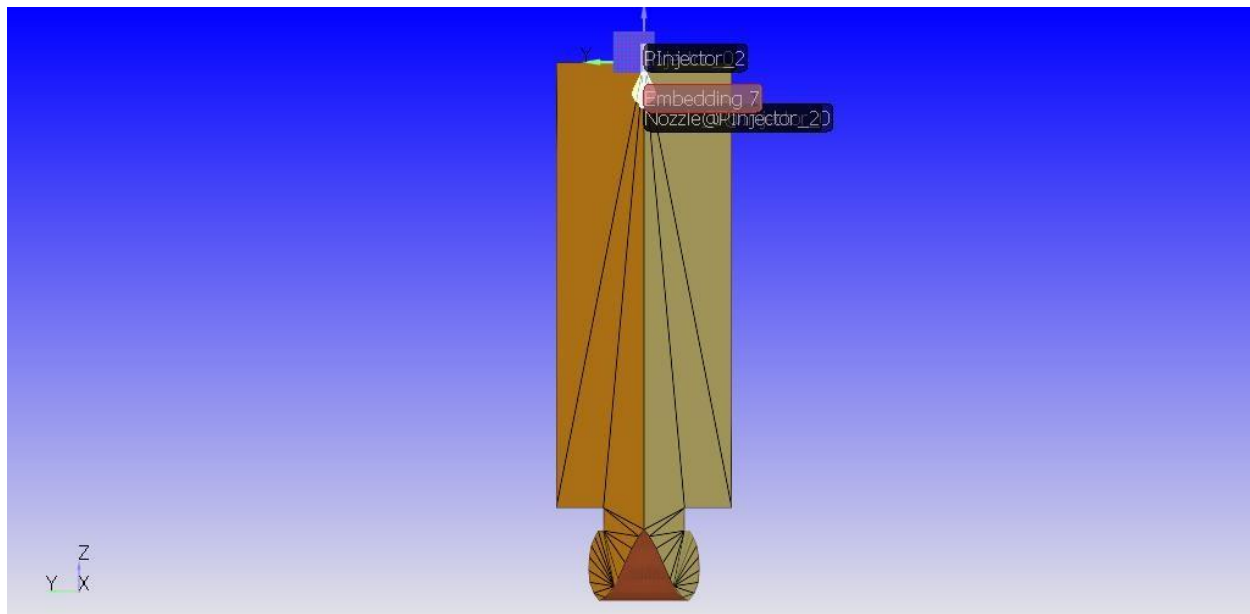


Fig. 7 — Géométrie de la chambre de combustion utilisée dans les simulations numériques.

Comme le montre la Fig. 7, la géométrie de la chambre de combustion reproduit fidèlement les caractéristiques du moteur étudié. Cette représentation permet de décrire correctement les phénomènes d'écoulement, de pulvérisation et de combustion à l'intérieur du cylindre.

2.2.2 Géométrie du piston

La forme de la tête du piston joue un rôle important dans l'organisation des mouvements d'air à l'intérieur du cylindre et dans la qualité du mélange entre l'air et le carburant injecté. Elle influence également la vitesse de combustion, le rendement du moteur ainsi que la formation des émissions polluantes.

Conformément aux recommandations du constructeur, la géométrie utilisée dans cette étude correspond à celle du piston d'origine du moteur Lister Petter PH1. Le bol de combustion présent au sommet du piston a été conservé afin de reproduire le comportement réel du moteur étudié. Cette approche permet de garantir une meilleure représentativité du modèle numérique vis-à-vis du moteur réel. La géométrie du piston utilisée dans cette étude correspond à la géométrie d'origine du moteur Lister Petter PH1. Les dimensions détaillées du bol de combustion n'étant pas fournies dans le manuel constructeur, la forme du piston a été reconstituée à partir d'images techniques et de photographies disponibles sur des catalogues de pièces détachées du moteur Lister Petter PH1.

La géométrie du piston a été intégrée dans le domaine de calcul sous CONVERGE Studio afin de prendre en compte son influence sur les phénomènes d'écoulement et de combustion.[21]

Le piston joue un rôle important dans l'organisation de l'écoulement et du mélange air-carburant dans la chambre de combustion. Sa géométrie est présentée à la Fig. 8.



Fig. 8 — Géométrie du piston utilisée dans le modèle numérique.

La Fig. 8 illustre la forme du piston utilisée dans les simulations CFD. La géométrie de la cuvette influence directement le mouvement tourbillonnaire de l'air ainsi que la distribution du carburant

injecté dans le cylindre.

2.2.3 Domaine de calcul

Les simulations numériques tridimensionnelles nécessitent généralement un nombre important de cellules de calcul, ce qui peut entraîner un temps de calcul élevé. Afin de réduire le coût numérique tout en conservant une précision satisfaisante des résultats, une approche basée sur la symétrie géométrique a été adoptée.

Le domaine de calcul retenu correspond à un secteur représentant un sixième ($1/6$) du cylindre complet. Le choix d'un secteur de 60° ($1/6$ du cylindre complet) est justifié par la symétrie géométrique du domaine étudié et permet de réduire le coût de calcul tout en conservant une représentation fidèle des phénomènes physiques.

Les surfaces latérales du secteur sont définies comme des plans de symétrie, permettant de reproduire le comportement du cylindre complet. Cette approche est largement utilisée dans les simulations CFD des moteurs à combustion interne lorsque la géométrie et les conditions de fonctionnement présentent une symétrie appropriée.

Le domaine de calcul comprend le volume du cylindre ainsi que la chambre de combustion. Les mouvements du piston sont pris en compte grâce aux fonctionnalités de maillage dynamique disponibles dans le logiciel CONVERGE CFD [6].

Afin de réduire le temps de calcul tout en conservant la précision des résultats, un domaine sectoriel a été adopté. La configuration retenue est représentée à la Fig. 9.

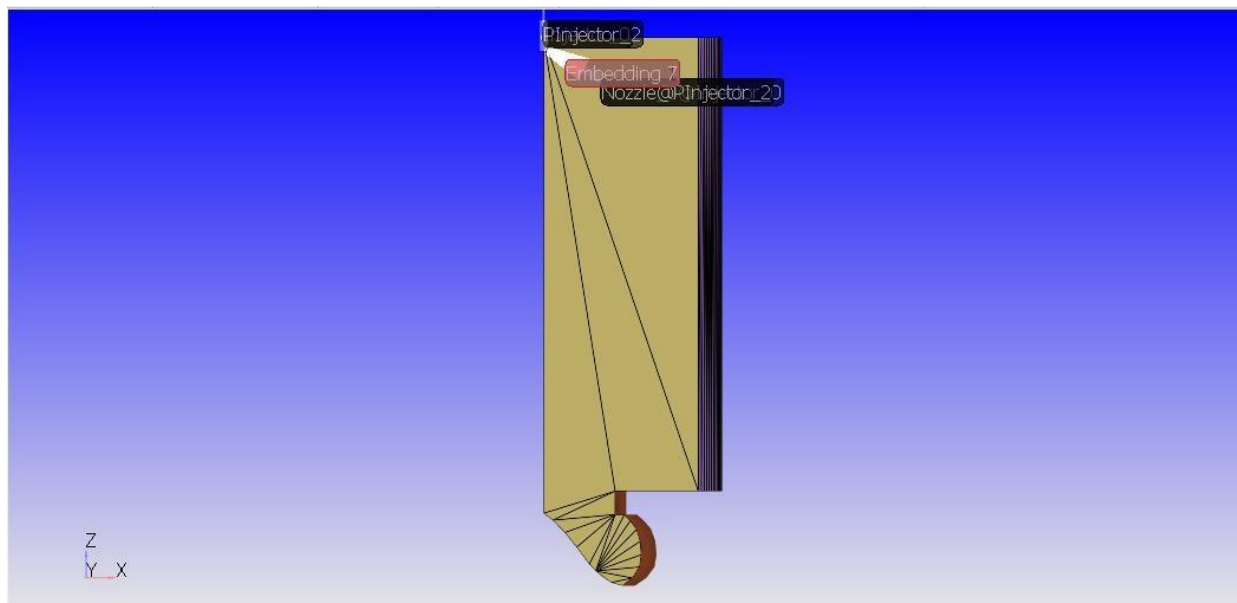


Fig. 9 — Domaine de calcul sectoriel (60°) utilisé dans les simulations numériques.

Comme illustré à la Fig. 9, seul un secteur de 60° de la chambre de combustion a été considéré. Cette approche permet de réduire considérablement le coût numérique tout en préservant la représentation des principaux phénomènes physiques.

2.2.4 Création de la géométrie sous CONVERGE Studio

La préparation du modèle géométrique a été réalisée à l'aide du logiciel CONVERGE Studio. Cette étape consiste à définir les différentes frontières du domaine de calcul ainsi que les surfaces fixes et mobiles intervenant au cours du cycle moteur.

Les frontières correspondant au piston, à la culasse et aux parois du cylindre ont été spécifiées conformément à la géométrie du moteur étudié. Les surfaces de symétrie ont également été définies afin de représenter correctement le domaine sectoriel adopté.

Une fois la géométrie créée, le domaine de calcul est prêt pour l'étape de génération du maillage numérique et l'application des différents modèles physiques nécessaires à la simulation de la combustion.[6]

Après la préparation de la géométrie et la définition du domaine de calcul, le modèle a été importé dans l'environnement CONVERGE Studio. Le résultat obtenu est présenté à la Fig. 10.

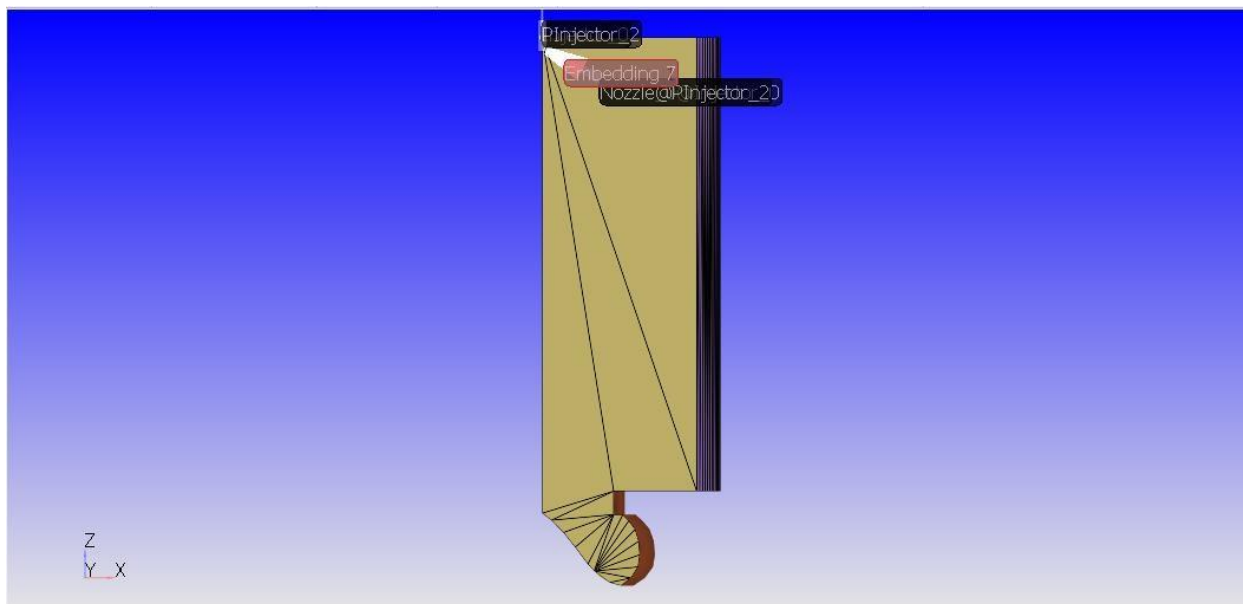


Fig. 10 — Géométrie finale importée dans CONVERGE Studio.

La Fig. 10 montre la géométrie finale utilisée pour les simulations numériques. Cette étape permet de vérifier l'intégrité du modèle avant la génération du maillage et le lancement des calculs CFD.

2.2.5 Maillage numérique

2.2.5.1 Génération du maillage

La qualité du maillage constitue une étape essentielle dans toute simulation de mécanique des fluides numérique. En effet, la précision des résultats dépend fortement de la capacité du maillage à représenter correctement les phénomènes physiques qui se développent à l'intérieur de la chambre de combustion.

Dans cette étude, le maillage a été généré automatiquement à l'aide du logiciel CONVERGE CFD. Contrairement aux logiciels CFD classiques qui nécessitent un maillage fixe construit avant le calcul, CONVERGE utilise un maillage cartésien tridimensionnel qui s'adapte automatiquement à la géométrie du domaine et aux mouvements des frontières mobiles.

Cette approche permet de simplifier considérablement la préparation du modèle tout en assurant une bonne précision numérique lors de la simulation des phénomènes de combustion dans le moteur.[6]

La qualité du maillage joue un rôle déterminant dans la précision des simulations numériques. Le maillage généré sous CONVERGE CFD est présenté à la Fig. 11.

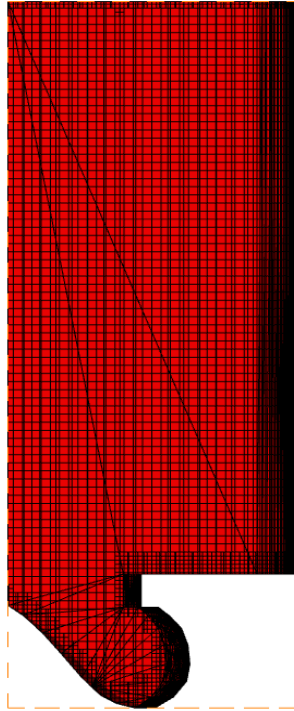


Fig. 11 — Maillage du domaine de calcul généré sous CONVERGE CFD.

La qualité du maillage joue un rôle déterminant dans la précision des simulations numériques. Le maillage généré sous CONVERGE CFD est présenté à la Fig. 11.

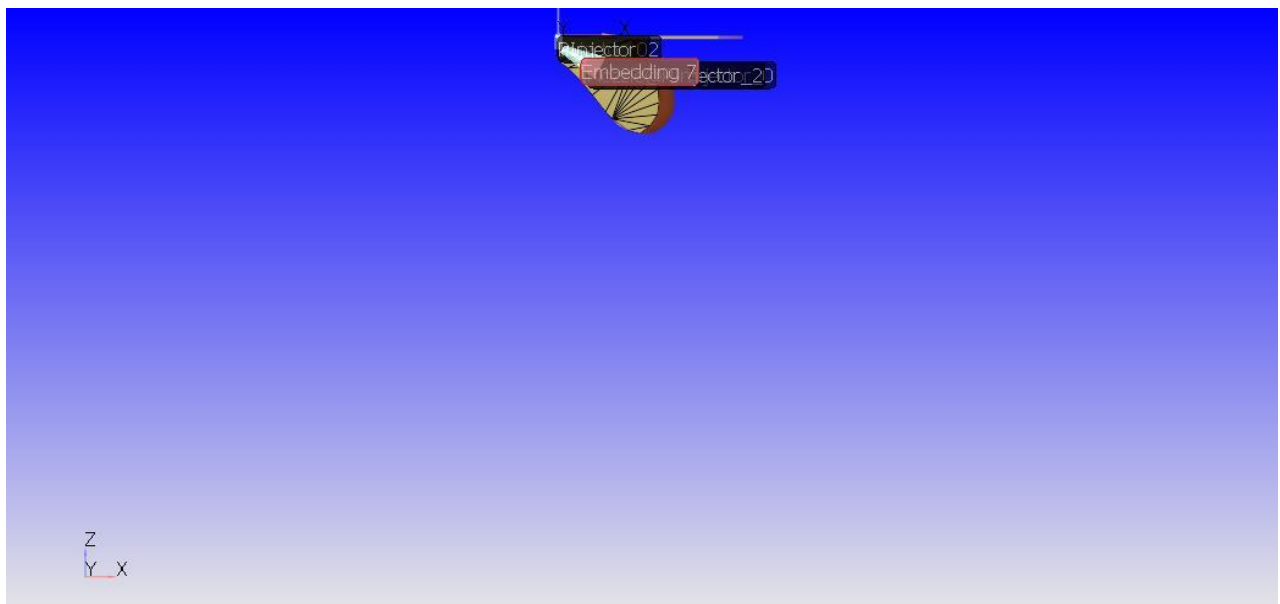
2.2.6 Maillage dynamique

Le fonctionnement d'un moteur à combustion interne implique des variations permanentes du volume de la chambre de combustion en raison du déplacement du piston entre le point mort haut (PMH) et le point mort bas (PMB). Afin de prendre en compte ces mouvements, CONVERGE CFD utilise une technique de maillage dynamique permettant l'adaptation automatique du maillage pendant toute la durée du calcul.

Cette méthode permet de conserver une qualité de maillage satisfaisante quelles que soient les positions du piston au cours du cycle moteur. Les cellules sont automatiquement créées ou supprimées afin de suivre l'évolution du volume du cylindre sans provoquer de déformations excessives susceptibles de dégrader la stabilité numérique des calculs.

L'utilisation du maillage dynamique contribue ainsi à améliorer la précision des résultats tout en réduisant les difficultés généralement rencontrées avec les maillages déformables traditionnels.[6]

Au cours du cycle moteur, le piston se déplace entre deux positions extrêmes correspondant au point mort haut et au point mort bas. Ces positions sont illustrées à la Fig. 12.



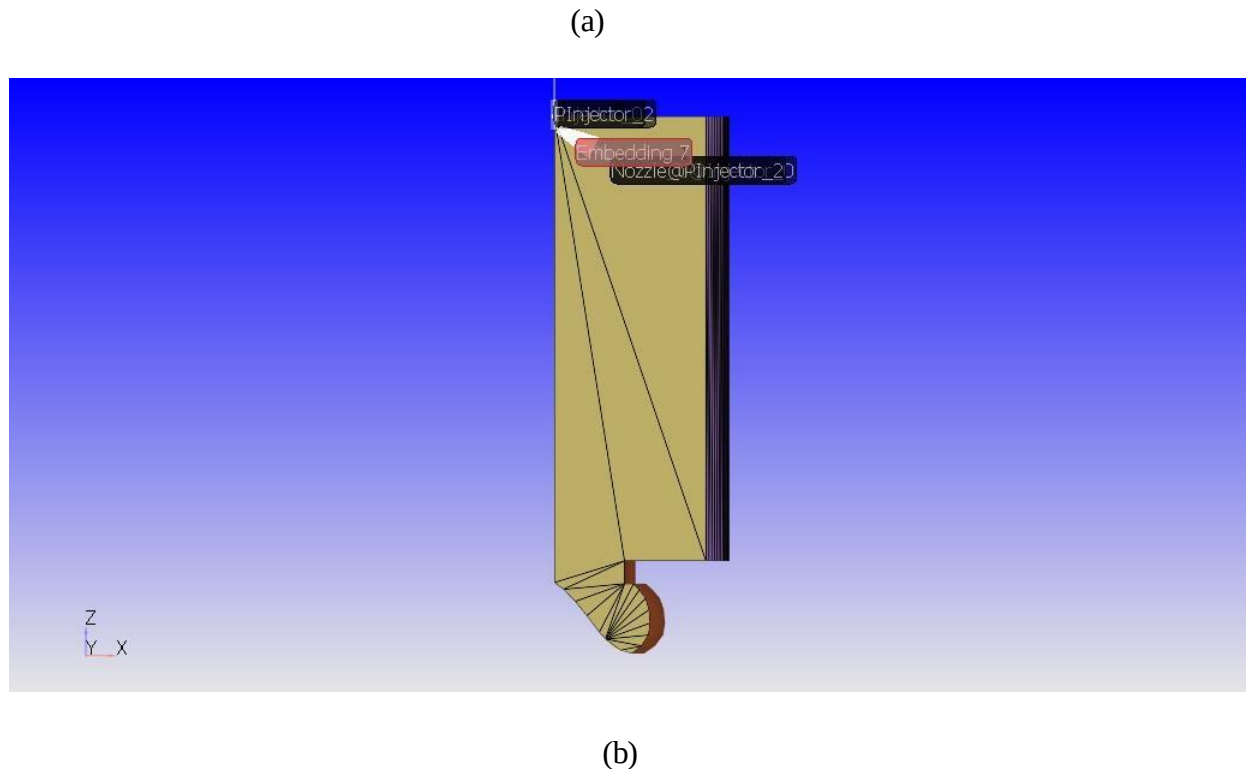


Fig. 12 — Positions du piston dans le domaine de calcul : (a) point mort haut (PMH) et (b) point mort bas (PMB).

La Fig. 12 présente les positions extrêmes du piston dans le cylindre. Le point mort haut correspond au volume minimal de la chambre de combustion, tandis que le point mort bas correspond au volume maximal atteint durant le cycle moteur.

2.2.6 Raffinement adaptatif du maillage (AMR)

Afin d'améliorer la précision des calculs dans les régions où les gradients de pression, de température ou de concentration sont importants, la technique de raffinement adaptatif du maillage (Adaptive Mesh Refinement – AMR) a été utilisée.

Le principe de cette méthode consiste à subdiviser automatiquement les cellules dans les zones nécessitant une résolution plus fine, tout en conservant un maillage plus grossier dans les régions moins sensibles. Cette stratégie permet d'obtenir une meilleure précision numérique sans augmenter excessivement le temps de calcul.

Dans les simulations réalisées, le raffinement est principalement appliqué dans les régions situées à proximité de l'injecteur ainsi que dans la zone de combustion où se produisent les réactions

chimiques les plus intenses. Cette approche permet de mieux capturer les phénomènes de pulvérisation, d'évaporation et de combustion du mélange Diesel-Ammoniaque .[6]

Afin d'améliorer la précision locale des calculs, une stratégie de raffinement adaptatif du maillage a été mise en œuvre. Un exemple est présenté à la Fig. 13.

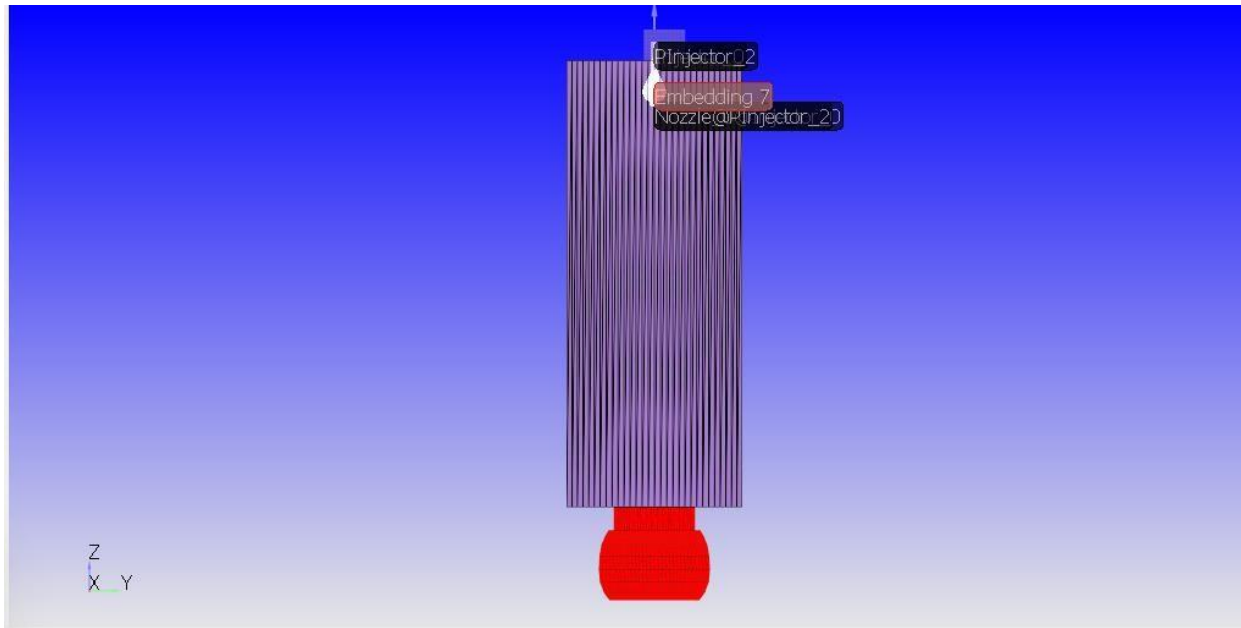


Fig. 13 — Exemple de raffinement adaptatif du maillage dans la chambre de combustion.

Comme illustré à la Fig. 13, le raffinement adaptatif augmente la densité des cellules dans les zones où les gradients physiques sont importants. Cette approche permet d'améliorer la précision des résultats tout en limitant le temps de calcul.

2.2.7 Qualité du maillage

La qualité du maillage influence directement la stabilité numérique et la précision des résultats obtenus. Un maillage de bonne qualité permet de représenter correctement les gradients thermiques et les écoulements turbulents présents dans la chambre de combustion.

Une attention particulière a été accordée à la distribution spatiale des cellules afin d'assurer une résolution suffisante dans les régions critiques du domaine de calcul. Les zones proches de l'injecteur et de la chambre de combustion bénéficient d'un raffinement plus important afin d'améliorer la représentation des phénomènes physiques dominants.

La combinaison du maillage cartésien automatique et du raffinement adaptatif permet ainsi d'obtenir un compromis satisfaisant entre précision numérique et coût de calcul.[6]

2.3 Modèles physiques et chimiques utilisés

La simulation numérique de la combustion dans un moteur à gasoil nécessite la prise en compte de plusieurs phénomènes physiques complexes tels que l'écoulement turbulent, la pulvérisation du carburant, l'évaporation des gouttelettes, les réactions chimiques de combustion ainsi que la formation des émissions polluantes. Afin de représenter correctement ces phénomènes, différents modèles physiques et chimiques disponibles dans le logiciel CONVERGE CFD ont été sélectionnés. Le choix de ces modèles repose sur leur large utilisation dans les simulations des moteurs à allumage par compression ainsi que sur leur capacité à fournir des résultats fiables avec un coût de calcul raisonnable.

2.3.1 Modèle de turbulence RNG k- ϵ

L'écoulement à l'intérieur d'un moteur à gasoil est fortement turbulent en raison des mouvements du piston, des variations rapides du volume de la chambre de combustion ainsi que de l'interaction entre le jet de carburant et l'air présent dans le cylindre. Une modélisation précise de la turbulence est donc indispensable pour reproduire correctement les phénomènes de mélange et de combustion.

Dans cette étude, le modèle RNG k- ϵ (Renormalization Group k-epsilon) a été utilisé pour décrire les effets de la turbulence. Ce modèle repose sur la résolution de deux équations de transport supplémentaires correspondant à l'énergie cinétique turbulente (k) et à son taux de dissipation (ϵ). Comparativement au modèle standard k- ϵ , l'approche RNG permet une meilleure représentation des écoulements caractérisés par des déformations importantes et de forts gradients de vitesse [16].

Grâce à sa robustesse numérique et à sa précision satisfaisante, le modèle RNG k- ϵ est largement employé dans les simulations CFD des moteurs à gasoil.[16]

2.3.2 Modèle de pulvérisation KH-RT

La pulvérisation du carburant constitue une étape essentielle du processus de combustion dans les moteurs à injection directe. Après sa sortie de l'injecteur, le jet liquide se fragmente progressivement en fines gouttelettes sous l'effet des forces aérodynamiques exercées par l'air environnant.

Pour représenter ce phénomène, le modèle hybride Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor (KH-RT) a été adopté. Ce modèle combine deux mécanismes physiques de désintégration du jet. Le mécanisme Kelvin-Helmholtz décrit principalement la fragmentation primaire du carburant à proximité de l'injecteur tandis que le mécanisme Rayleigh-Taylor permet de représenter la fragmentation secondaire des gouttelettes plus éloignées de la buse d'injection [23].

L'utilisation du modèle KH-RT permet d'améliorer la prédiction de la taille des gouttelettes, de leur dispersion dans le cylindre ainsi que de leur interaction avec l'air, ce qui influence directement le processus de combustion.[23]

2.3.3 Modèle d'évaporation Frössling

Après leur formation, les gouttelettes de carburant subissent un processus d'évaporation sous l'effet de la température élevée des gaz présents dans la chambre de combustion. L'évaporation joue un rôle déterminant dans la préparation du mélange air-carburant et dans le déclenchement de l'auto-inflammation.

Dans cette étude, le modèle de Frössling a été utilisé pour simuler les transferts de chaleur et de masse entre les gouttelettes liquides et le milieu gazeux environnant. Ce modèle établit une relation entre la vitesse d'évaporation, les propriétés thermophysiques du carburant, les caractéristiques de l'écoulement ainsi que les dimensions des gouttelettes [24].

La prise en compte de ce modèle permet de reproduire plus fidèlement les conditions réelles de vaporisation du carburant avant la combustion.

2.3.4 Modèle de combustion SAGE

La combustion du mélange Gasoil–Ammoniaque a été simulée à l'aide du modèle SAGE intégré dans le logiciel CONVERGE CFD. Contrairement aux modèles simplifiés reposant sur des lois empiriques, SAGE est basé sur la résolution directe des équations de cinétique chimique détaillée [17]

Le modèle calcule l'évolution temporelle des espèces chimiques dans chaque cellule du maillage en tenant compte des conditions locales de température, de pression et de composition du mélange. Cette approche permet de reproduire avec précision les phénomènes d'auto-inflammation, de propagation de la combustion et de dégagement de chaleur.

L'utilisation du modèle SAGE est particulièrement adaptée à l'étude de la combustion de l'ammoniaque en raison de la complexité des réactions chimiques impliquant les espèces azotées. Ce modèle permet également d'améliorer la prédiction des émissions polluantes générées au cours du cycle moteur.[17]

2.3.5 Modèle de formation des NOx

Les oxydes d'azote (NOx) figurent parmi les principaux polluants émis par les moteurs à gasoil. Leur formation est fortement influencée par la température de combustion, le temps de résidence des gaz ainsi que la disponibilité de l'oxygène.

Dans cette étude, la formation des NOx est décrite à l'aide du mécanisme thermique proposé par Zeldovich [18]. Ce mécanisme repose sur une série de réactions chimiques impliquant principalement l'azote moléculaire (N_2) et l'oxygène présents dans les gaz de combustion.

Le modèle de Zeldovich demeure aujourd'hui l'approche la plus utilisée pour l'estimation des émissions de NOx dans les moteurs à combustion interne en raison de sa simplicité et de sa capacité à représenter les principaux mécanismes de formation de ces polluants.[18]

2.3.6 Modèle de formation des suies

La formation des particules de suie résulte de phénomènes complexes de pyrolyse, de nucléation, de croissance et d'oxydation se produisant dans les zones riches en carburant de la chambre de combustion.

Pour représenter ces phénomènes, le modèle développé par Hiroyasu et Kadota a été retenu [18]. Ce modèle prend en compte simultanément les mécanismes de formation et d'oxydation des particules de suie au cours du processus de combustion.

L'utilisation de ce modèle permet d'évaluer l'influence des conditions de fonctionnement ainsi que de l'ajout d'ammoniaque sur les émissions particulières produites par le moteur à gasoil étudié.[18]

2.4 Synthèse des modèles utilisés

Les principaux modèles physiques et chimiques utilisés dans les simulations CFD sont résumés dans le **Tab. 5**.

Tab. 5 — Principaux modèles physiques et chimiques utilisés dans les simulations CFD.

Phénomène	Modèle utilisé
Turbulence	RNG k- ϵ
RNG k- ϵ	KH-RT
Évaporation	Frössling
Combustion	SAGE
Formation des NOx	Zeldovich
Formation des suies	Hiroyasu

Tab. 5 — Principaux modèles physiques et chimiques utilisés dans les simulations CFD.

Le Tab. 5 regroupe les principaux modèles utilisés pour la turbulence, la pulvérisation, l'évaporation, la combustion et la formation des émissions polluantes. Le choix de ces modèles repose sur leur large utilisation dans la littérature scientifique ainsi que sur leur compatibilité avec le logiciel CONVERGE CFD.

2.5 Mécanisme chimique

2.5.1 Présentation du mécanisme réactionnel

La simulation de la combustion du mélange Gasoil–Ammoniaque nécessite la prise en compte d'un mécanisme chimique capable de représenter les différentes réactions d'oxydation des carburants ainsi que les réactions impliquant les espèces azotées.[25]

2.5.2 Espèces chimiques et réactions élémentaires

Le mécanisme chimique utilisé dans cette étude comprend **54 espèces chimiques** et **215 réactions élémentaires**, conformément aux données intégrées dans le modèle numérique sous CONVERGE CFD.

Le mécanisme cinétique utilisé dans cette étude a été sélectionné à partir d'un cas de référence fourni avec le logiciel CONVERGE CFD. Ce mécanisme a ensuite été intégré au modèle numérique afin de décrire les réactions chimiques intervenant lors de la combustion du mélange Gasoil–Ammoniaque. Le mécanisme retenu comprend 54 espèces chimiques et 215 réactions élémentaires, permettant de représenter les principales étapes de la combustion ainsi que la formation des espèces intermédiaires.

Le mécanisme adopté permet de reproduire les étapes d'initiation, de propagation et de terminaison des réactions chimiques intervenant durant la combustion. Il prend également en compte la formation des principales espèces intermédiaires ainsi que des polluants générés au cours du processus de combustion.[25]

Les espèces considérées incluent notamment :

- l'ammoniaque (NH_3) ;
- l'oxygène (O_2) ;
- l'azote (N_2) ;
- l'hydrogène (H_2) ;
- la vapeur d'eau (H_2O) ;
- le monoxyde de carbone (CO) ;
- le dioxyde de carbone (CO_2) ;
- les radicaux OH , O , H et HO_2 ;
- diverses espèces intermédiaires azotées.

La prise en compte de ces espèces permet de suivre l'évolution de la composition chimique du mélange au cours du cycle moteur et d'évaluer la formation des émissions polluantes.

Les caractéristiques générales du mécanisme réactionnel retenu dans cette étude sont présentées dans le **Tab. 6**.

Tab. 6 — Composition du mécanisme chimique utilisé dans les simulations.

Paramètre	Valeur
Nombre d'espèces chimiques	54
Nombre de réactions élémentaires	215

Comme indiqué dans le Tab. 6, le mécanisme chimique comprend plusieurs espèces et réactions permettant de représenter les principales voies réactionnelles impliquées dans la combustion de l'ammoniaque et la formation des polluants.

2.5.3 Couplage avec le modèle SAGE

Le mécanisme réactionnel est directement couplé au modèle de combustion SAGE disponible dans le logiciel CONVERGE CFD. À chaque pas de temps, le solveur calcule l'évolution des concentrations des différentes espèces chimiques en fonction des conditions locales de température, de pression et de composition du mélange.[17]

Cette approche permet de reproduire de manière détaillée les phénomènes d'auto-inflammation, de dégagement de chaleur et de formation des polluants. Elle offre également une meilleure précision dans la prédiction des performances du moteur et des émissions produites lors de la combustion du mélange Gasoil–Ammoniaque.[17]

L'association du mécanisme chimique détaillé et du modèle SAGE constitue ainsi une approche adaptée à l'étude des carburants alternatifs tels que l'ammoniaque.[17] [26]

2.5.4 Conditions initiales et aux limites

Les conditions initiales et aux limites jouent un rôle essentiel dans la précision des simulations numériques, car elles définissent l'état thermodynamique du système au début du calcul ainsi que les interactions entre le fluide et les frontières du domaine de calcul. Dans cette étude, les paramètres utilisés ont été définis de manière à reproduire les conditions de fonctionnement du moteur étudié.

Les températures des différentes parois du moteur ont été considérées constantes durant la simulation. Cette hypothèse permet de prendre en compte les échanges thermiques entre les gaz de combustion et les surfaces solides du moteur tout en limitant la complexité du modèle numérique.[22]

Les conditions initiales et aux limites constituent les paramètres fondamentaux du modèle numérique. Les valeurs retenues pour les simulations sont résumées dans le Tab. 7.

Tab. 7 — Conditions initiales et aux limites utilisées dans les simulations CFD.

Paramètre	Valeur
Régime moteur	1500 tr/min
Température de la culasse	470 K
Température de la chemise	420 K
Température du piston	500 K
Pression initiale	1 bar
Température du carburant	320 K
Masse injectée	7,03 mg/cycle
Début d'injection (SOI)	-17 CAD
Durée d'injection	10 CAD
Swirl ratio	0,978

Le Tab. 7 présente les principales conditions de fonctionnement imposées dans le domaine de calcul. Ces paramètres définissent l'état thermodynamique initial du système ainsi que les caractéristiques nécessaires à la résolution numérique des équations de conservation.

Dans le cas du fonctionnement en mode Gasoil–Ammoniaque avec un taux de substitution énergétique (ERS) de 50 %, les paramètres d'injection ont été définis en fonction des conditions retenues pour les simulations numériques. Le diamètre de la buse d'injection du gasoil est de $8 \times 10^{-5}\text{m}$, tandis que celui de l'ammoniaque est de $1.2 \times 10^{-4}\text{m}$. Les débits massiques injectés dans le secteur de calcul de 60° sont respectivement de $3.09 \times 10^{-5}\text{kg/s}$ pour le gasoil et $7.07 \times 10^{-5}\text{kg/s}$ pour l'ammoniaque. La pression d'injection est comprise entre 170 et 200 bar.

Dans le cadre de l'étude du fonctionnement en mode Gasoil–Ammoniaque, des paramètres spécifiques ont été définis pour l'injection des deux carburants. Les valeurs utilisées pour le cas ERS = 50 % et ERS = 60 % sont présentées dans le Tab. 8.

Tab. 8 — Débits massiques de gasoil et d'ammoniaque utilisés pour les différents taux de substitution énergétique (ERS).

ERS (%)	Masse Diesel (kg)	Masse Nh3 (kg)
0	$1.172 \cdot 10^{-6}$	0
50 %	$5.86 \cdot 10^{-7}$	$1.34 \cdot 10^{-6}$
60 %	$4.69 \cdot 10^{-7}$	$1.61 \cdot 10^{-6}$

Le Tab. 8 présente les débits massiques de gasoil et d'ammoniaque retenus pour les simulations des cas ERS = 50 % et ERS = 60 %. Ces valeurs ont été définies de manière à respecter les taux de substitution énergétique étudiés tout en assurant des conditions de fonctionnement représentatives du moteur.

2.6 Procédure de simulation numérique

2.6.1 Prétraitement

La préparation du modèle numérique a été réalisée à l'aide du logiciel CONVERGE Studio. Cette étape comprend la définition de la géométrie du moteur, la création du domaine de calcul, la génération du maillage ainsi que la spécification des conditions initiales et aux limites.

Les paramètres d'injection, les propriétés des carburants, les modèles physiques et le mécanisme chimique ont également été définis durant cette phase. Une attention particulière a été portée à la cohérence des données d'entrée afin d'assurer la stabilité et la précision des simulations.[22]

2.6.2 Calcul numérique

Après la phase de prétraitement, les simulations ont été exécutées à l'aide du solveur CFD intégré dans CONVERGE. Les calculs ont été réalisés en régime transitoire afin de suivre l'évolution temporelle des principales grandeurs thermodynamiques à l'intérieur du cylindre.

Le solveur calcule à chaque pas de temps les champs de pression, de température, de vitesse ainsi que l'évolution des espèces chimiques présentes dans le domaine de calcul. Le pas de temps est automatiquement ajusté afin de garantir la stabilité numérique et la précision des résultats.

Les modèles physiques et chimiques décrits précédemment sont couplés au solveur afin de reproduire les phénomènes de pulvérisation, d'évaporation, de combustion et de formation des émissions polluantes.[22]

2.6.3 Critères de convergence

La convergence des calculs a été vérifiée à travers le suivi des résidus numériques ainsi que l'évolution des principales grandeurs physiques calculées.

Les simulations sont considérées convergées lorsque les variations successives de la pression cylindre, de la température moyenne et du taux de dégagement de chaleur deviennent négligeables et que les résidus atteignent des valeurs suffisamment faibles.

Cette procédure permet d'assurer la stabilité numérique de la solution et la fiabilité des résultats obtenus.[22]

2.7 Validation du modèle numérique

2.7.1 Méthodologie de validation

Avant d'étudier l'influence de l'ammoniaque sur les performances et les émissions du moteur à gasoil, il est nécessaire de vérifier la capacité du modèle numérique à reproduire correctement les phénomènes physiques observés expérimentalement. La validation du modèle CFD a été réalisée en comparant les résultats de simulation obtenus sous CONVERGE CFD avec les résultats expérimentaux publiés par Abdelrazek et al. (2022) pour un moteur à gasoil monocylindre fonctionnant à 1500 tr/min.

La validation repose principalement sur la comparaison des paramètres caractéristiques du processus de combustion :

- la pression moyenne dans le cylindre en fonction de l'angle vilebrequin ;

Les caractéristiques géométriques du moteur étudié ont été définies à partir du manuel constructeur du moteur Lister Petter PH1, tandis que les conditions de fonctionnement utilisées pour la validation ont été reprises de l'étude de référence afin de garantir une comparaison cohérente.[22]

2.7.2 Validation de la pression dans le cylindre

La pression cylindre constitue l'un des paramètres les plus importants pour évaluer la qualité de la simulation de combustion. Elle reflète directement les phénomènes de compression, d'auto-inflammation, de combustion et de détente qui se produisent dans la chambre de combustion.

La comparaison entre les résultats numériques et les données expérimentales concernant l'évolution de la pression cylindre est présentée dans la **Fig. 14** rapportés par Abdelrazek et al. (2022).

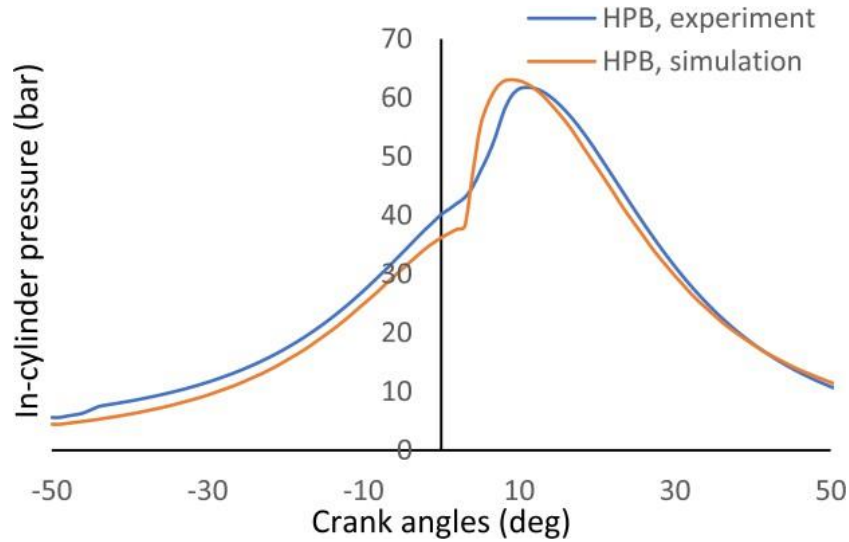


Fig. 14 ---- Comparaison de la pression cylindre entre les résultats numériques et expérimentaux.

L'évolution générale de la pression est correctement reproduite par le modèle numérique. Les positions du début de combustion ainsi que du pic de pression présentent un bon accord avec les données expérimentales. Cette concordance confirme la capacité du modèle CFD à représenter correctement les phénomènes thermodynamiques intervenant dans le moteur étudié.[22]

Les résultats montrent que le modèle reproduit correctement les principales caractéristiques du processus de combustion. Les phases de combustion prémélangée et de combustion par diffusion sont bien représentées, avec une évolution similaire à celle observée expérimentalement.

2.7.3 Analyse de l'erreur

L'erreur relative entre les résultats numériques et les résultats expérimentaux est calculée à l'aide de la relation suivante :

$$\text{Erreur (\%)} = |X_{\text{sim}} - X_{\text{exp}}| / X_{\text{exp}} \times 100$$

où :

- X_{sim} représente la valeur obtenue par simulation ;
- X_{exp} représente la valeur expérimentale de référence.

Selon Abdelrazek et al. (2022), l'écart observé entre les résultats numériques et expérimentaux est d'environ 1,7 % pour la pression maximale dans le cylindre. Ce faible écart indique que le modèle numérique est capable de reproduire avec une précision satisfaisante le comportement réel du moteur.

Les résultats obtenus permettent ainsi de considérer le modèle CFD comme validé pour l'étude de la combustion du mélange Gasoil–Ammoniaque.[22]

2.7.4 Conclusion de la validation

La comparaison entre les résultats numériques et les données expérimentales de la littérature a montré un bon accord concernant l'évolution de la pression cylindre. Les faibles écarts observés confirment la pertinence des modèles physiques et chimiques retenus dans cette étude.

Le modèle validé peut donc être utilisé pour analyser l'influence de l'introduction de l'ammoniaque sur les performances du **moteur à gasoil** ainsi que sur la formation des émissions polluantes..[22]

2.8 Étude d'indépendance du maillage

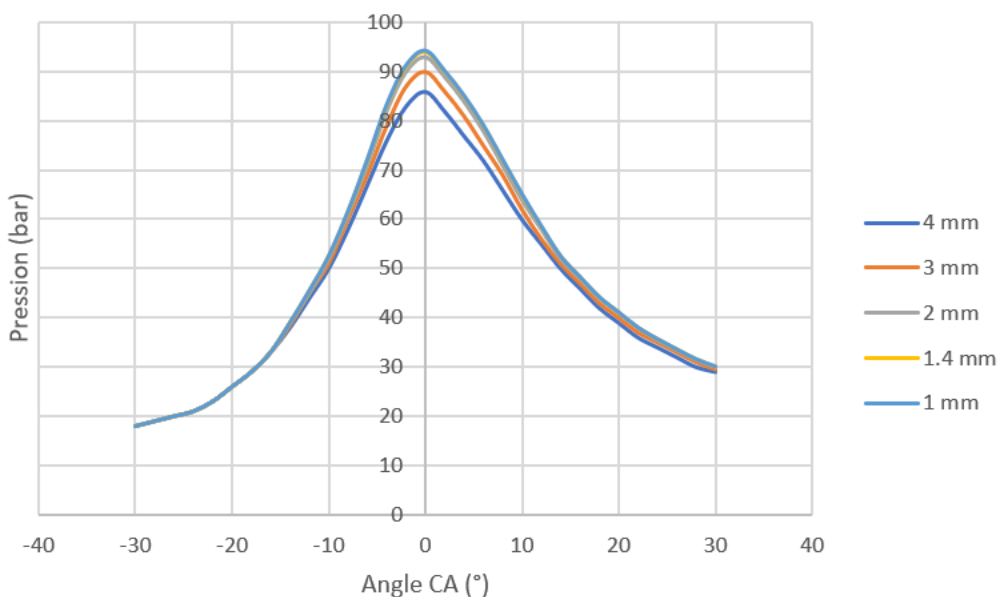


Fig. 15 ---- Étude d'indépendance du maillage : pression cylindre en fonction de l'angle de vilebrequin pour différentes tailles de maille.

La Figure 15 présente l'évolution de la pression cylindre en fonction de l'angle de vilebrequin pour différentes tailles de maille (4 mm, 3 mm, 2 mm, 1,4 mm et 1 mm). Les résultats montrent que la

pression maximale augmente progressivement avec le raffinement du maillage. Cependant, les courbes obtenues avec les maillages de 1,4 mm et 1 mm sont pratiquement confondues, ce qui indique que la solution numérique a atteint l'indépendance vis-à-vis du maillage.

La différence entre les résultats obtenus avec les maillages de 1,4 mm et 1 mm étant négligeable, le maillage de 1,4 mm a été retenu pour l'ensemble des simulations. Ce choix permet d'obtenir un bon compromis entre la précision des résultats et le coût de calcul.

Conclusion

Dans ce chapitre, la méthodologie de modélisation numérique adoptée pour l'étude de la combustion dans le moteur Gasoil Lister Petter PH1 a été présentée en détail. Les caractéristiques géométriques du moteur ont été définies à partir des données fournies par le manuel constructeur, tandis que la géométrie du piston a été reconstituée en conservant sa configuration d'origine.

Le domaine de calcul, la stratégie de maillage ainsi que les conditions aux limites et initiales ont été établis afin de reproduire fidèlement les phénomènes physiques se produisant dans la chambre de combustion. Les principaux modèles numériques utilisés dans CONVERGE CFD, notamment les modèles de turbulence RNG k- ϵ , de pulvérisation KH-RT, d'évaporation, de combustion et de formation des émissions polluantes, ont également été présentés et justifiés.

Par ailleurs, une étape de validation du modèle numérique a été réalisée par comparaison avec les résultats expérimentaux disponibles dans la littérature. La comparaison de l'évolution de la pression cylindre a montré un accord satisfaisant entre les résultats numériques et les données de référence, confirmant ainsi la fiabilité de l'approche adoptée.

L'ensemble de ces éléments permet de disposer d'un modèle numérique robuste et validé, capable d'analyser l'influence de l'introduction de l'ammoniaque sur les performances de combustion, les

caractéristiques thermodynamiques et les émissions polluantes du moteur étudié. Le chapitre suivant sera consacré à la présentation et à l'analyse des résultats obtenus à partir des différentes configurations de fonctionnement considérées.

Chapitre 3 — Résultats et discussion

Introduction

Dans ce chapitre, les résultats obtenus à partir des simulations numériques réalisées sous CONVERGE CFD sont présentés et analysés. Une première étape consiste à valider le modèle numérique par comparaison avec les résultats expérimentaux disponibles dans la littérature. Ensuite, une étude comparative entre le fonctionnement au gasoil pur et le fonctionnement en mode Diesel-Ammoniaque (ERS = 50 %) est réalisée afin d'évaluer l'influence de l'ammoniaque sur les caractéristiques de combustion et les émissions polluantes.

3.1 Validation du modèle numérique

3.1.1 Validation de la pression cylindre

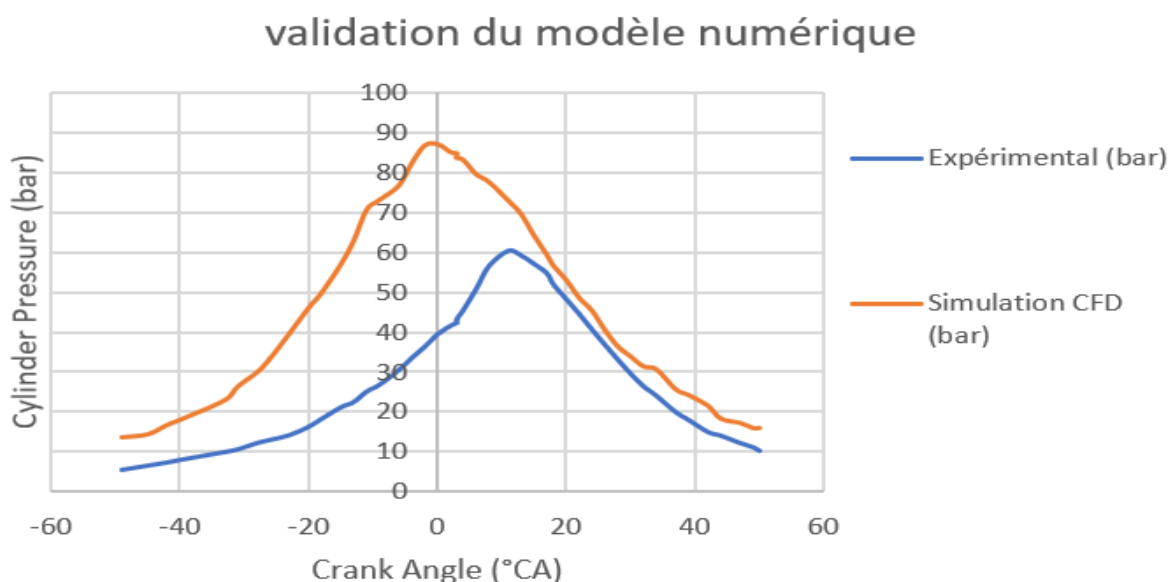


Fig. 16 ---Validation du modèle numérique par comparaison de la pression cylindre obtenue expérimentalement et numériquement.

La Figure 16 présente la comparaison entre les résultats expérimentaux et les résultats obtenus par simulation CFD pour l'évolution de la pression cylindre en fonction de l'angle de vilebrequin. Les deux courbes montrent une évolution similaire, caractérisée par une augmentation progressive de la pression durant la phase de compression, suivie d'un pic de pression à proximité du point mort haut (PMH), puis d'une diminution pendant la phase de détente.

On observe toutefois que la simulation CFD surestime les valeurs de pression par rapport aux

résultats expérimentaux, notamment au voisinage du pic de pression où un écart important est enregistré. Malgré cette différence quantitative, la simulation reproduit correctement la tendance générale du phénomène ainsi que le comportement global de la combustion au cours du cycle moteur.

Les écarts observés peuvent être attribués à plusieurs facteurs, tels que les hypothèses de modélisation, les simplifications géométriques, les incertitudes liées aux conditions aux limites ainsi que les limitations des modèles physiques et chimiques utilisés dans la simulation. Néanmoins, la concordance globale entre les deux courbes permet de considérer que le modèle numérique est capable de reproduire de manière satisfaisante l'évolution de la pression dans le cylindre et peut être utilisé pour l'analyse des caractéristiques de combustion et des émissions polluantes.

3.2 Comparaison entre le gasoil pur et le cas NH₃ (ERS = 50 %)

3.2.1 Distribution de la température dans la chambre de combustion

La distribution de la température constitue un indicateur essentiel pour analyser le développement de la combustion dans le cylindre. Elle permet d'identifier les zones de libération de chaleur, d'évaluer l'intensité de la combustion et de mettre en évidence l'influence du taux de substitution énergétique en ammoniac sur les caractéristiques thermiques du moteur. Les Figs. 17 et 18 présentent respectivement la distribution de la température au **pic de combustion** et **à la fin de la combustion** pour les trois configurations étudiées : fonctionnement au gasoil pur, mélange gasoil–ammoniac avec un ERS de 50 % et de 60 %.

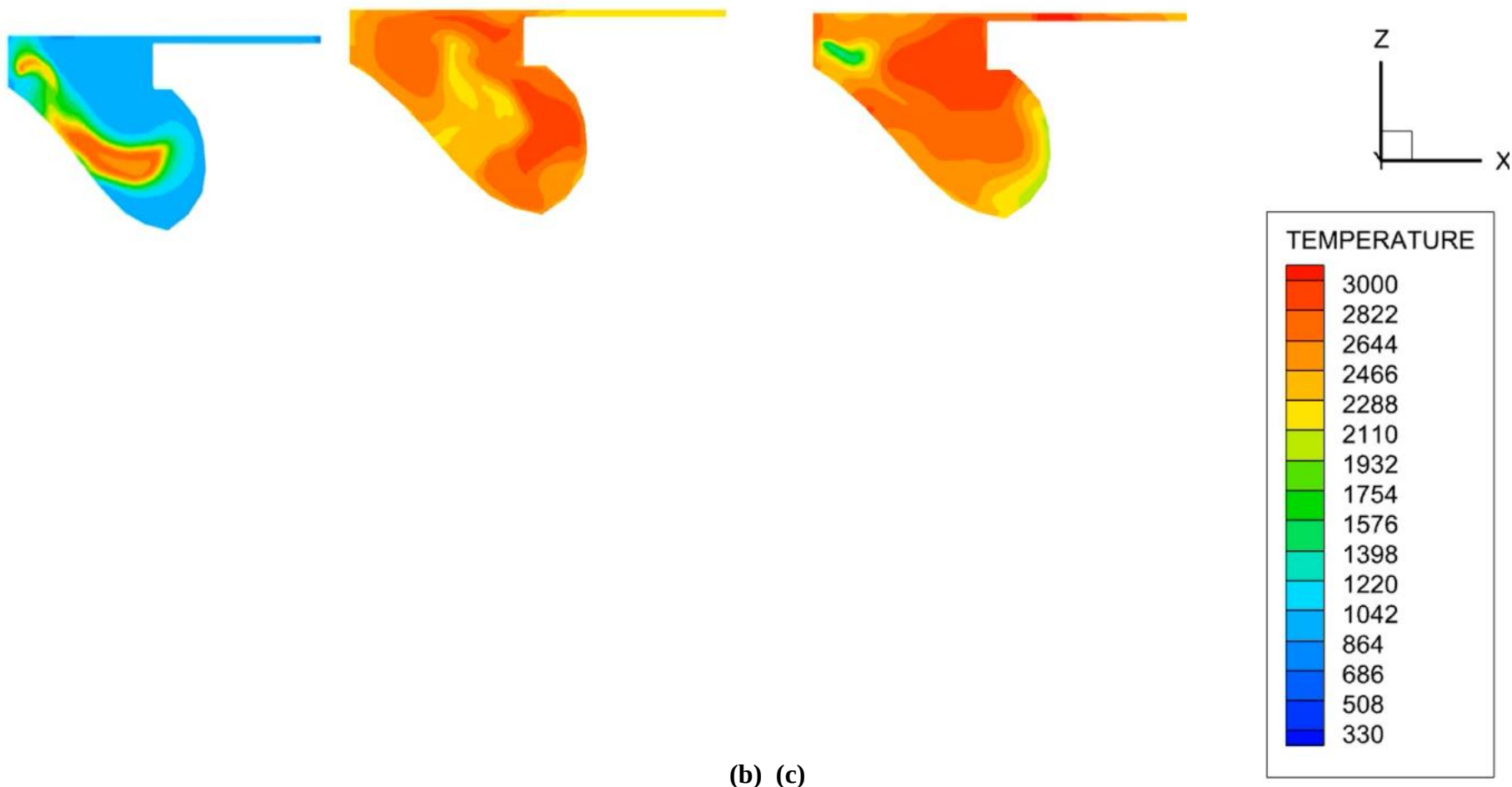


Fig. 17 ---- Distribution de la température au pic de combustion : (a) gasoil pur ; (b) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 50 %) ; (c) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 60 %).

Comme le montre la Fig. 17, le fonctionnement au gasoil pur présente une zone de température élevée concentrée dans la région de combustion, traduisant une libération rapide de l'énergie chimique. Cette distribution est caractéristique d'une combustion relativement intense et localisée. Lorsque le gasoil est partiellement remplacé par l'ammoniaque (ERS = 50 %), les zones de température élevée deviennent plus étendues dans la chambre de combustion. Cette évolution traduit une propagation plus progressive de la flamme, liée principalement à la faible vitesse de combustion de l'ammoniaque ainsi qu'à son énergie d'activation plus élevée. Pour un taux de substitution de 60 %, cette tendance demeure observable, avec une combustion apparaissant plus diffuse dans le volume de la chambre

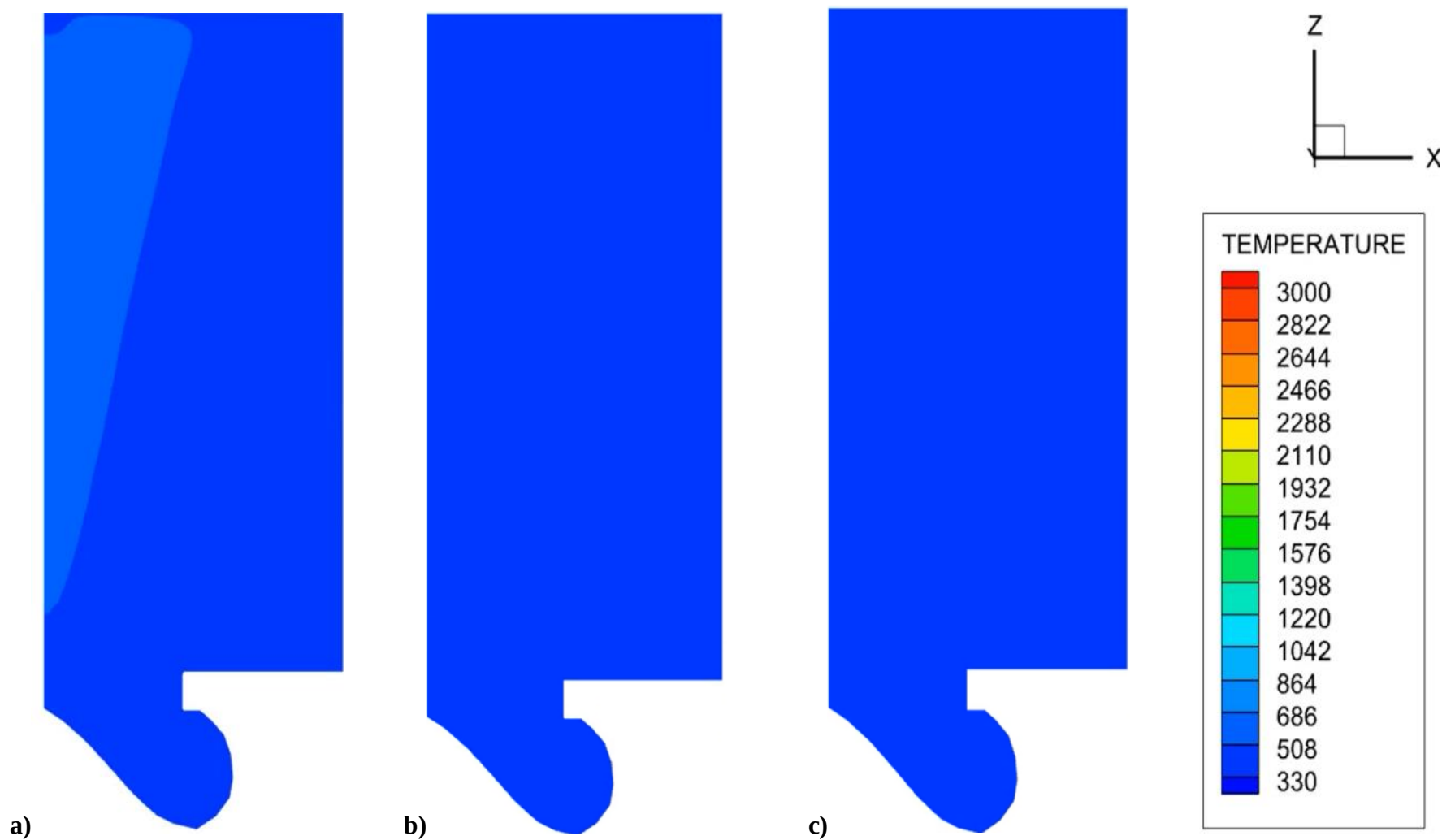


Fig. 18. Distribution de la température à la fin de la combustion : (a) gasoil pur ; (b) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 50 %) ; (c) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 60 %).

La Fig. 18 illustre la distribution de la température à la fin de la combustion. Dans le cas du fonctionnement au gasoil pur, les températures diminuent progressivement, indiquant que la combustion est pratiquement achevée. En revanche, les cas ERS = 50 % et ERS = 60 % présentent encore des zones de température relativement élevée dans la chambre de combustion. Cette observation suggère que la combustion se prolonge davantage lorsque la proportion d'ammoniaque augmente, en raison de sa cinétique de combustion plus lente.

Globalement, les Figs. 17 et 18 montrent que l'introduction de l'ammoniaque modifie la répartition spatiale de la température et le déroulement de la combustion. Alors que le gasoil pur favorise une combustion plus localisée, les mélanges gasoil–ammoniaque conduisent à une combustion plus étalée dans le temps et dans l'espace.

Il convient toutefois de souligner que les résultats obtenus pour les cas ERS = 50 % et ERS = 60 % proviennent de simulations qui n'ont pas atteint une convergence complète. Par conséquent, les valeurs quantitatives doivent être interprétées avec prudence. Néanmoins, les distributions obtenues permettent d'identifier les principales tendances de l'influence de l'ammoniaque sur le comportement thermique du moteur.

3.2.2 Distribution des oxydes d'azote (NOx)

Les oxydes d'azote (NOx) constituent l'un des principaux polluants issus de la combustion dans les moteurs à allumage par compression. Leur formation dépend principalement de la température locale, de la disponibilité de l'oxygène ainsi que du temps de séjour des gaz brûlés à haute température. Les Figs. 19 et 20 présentent la distribution des NOx respectivement au pic de combustion et à la fin de la combustion pour les trois configurations étudiées.

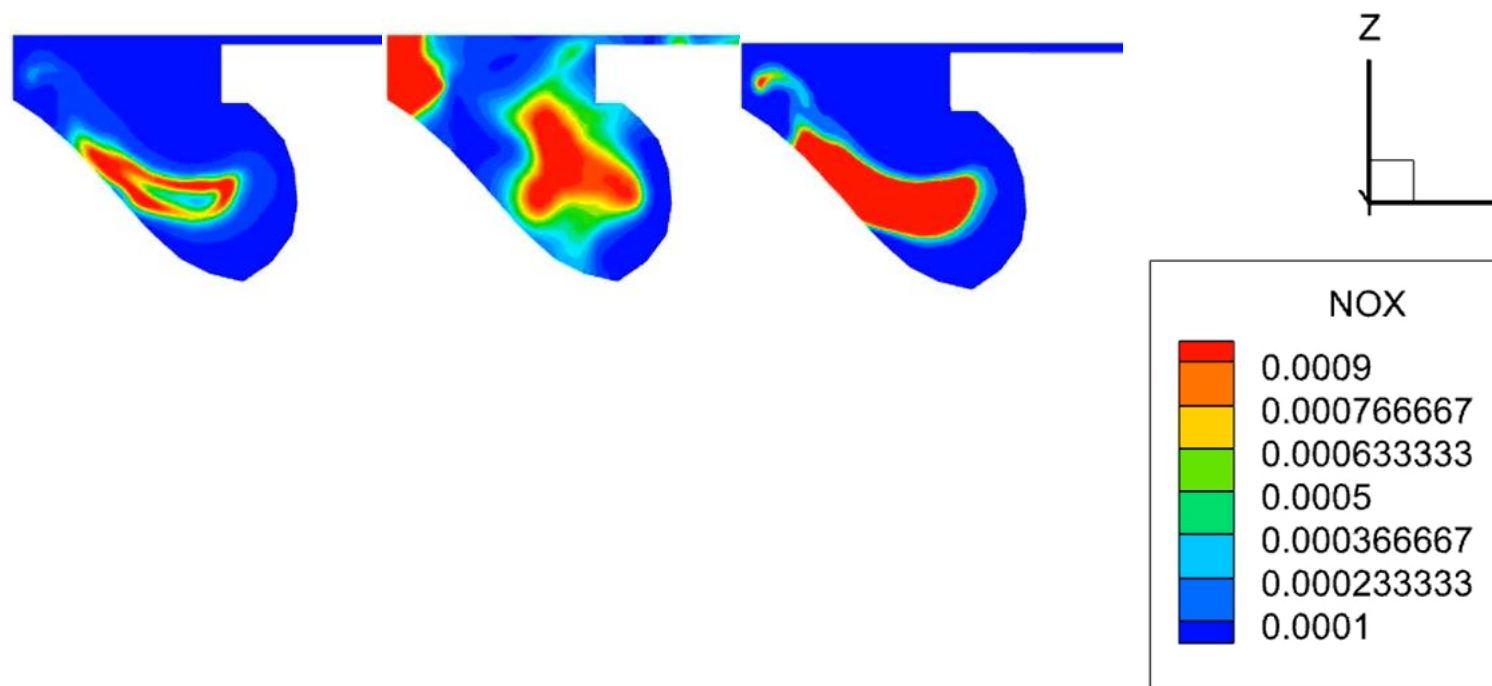


Fig. 19 ---- Distribution des oxydes d'azote (NOx) au pic de combustion : (a) gasoil pur ; (b) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 50 %) ; (c) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 60 %).

Comme l'illustre la Fig. 19(a), le fonctionnement au gasoil pur présente une formation importante des NOx, localisée dans la région où se développe la flamme. Cette distribution est cohérente avec les températures élevées observées lors du pic de combustion, favorisant les mécanismes thermiques de formation des oxydes d'azote.

Avec un taux de substitution énergétique de **50 %**, illustré par la Fig. 19(b), la zone de formation des NOx demeure concentrée dans la région de combustion mais apparaît plus étendue. Cette évolution peut être attribuée à la modification de la structure de la flamme provoquée par l'introduction de l'ammoniaque. En effet, la combustion devient plus progressive et les réactions chimiques se poursuivent sur un volume légèrement plus important.

Pour le cas **ERS = 60 %** (Fig. 19(c)), la distribution des NOx présente également une zone de concentration élevée dans la région de combustion. Toutefois, la valeur maximale observée est inférieure à celle obtenue avec le gasoil pur, ce qui traduit une diminution de l'intensité de la combustion due à l'augmentation de la proportion d'ammoniaque dans le mélange.

Globalement, les résultats montrent que l'introduction de l'ammoniaque modifie la répartition spatiale des NOx au sein de la chambre de combustion. Cette évolution résulte de la variation des températures locales ainsi que des caractéristiques cinétiques de la combustion du mélange gasoil–ammoniaque.

Il convient cependant de rappeler que les simulations correspondant aux cas **ERS = 50 %** et **ERS = 60 %** n'ont pas atteint une convergence complète. Par conséquent, les résultats présentés doivent être considérés comme des tendances qualitatives et non comme des valeurs quantitatives définitives.

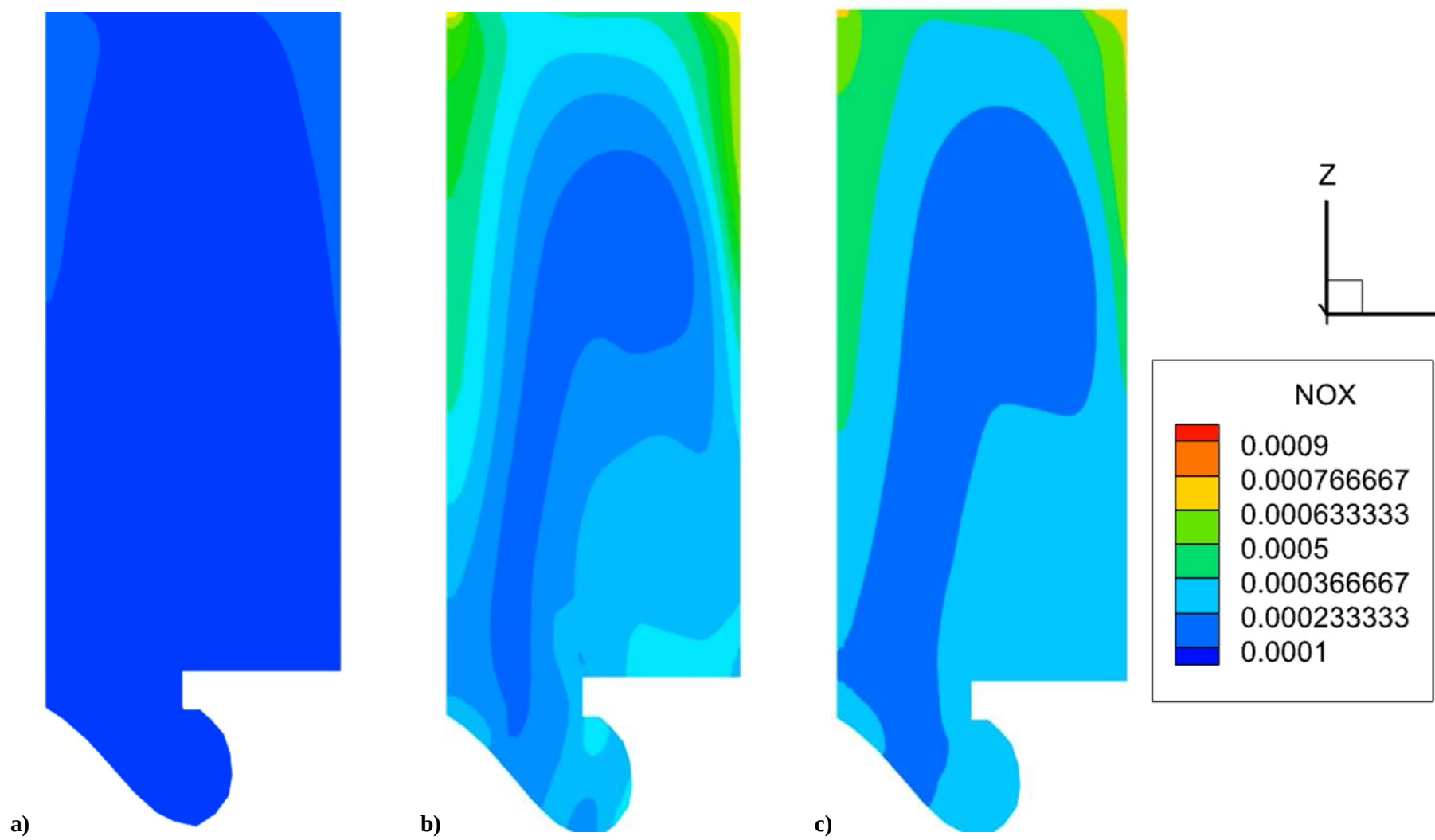


Fig. 20 ---- Distribution des oxydes d'azote (NOx) à la fin de la combustion : (a) gasoil pur ; (b) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 50 %) ; (c) mélange gasoil–ammoniaque (ERS = 60 %).

À la fin de la combustion (Fig. 20), la concentration des NOx se répartit progressivement dans l'ensemble de la chambre sous l'effet du brassage des gaz brûlés. Pour le fonctionnement au gasoil pur, les concentrations demeurent relativement faibles dans la majeure partie du cylindre, avec quelques zones présentant des valeurs légèrement plus élevées à proximité des parois supérieures.

Le cas **ERS = 50 %** montre une répartition plus homogène des NOx dans la chambre de combustion, traduisant une diffusion plus importante des espèces formées pendant la combustion.

Pour **ERS = 60 %**, une distribution similaire est observée, avec des concentrations généralement faibles dans le volume principal du cylindre. Cette évolution confirme que l'augmentation de la proportion d'ammoniaque tend à limiter les zones de très forte production de NOx tout en favorisant une répartition plus uniforme des espèces gazeuses après la combustion.

Il convient toutefois de préciser que les simulations réalisées pour les cas **ERS = 50 %** et **ERS = 60 %** n'ont pas atteint une convergence complète. Les résultats présentés doivent donc être considérés comme une **analyse qualitative** permettant d'identifier les tendances générales de l'influence de l'ammoniaque sur la formation des NOx, plutôt que comme une évaluation quantitative définitive.

3.2.3 Distribution de la fraction massique du CO₂

Afin d'analyser l'influence de l'introduction de l'ammoniaque sur la formation du CO₂, la distribution spatiale de la fraction massique du dioxyde de carbone est examinée au pic de combustion ainsi qu'à la fin de la combustion pour les trois cas étudiés.

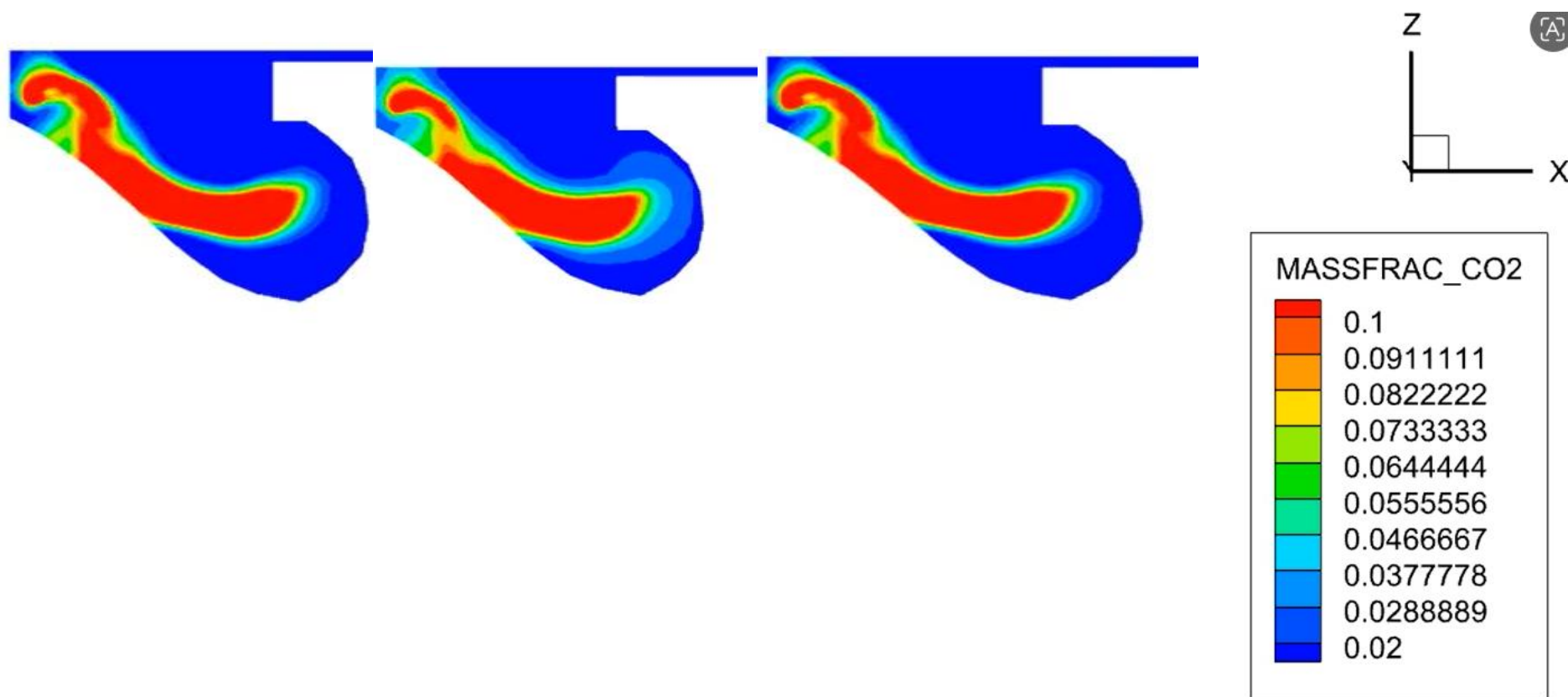


Fig. 21 — Distribution de la fraction massique du CO_2 au pic de combustion pour les trois cas étudiés : Gasoil pur, Diesel/ NH_3 (ESR = 50 %) et Diesel/ NH_3 (ESR = 60 %).

La Fig. 21 montre que la production de CO_2 est principalement localisée dans la région correspondant au front de flamme. Pour le gasoil pur, les valeurs élevées de CO_2 occupent une zone relativement importante, traduisant une combustion rapide et complète. Lorsque l'ammoniaque est introduit (ESR = 50 % puis ESR = 60 %), la zone présentant une forte concentration de CO_2 devient progressivement moins étendue. Cette évolution s'explique par la diminution de la quantité de carbone introduite dans la chambre de combustion puisque l'ammoniaque ne contient pas de carbone. Ainsi, l'augmentation du taux de substitution réduit naturellement la quantité totale de CO_2 produite tout en conservant une combustion localisée autour du jet de carburant.

Afin d'évaluer les émissions résiduelles après l'achèvement de la combustion, la distribution du CO_2 est également analysée en fin de combustion.

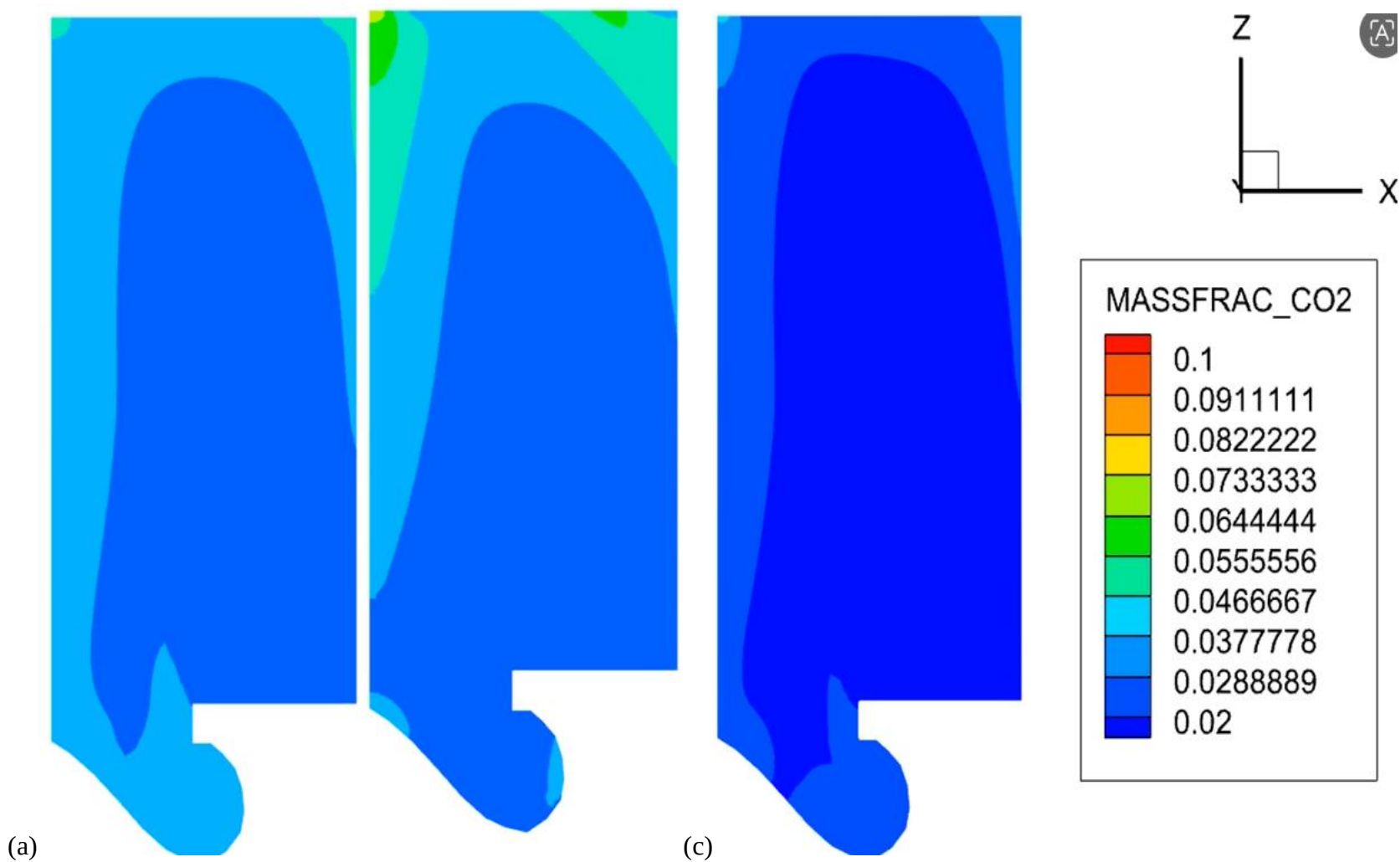


Fig. 22 — Distribution de la fraction massique du CO_2 en fin de combustion pour les trois cas étudiés : Gasoil pur, Diesel/ NH_3 (ESR = 50 %) et Diesel/ NH_3 (ESR = 60 %).

La Fig. 22 indique qu'en fin de combustion, le CO_2 est réparti de manière plus homogène dans la chambre de combustion sous l'effet du brassage des gaz. Toutefois, la concentration moyenne diminue avec l'augmentation du taux de substitution énergétique. Le cas Diesel/ NH_3 avec un ESR de 60 % présente les plus faibles concentrations de CO_2 , confirmant que le remplacement d'une partie importante du gazole par l'ammoniaque permet de réduire significativement les émissions de dioxyde de carbone. Cette diminution constitue l'un des principaux avantages environnementaux de l'utilisation de l'ammoniaque comme carburant de substitution.

3.2.4 distribution de la fraction massique de suie (Hiroy_Soot)

La formation de la suie constitue un autre indicateur important de la qualité de la combustion dans les moteurs Diesel. La Fig. 23 présente la distribution spatiale de la fraction massique de suie (Hiroy_Soot) au pic de combustion pour le gazoil pur ainsi que pour les mélanges Diesel/ NH_3 avec des taux de substitution énergétique de 50 % et 60 %. Cette comparaison permet d'évaluer l'influence de l'introduction de l'ammoniaque sur la formation des particules carbonées.

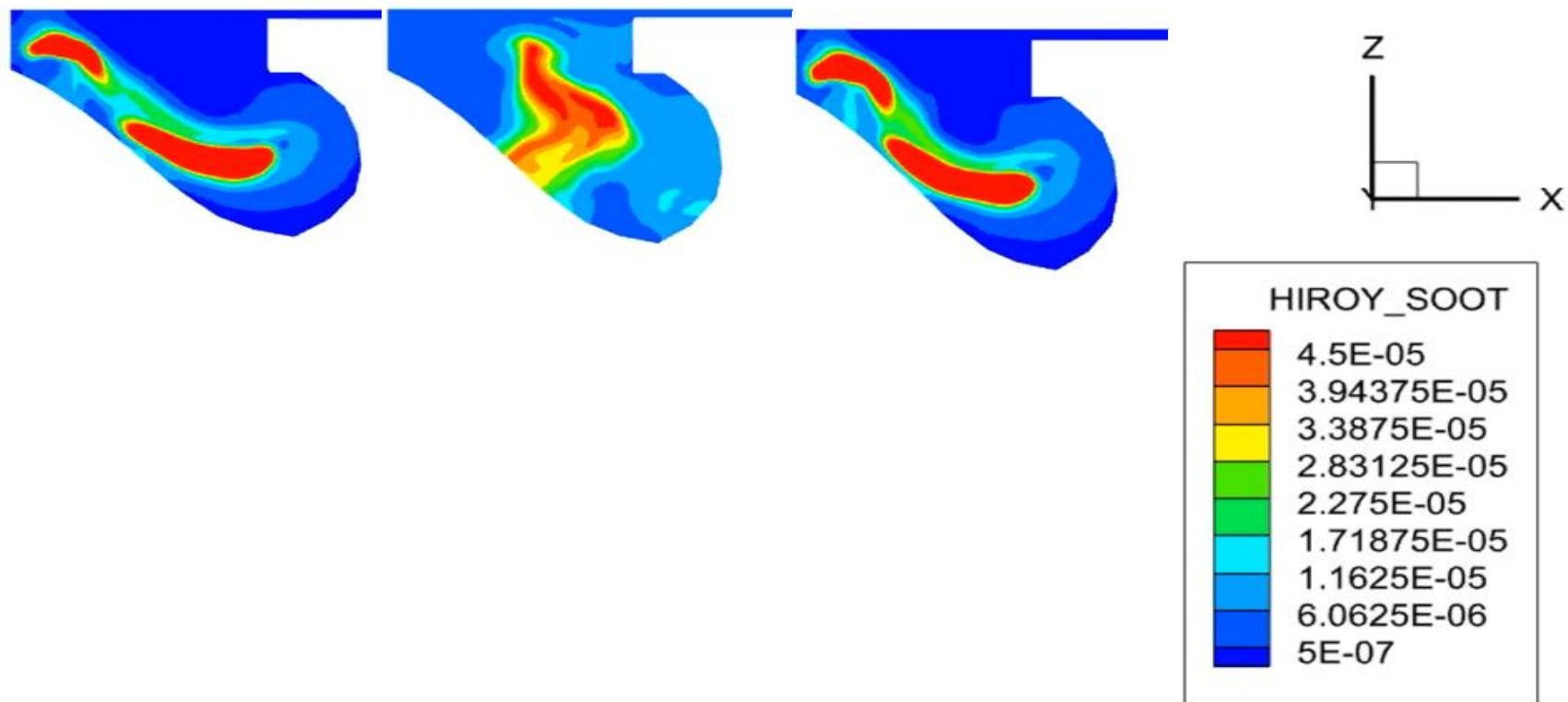


Fig. 23 — Distribution de la fraction massique de suie (Hiroy_Soot) au pic de combustion pour les cas Gasoil pur, Diesel/NH₃ (ESR = 50 %) et Diesel/NH₃ (ESR = 60 %).

Comme l'illustre la Fig. 23, la formation de la suie est principalement concentrée dans les régions riches en carburant situées à proximité du jet de combustion. Pour le gasoil pur, la zone de forte concentration de suie est bien localisée autour du front de flamme. L'introduction de l'ammoniaque à un taux de substitution de 50 % ne modifie que légèrement la répartition spatiale de la suie, tandis que le cas correspondant à un ESR de 60 % présente une diminution de la quantité de suie formée. Cette évolution est directement liée à la réduction de la quantité de carbone injectée dans le cylindre, l'ammoniaque étant un combustible dépourvu de carbone. Par conséquent, l'augmentation du taux de substitution énergétique contribue à limiter la formation des particules de suie tout en maintenant une combustion stable.

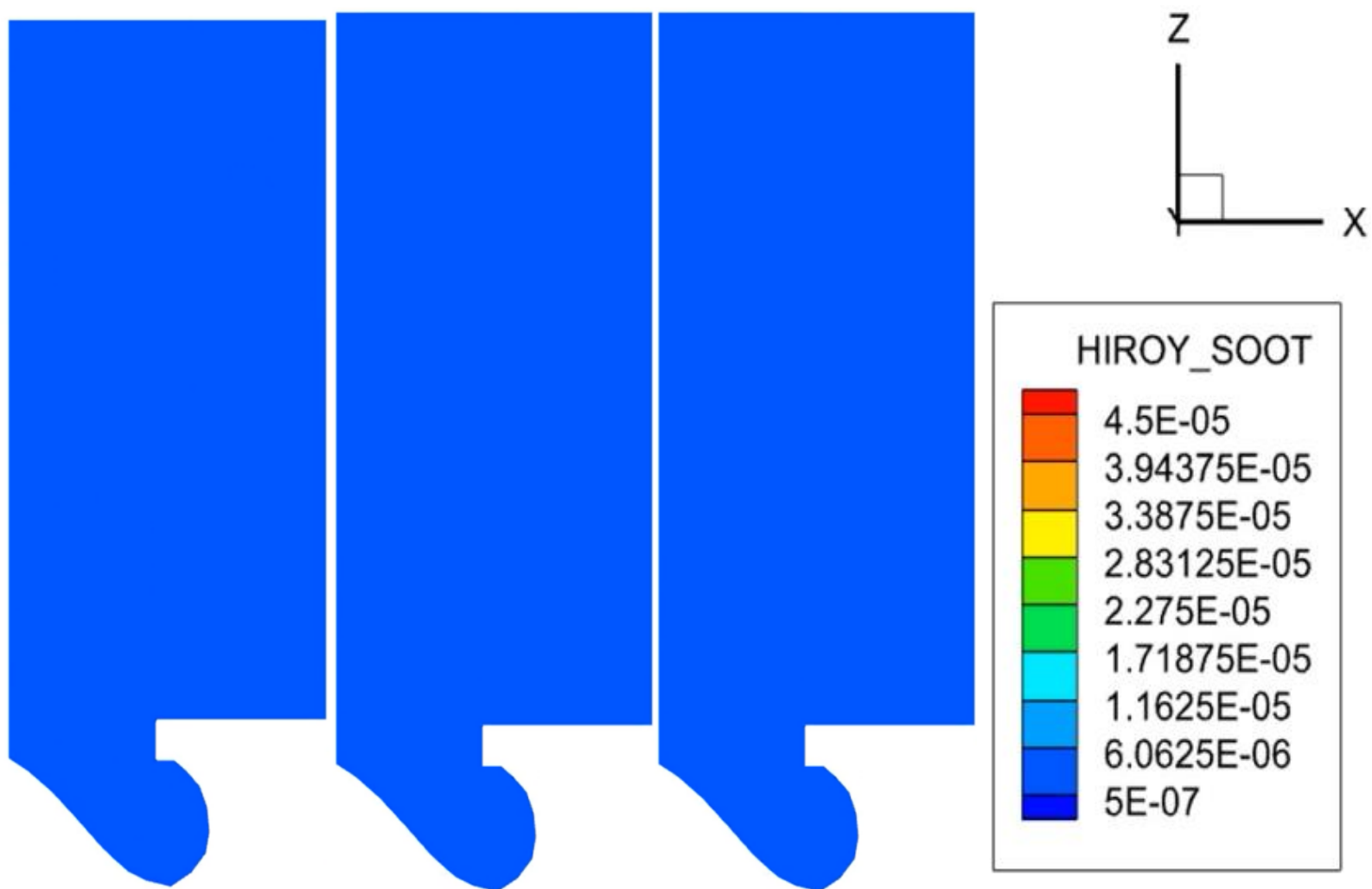


Fig. 24 ---- Distribution de la fraction massique de suie (HIROY_SOOT) à la fin de la combustion pour les différents taux de substitution en ammoniac

La Figure 24 présente la distribution spatiale de la fraction massique de suie (HIROY_SOOT) dans la chambre de combustion à la fin du processus de combustion pour les différents taux de substitution du gasoil par l'ammoniaque .

Les résultats montrent que la formation de suie demeure très faible dans l'ensemble du cylindre, comme l'indique la prédominance de la couleur bleue sur les cartes de contours. Cette observation traduit une faible concentration de particules carbonées dans les gaz de combustion.

La réduction des émissions de suie s'explique principalement par la diminution de la quantité de gasoil injectée lorsque la fraction d'ammoniaque augmente. En effet, la formation des particules de suie est directement liée à la présence d'espèces carbonées issues de la décomposition des hydrocarbures. Or, l'ammoniaque ne contient aucun atome de carbone dans sa structure moléculaire, ce qui limite fortement les mécanismes de nucléation et de croissance des particules.

De plus, l'amélioration locale du mélange air-carburant favorise l'oxydation des particules formées avant leur évacuation par les gaz d'échappement. Par conséquent, l'utilisation de l'ammoniaque comme carburant de substitution contribue à réduire significativement les émissions de suie par rapport au fonctionnement conventionnel au diesel.

Ces résultats sont en accord avec les travaux de la littérature, qui montrent que les carburants sans carbone, tels que l'ammoniaque , permettent de diminuer fortement les émissions de particules et constituent une solution prometteuse pour réduire l'impact environnemental des moteurs à allumage par compression.

3.2.5 Distribution du CO

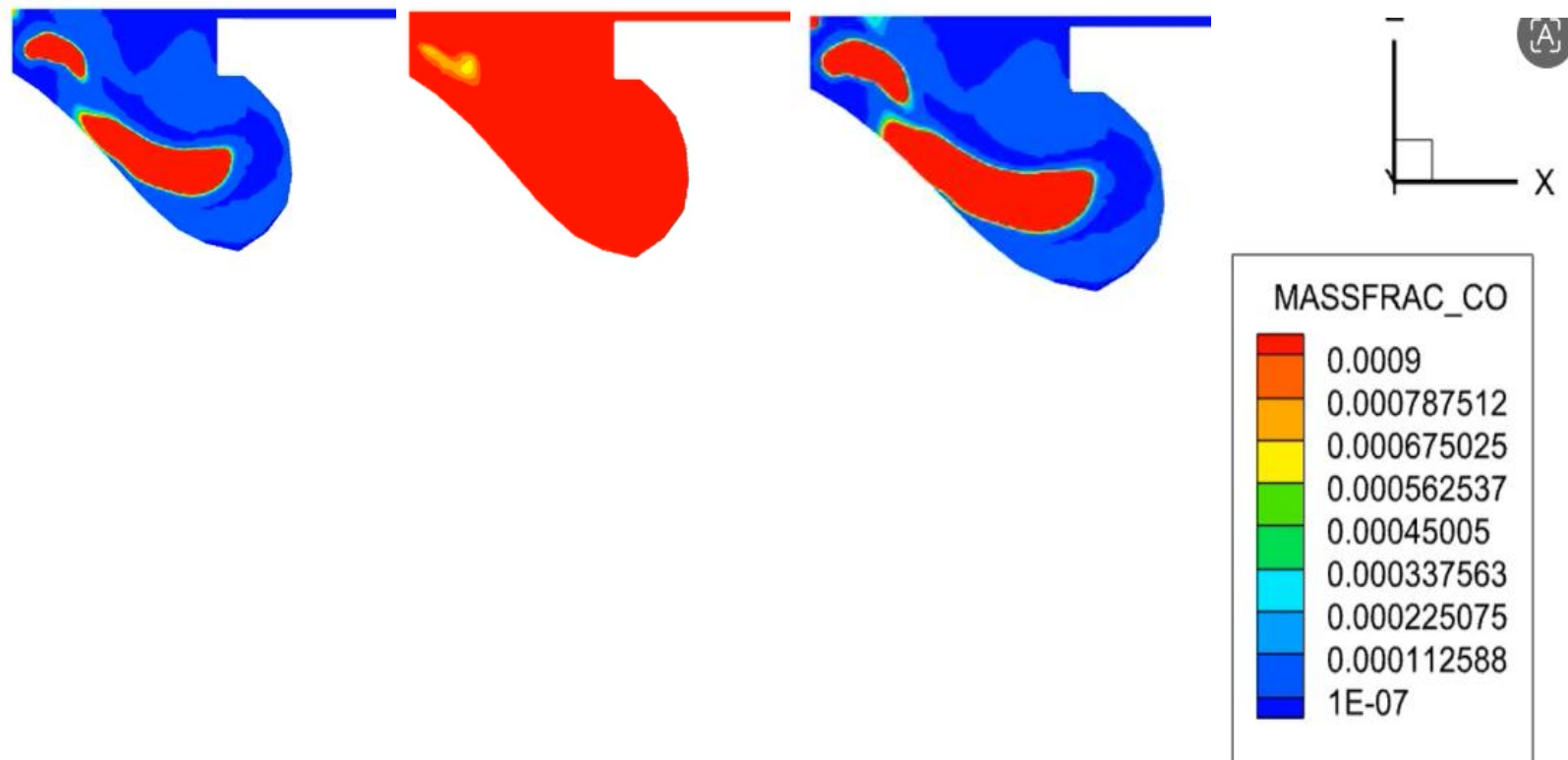


Fig. 25 ---- Distribution de la fraction massique du monoxyde de carbone (CO) au pic de combustion pour les cas Diesel, NH₃ 50 % et NH₃ 60 %.

La Figure 25 présente la distribution de la fraction massique du monoxyde de carbone (CO) au pic de combustion pour les cas Diesel, NH_3 50 % et NH_3 60 %. À cet instant, les réactions d'oxydation sont particulièrement intenses et la formation du CO constitue une étape intermédiaire dans la conversion du carbone vers le CO_2 .

Pour le cas Diesel, le CO est principalement concentré dans les zones de combustion active situées à proximité du jet de carburant. La combustion rapide du gasoil favorise l'oxydation progressive du carbone et limite l'accumulation du CO.

Dans le cas NH_3 50 %, la répartition du CO reste globalement similaire à celle du diesel, mais une légère augmentation de sa concentration est observée dans certaines zones de la chambre de combustion. Cette évolution est liée à l'introduction de l'ammoniaque, dont la faible réactivité ralentit localement les réactions d'oxydation.

Pour le cas NH_3 60 %, une augmentation plus marquée de la fraction massique de CO est observée. Les zones riches en CO deviennent plus étendues, traduisant une combustion moins efficace. Cette situation s'explique par la diminution de la quantité de gasoil injectée et par la faible vitesse de combustion de l'ammoniaque, qui retarde l'oxydation complète du carbone vers le CO_2 .

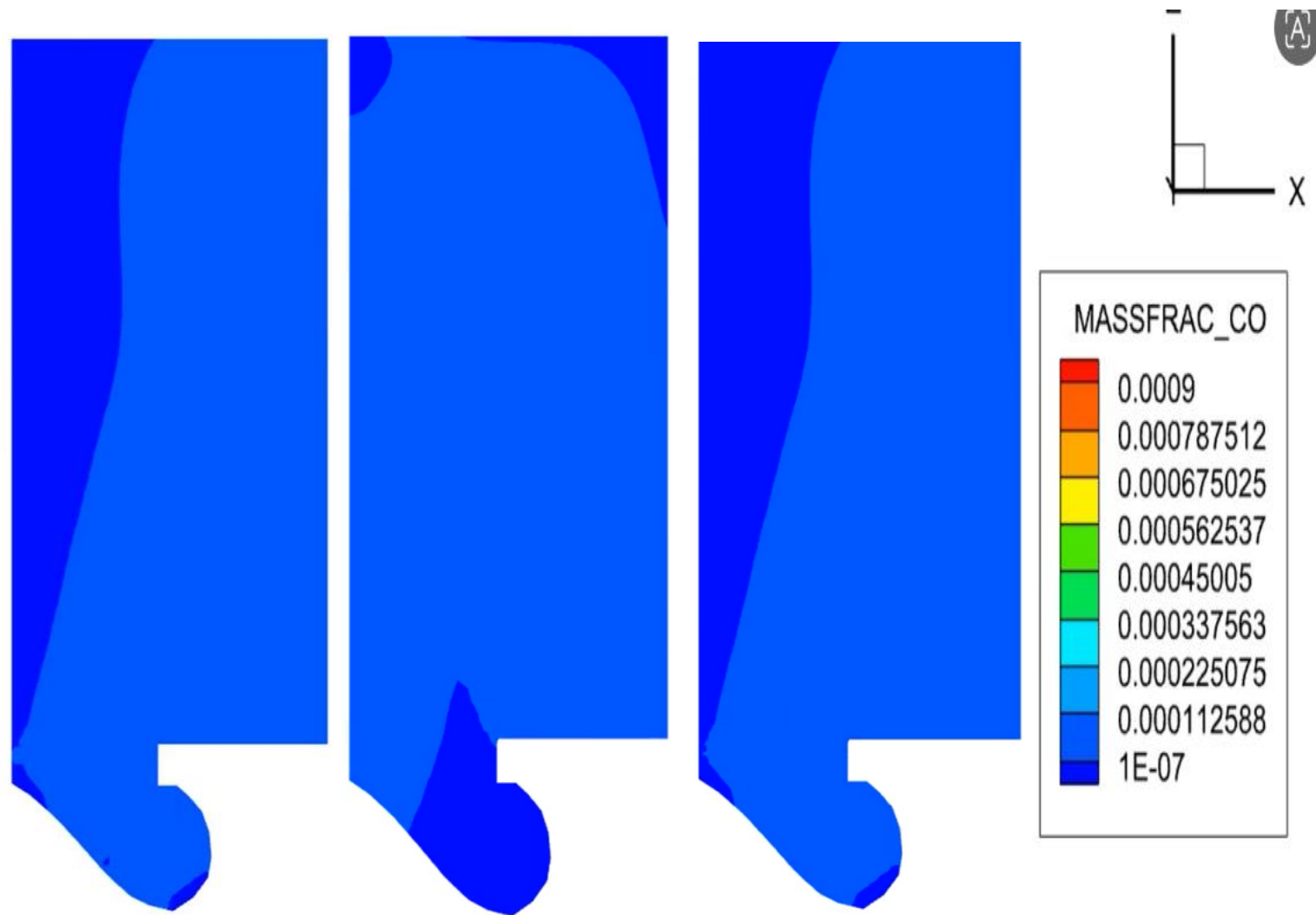


Fig. 26 ---- Distribution de la fraction massique du monoxyde de carbone (CO) à la fin de la combustion pour les cas Diesel, NH₃ 50 % et NH₃ 60 %.

La Figure 26 présente la distribution de la fraction massique du CO à la fin de la combustion. À ce stade du cycle moteur, une grande partie du CO produit pendant la combustion a normalement été oxydée en CO₂.

Pour le cas Diesel, la concentration de CO devient très faible dans l'ensemble de la chambre de combustion, indiquant que les réactions d'oxydation se sont poursuivies efficacement jusqu'à la fin du cycle.

Dans le cas NH₃ 50 %, une diminution importante de la concentration de CO est également observée. Toutefois, certaines zones présentent encore de faibles quantités résiduelles de CO, ce qui traduit un ralentissement partiel des réactions d'oxydation.

Pour le cas NH₃ 60 %, la présence de CO demeure plus importante que dans les deux autres cas. Cette persistance est due à la réduction de la température moyenne dans le cylindre ainsi qu'à la faible réactivité de l'ammoniaque, qui limitent la transformation complète du CO en CO₂.

Ces résultats montrent que l'augmentation du taux de substitution par l'ammoniaque tend à favoriser la présence de CO résiduel à la fin de la combustion, ce qui traduit une dégradation de l'efficacité de combustion lorsque la proportion d'ammoniaque devient élevée.

Conclusion

Ce chapitre a été consacré à la validation du modèle numérique ainsi qu'à l'analyse des principaux paramètres de combustion et des émissions polluantes dans un moteur diesel alimenté par différents taux de substitution en ammoniaque.

La validation du modèle à travers la comparaison des pressions cylindres a montré un accord satisfaisant avec les résultats de référence, confirmant la capacité du modèle à reproduire correctement le comportement global de la combustion dans le moteur étudié.

L'analyse des distributions de température a mis en évidence l'influence de l'ajout d'ammoniaque sur le déroulement de la combustion. L'augmentation du taux de substitution entraîne une modification des champs thermiques en raison des propriétés physico-chimiques particulières de l'ammoniaque, notamment sa faible réactivité et sa vitesse de combustion relativement réduite.

Concernant les émissions polluantes, les résultats ont montré une évolution significative des concentrations de NO_x, de CO₂, de CO et de suie. L'utilisation de l'ammoniaque permet de réduire les émissions carbonées, notamment le CO₂ et la suie, grâce à l'absence de carbone dans sa composition moléculaire. En revanche, l'augmentation de la fraction d'ammoniaque peut conduire à une hausse des émissions de CO, traduisant une combustion moins complète liée à la diminution des

températures locales et au ralentissement des réactions d'oxydation.

Globalement, les résultats obtenus confirment le potentiel de l'ammoniaque comme carburant alternatif pour la réduction des émissions de gaz à effet de serre et de particules dans les moteurs à allumage par compression. Toutefois, l'amélioration de la stabilité de combustion et la maîtrise des émissions polluantes demeurent des défis importants pour une utilisation optimale de ce carburant dans les applications futures.

Conclusion générale

Ce travail a porté sur l'étude numérique de l'influence de l'ammoniaque sur la combustion et les émissions polluantes d'un moteur Diesel monocylindre Lister Petter PH1 à l'aide du logiciel CONVERGE CFD. L'objectif principal était d'évaluer l'impact de l'introduction de l'ammoniaque comme carburant alternatif dans le cadre d'une stratégie de réduction des émissions carbonées.

Dans un premier temps, un modèle numérique tridimensionnel du moteur a été développé en intégrant les principaux phénomènes physiques intervenant dans le processus de combustion, notamment l'injection, l'atomisation, l'évaporation du carburant, la turbulence, la combustion et la formation des émissions polluantes. Une étape de validation a été réalisée par comparaison avec des résultats de référence disponibles dans la littérature afin de vérifier la cohérence globale du modèle.

L'étude a ensuite porté sur trois configurations de fonctionnement correspondant au gasoil pur (ERS = 0 %), à un taux de substitution énergétique par l'ammoniaque de 50 % et à un taux de substitution de 60 %. Les résultats obtenus ont permis d'analyser l'évolution de la pression dans le cylindre, de la température ainsi que des émissions de NO_x, CO₂, CO et de suie.

Les simulations montrent que l'introduction de l'ammoniaque contribue à réduire les émissions carbonées, en particulier le dioxyde de carbone et la suie, grâce à l'absence de carbone dans sa structure moléculaire. Cependant, l'augmentation du taux d'ammoniaque modifie le déroulement de la combustion et peut conduire à une augmentation de certaines émissions associées à une combustion moins complète.

Il convient toutefois de souligner que certains résultats obtenus présentent des écarts ou des tendances qui ne sont pas entièrement conformes aux observations généralement rapportées dans la littérature scientifique. Ces différences peuvent être liées aux hypothèses de modélisation, au choix des modèles physiques, aux paramètres numériques utilisés ou aux conditions de calcul retenues. Par conséquent, les résultats présentés doivent être considérés comme une première approche permettant d'identifier les tendances générales plutôt que comme une représentation quantitative exacte du comportement réel du moteur.

En perspective, des travaux complémentaires pourraient être réalisés afin d'améliorer la précision du modèle numérique, d'optimiser les paramètres d'injection et d'étudier d'autres taux de substitution énergétique. Une validation expérimentale plus approfondie permettrait également de mieux évaluer le potentiel réel de l'ammoniaque comme carburant alternatif pour les moteurs à combustion interne.

Malgré les limites observées, cette étude met en évidence l'intérêt de l'ammoniaque comme solution potentielle pour la décarbonation des moteurs Diesel et constitue une base de travail pour de futures recherches dans ce domaine.

Bibliographie

- [1] Heywood, J. B., *Internal Combustion Engine Fundamentals*, 2nd Edition, McGraw-Hill Education, 2018.
- [2] Folkson, R., *Alternative Fuels and Advanced Vehicle Technologies for Improved Environmental Performance*, Woodhead Publishing, 2014.
- [3] Valera-Medina, A., Xiao, H., Owen-Jones, M., David, W. I. F., & Bowen, P. J., "Ammonia for Power", *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 69, pp. 63–102, 2018.
- [4] Knothe, G., Van Gerpen, J., & Krahel, J., *The Biogas Handbook*, 2nd Edition, AOCS Press, 2010.
- [5] Demirbas, A., *Biodiesel: A Realistic Fuel Alternative for Gasoline Engines*, Springer, 2008.
- [6] Karim, G. A., *Dual-Fuel Gasoline Engines*, CRC Press, 2015.
- [7] Papagiannakis, R. G., & Hountalas, D. T., *Applied Thermal Engineering*, 2003.
- [8] Verhelst, S., & Wallner, T., "Hydrogen-Fueled Internal Combustion Engines", *Progress in Energy and Combustion Science*, 2009.
- [9] White, C. M., Steeper, R. R., & Lutz, A. E., *International Journal of Hydrogen Energy*, 2006.
- [10] Kobayashi, H., Hayakawa, A., Somaratne, K. D. K. A., & Okafor, E. C., "Science and Technology of Ammonia Combustion", *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 37, no. 1, pp. 109–133, 2019.
- [11] Reiter, A. J., & Kong, S. C., "Combustion and Emission Characteristics of Compression-Ignition Engine Using Dual Ammonia-Gasoline Fuel", *Fuel*, 2008.
- [12] Ghazal, O. H., & Borowski, G., "The Impact of Ammonia-Gasoline Blend Combustion on a Cleaner Environment", *Advances in Science and Technology Research Journal*, vol. 20, no. 1, pp. 451–461, 2026.
- [13] Okafor, E. C., Hayakawa, A., Somaratne, K. D. K. A., & Kobayashi, H., "Toward the Development of an Efficient Low-NO_x Ammonia Combustor for a Micro Gas Turbine", *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 37, no. 4, pp. 4597–4606, 2019.

- [14] Versteeg, H. K., & Malalasekera, W., *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*, 2nd Edition, Pearson Education, 2007.
- [15] Bonaiti, D., *CFD Modeling of Ammonia Fueled Internal Combustion Engines*, Master Thesis, Politecnico di Milano, Italy, 2022.
- [16] Yakhot, V., & Orszag, S. A., "Renormalization Group Analysis of Turbulence", *Journal of Scientific Computing*, vol. 1, no. 1, pp. 3–51, 1986.
- [17] Richards, K. J., Senecal, P. K., & Pomraning, E., *CONVERGE CFD Theory Manual*, Convergent Science Inc., 2023.
- [18] Hiroyasu, H., & Kadota, T., "Models for Combustion and Formation of Nitric Oxide and Soot in Direct Injection Gasoil Engines", SAE Technical Paper 760129, 1976.
- [19] Encyclopaedia Britannica. *Gasoil Engine*. Encyclopaedia Britannica, Inc. Disponible sur : <https://www.britannica.com/technology/diesel-engine> (consulté le 11 juin 2026).
- [20] Hu, Z., Yin, Z., An, Y., & Pei, Y. (2023). *Ammonia as Fuel for Future Gasoil Engines*. In H. Koten (Ed.), *Gasoil Engines – Current Challenges and Future Perspectives*. IntechOpen. <https://doi.org/10.5772/intechopen.1002059>.
- [21] Lister Petter Ltd., *Workshop Manual PH1, PH2, PHW1 and PHW2 Engines*, Lister Petter Limited, Gloucestershire, Royaume-Uni.
- [22] Abdelrazek, M. K., Abdelaal, M. M., & El-Nahas, A. M. (2022). *Piston bowl shape and biogasoil fuel effects on combustion and emission of gasoil engines*. *Journal of Engineering and Applied Science*, 69(103), 1–17.
- [23] Beale, J. C., & Reitz, R. D. (1999). *Modeling Spray Atomization with the Kelvin–Helmholtz/Rayleigh–Taylor Hybrid Model*. *Atomization and Sprays*, 9(6), 623–650.
- [24] Amsden, A. A., O'Rourke, P. J., & Butler, T. D. (1989). *KIVA-II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays*. Los Alamos National Laboratory Report LA-11560-MS, Los Alamos, USA.

[25] Patel, A., Kong, S. C., & Reitz, R. D. (2004). *Development and Validation of a Reduced Reaction Mechanism for HCCI Engine Simulations*. SAE Technical Paper 2004-01-0558.

[26] Senecal, P. K., Pomraning, E., Richards, K. J., Briggs, T. E., Choi, C. Y., McDavid, R. M., & Patterson, M. A. (2003). *Multi-Dimensional Modeling of Direct-Injection Gasoil Spray Liquid Length and Flame Lift-Off Length Using CFD and Detailed Chemistry*. SAE Technical Paper 2003-01-1043.

Résumé

L'objectif de ce travail est d'étudier numériquement l'influence de l'ammoniaque sur la combustion et les émissions d'un moteur diesel monocylindre à l'aide du logiciel CONVERGE CFD. L'ammoniaque représente un carburant alternatif prometteur en raison de son absence de carbone et de son potentiel pour la décarbonation du secteur énergétique.

Un modèle tridimensionnel intégrant l'injection, la pulvérisation, l'évaporation, la turbulence, la combustion et la formation des émissions a été développé puis validé par comparaison avec des données expérimentales de la littérature. Trois conditions de fonctionnement ont été étudiées : gasoil pur, substitution en ammoniaque de 50 % et de 60 %. Les résultats montrent que l'utilisation de l'ammoniaque réduit significativement les émissions de CO₂ et de suie grâce à l'absence de carbone dans sa structure moléculaire. En revanche, l'augmentation du taux de substitution modifie le processus de combustion et peut entraîner une hausse de certaines émissions due à une combustion moins complète. Cette étude met en évidence le potentiel de l'ammoniaque comme carburant alternatif tout en soulignant la nécessité d'optimiser les paramètres de combustion afin de limiter les émissions polluantes.

Mots-clés : Ammoniaque, moteur à gasoil, CONVERGE CFD, combustion, émissions polluantes

Abstract

The objective of this study is to numerically investigate the influence of ammonia on the combustion process and pollutant emissions of a single-cylinder diesel engine using CONVERGE CFD software. Ammonia is considered a promising alternative fuel due to its carbon-free nature and its potential to support the decarbonization of the energy sector.

A three-dimensional numerical model incorporating fuel injection, spray atomization, evaporation, turbulence, combustion, and emission formation was developed and validated against experimental data available in the literature. Three operating conditions were investigated: pure diesel fuel, 50% ammonia substitution, and 60% ammonia substitution. The results show that ammonia significantly reduces CO₂ and soot emissions owing to its carbon-free molecular structure. However, increasing the ammonia substitution ratio alters the combustion process and may increase certain emissions because of less complete combustion. These findings highlight the potential of ammonia as an alternative fuel for diesel engines while emphasizing the need to optimize combustion parameters to achieve low-emission operation.

Keywords: Ammonia, diesel engine, CONVERGE CFD, combustion, pollutant emissions.

الملخص

هدف هذا العمل إلى دراسة التأثير العددي للأمونيا على عملية الاحتراق وانبعثات الملوثات في محرك ديزل أحادي الأسطوانة باستخدام برنامج CONVERGE CFD. وتعد الأمونيا وقودًا بديلًا واعدًا نظرًا لخلوها من الكربون وإمكاناتها في المساهمة في إزالة الكربون من قطاع الطاقة.

تم تطوير نموذج عددي ثلاثي الأبعاد يدمج عمليات حقن الوقود، وتجزئة الرذاذ، والتبخير، والاضطراب، والاحتراق، وتكون الانبعثات، ثم جرى التحقق من صحته بمقارنته مع البيانات التجريبية المتوفرة في الأدبيات العلمية. وشملت الدراسة ثلاث حالات تشغيل: الديزل النقي، واستبدال 50٪ من الوقود بالأمونيا، واستبدال 60٪ بالأمونيا. أظهرت النتائج أن استخدام الأمونيا يؤدي إلى خفض ملحوظ في انبعثات ثاني أكسيد الكربون والسخام بفضل خلوها من الكربون. إلا أن زيادة نسبة الاستبدال بالأمونيا تؤثر في عملية الاحتراق وقد تؤدي إلى ارتفاع بعض الانبعثات نتيجة انخفاض اكتمال الاحتراق. وتؤكد هذه الدراسة الإمكانيات الواعدة للأمونيا كوقود بديل لمحركات الديزل، مع إبراز أهمية تحسين ظروف الاحتراق للحد من الانبعثات الملوثة.

الكلمات المفتاحية: الأمونيا، محرك ديزل، CONVERGE CFD، الاحتراق، الانبعثات الملوثة.