REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEURET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE FRERES MENTOURI CONSTANTINE 1 FACULTE DES SCIENCES EXACTES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° d'ordre :100/DS/2022 Série :10/phy/2022

THESE

PRESENTEE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE DOCTORAT EN SCIENCES EN PHYSIQUE SPECIALITE : PHYSIQUE ENERGETIQUE

THEME

Etude de conception d'un réservoir de stockage du pré-mélange hydrogène-gaz naturel comprimé

Par

KHAB HAYET

Soutenue le :21/12/2022

Devant le jury:

- Président : Mahfoud DJEZZAR
- **Rapporteur : Abla CHAKER**
- Examinateur : Hocine BENMOUSSA
- Examinateur : Abdelkader CHAKER
- Examinateur : Mounir KHIAT
- Pr. Univ. Frères Mentouri Constantine1
- Pr. Univ. Frères Mentouri Constantine1
- Pr. Univ. Mostefa Ben boulaid Batna 2
- Pr. ENP Oran
- Pr. ENP Oran

Dédicace

Je dédie ce modeste travail, à mes parents, à ma source de générosité Et de patience tout au long de ma carrière scolaire. Que Dieu vous protèges, vous prêtes bonne santé et longue vie.



REMERCIEMENTS

Je remercie en premier lieu Allah tout puissant pour m'avoir accordé la puissance et la volonté de terminer ce travail.

Le travail qui fait l'objet de cette thèse a été réalisé au laboratoire de Physique Energétique de l'université frères Mentouri Constantine1, sous la direction de Madame **Abla Chaker** Professeur au département de physique.

Mes remerciements s'adressent à Madame **Abla Chaker** pour son aide précieuse, ses conseils, sa patience, et surtout l'intérêt qu'elle a porté à mon travail et l'attention toute particulière accordée à la lecture et à la correction de cette thèse.

Je remercie chaleureusement Monsieur **Mahfoud DJEZZAR** Professeur de l'université **frères Mentouri Constantine1**, qui m'a fait l'honneur de Présider le jury de cette thèse.

Je voudrais également remercier Monsieur **Hocine BENMOUSSA** professeur à l'Université **Mostefa Ben boulaid Batna 2**, pour son intérêt à ce travail et pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de juger cette thèse.

J'adresse mes vifs remerciements à Monsieur Abdelkader CHAKER Professeur à l'ENP Oran, pour avoir accepté d'examiner cette thèse et faire partie du jury.

J'exprime mes sincères remerciements à Monsieur **Mounir KHIAT** Professeur **à l'ENP Oran** pour avoir accepté de faire partie du jury et d'évaluer ce travail.

Enfin, je remercie toute personne qui de loin ou de près, a participé au succès de cette thèse.

Sommaire

Dédicace	
remerciements	
Sommaire	I
Nomenclature	.IV
Liste des figures	.VI
Liste des tableaux	.IX
Introduction générale	1
Chapitre I -L'hydrogène vecteur énergétique	
Introduction	5
I.1. Production de l'hydrogène	6
I.1.1. Production de l'hydrogène à partir des combustibles fossiles	8
I .1.2. Production d'hydrogène à partir de la biomasse	12
I .1.3. Production d'hydrogène à partir du nucléaire	14
I.1.4. Production d'hydrogène par électrolyse	15
I .1.5. Les photoprocédés de production d'hydrogène	16
I .2. Différents modes de stockage de l'hydrogène	18
I .2.1. Stockage gazeux	18
I .2.2. Stockage liquide	27
I .2.3. Stockage solide	29
I .2.4. Stockage hybride	31
I .3. Les technologies d'utilisation de l'hydrogène comme carburant	33
I .3.1. Combustion interne	33
I .3.2. Pile à combustible	34
Conclusion	36
Chapitre II - Le gaz naturel	
Introduction	38
II.1. Réserves de gaz naturel.	39
II.1.1. Dans le monde	39
II.1.2. En Algérie	40

II.4. Etapes du cycle de vie du gaz naturel	44
II. 4.1. Extraction du gaz naturel	46
II.4.2. Traitement du gaz naturel	46
II.4.3. Transport du gaz naturel	47
II.4.4. Utilisations du gaz naturel	49
II.5. Le gaz naturel pour véhicules (GNV)	50
II.5.1. Aspect énergétique	51
II.5.2. Aspect environnemental	51
II.5.3. Aspect économique	52
II.6. Caractéristiques techniques des carburants	52
II.7. Stockage du gaz naturel	52
II.7.1. Stockage gazeux	53
II.7.2. Stockage par adsorption	53
II.7.3. Stockage liquide	54
II.8. Utilisation à l'échelle mondiale des véhicules GNV	54
II.9. Développement du GNV en Algérie	55
II.10. Mélange méthane – hydrogène	56
II.11. Possibilité d'introduire l'hydrogène en Algérie	59
Conclusion	60
Chapitre III – Modélisation physique et numérique	
Introduction	62
III. 1. Présentation du domaine d'étude	62
III .2. Phénomène de remontée de la température au cours du remplissage rapide du	
carburant gazeux	63
III .3. Formulation mathématique	64
III.3.1. Equations gouvernantes	64
III.3.2. Ecoulement turbulent	65
III.3.3. Equations des gaz réels	71
III.3.4. Modélisation numérique	73
Conclusion	84
Chapitre IV ~ Résultats et interprétations	
	0.5

Introduction	86
IV .1. Effet du type de gaz	86
IV .1.1. Vitesse du gaz pendant le ravitaillement	86

IV .1.2. Distribution de la température dans le réservoir	88
IV .1.3. Température maximale des combustibles gazeux	89
IV.2. Effet de l'enrichissement du méthane à l'hydrogène sur la température	92
IV.3. Effet de la pression	96
IV .3.1. Effet de la pression initiale sur la température	
IV .3.2. Vitesse du CHG	102
IV.4. Effet du temps total de remplissage	106
IV. 5. Effet du débit massique sur la température	109
Références bibliographiques	119
الملخص	

Abstract

Résumé

Nomenclature

Notations	Notations Caractères latins		
С р	Chaleur spécifique à pression constante	J/kg.K	
C_{v}	Chaleur spécifique à volume constant	J/kg.K	
Е	Energie	J	
h	Enthalpie spécifique	J/kg	
k	Energie cinétique turbulente	m^2/s^2	
'n	Débit massique à l'entrée	kg/s	
Р	Pression	Ра	
P_{θ}	Pression à l'état initial	Ра	
pc	Pression du point critique	Ра	
Pr	Nombre de Prandtl	-	
Prt	Nombre de Prandtl turbulent	-	
R	Constante universelle des gaz parfaits	J/(mole.K)	
Re	Nombre de Reynolds	-	
t	Temps	S	
Т	Température	K	
T_{0}	Température à l'état initial	K	
T_R	Température réduite	K	
T _c	Température critique	K	
u_i	Composante de la vitesse dans la direction <i>i</i>	m/s	
ν	Vitesse du fluide m		
W	Travail spécifique de compression	J/kg	
k	Conductivité thermique	W/m.K	
L	Longueur caractéristique de l'écoulement	m	
Lettres grecques			
η	Efficacité	%	
γ	Rapport des chaleurs spécifiques du gaz	-	
δ_{ij}	Tenseur de Kroneker	-	

μ	Viscosité dynamique	kg/m.s
μ_t	Viscosité turbulente	kg/m.s
ν	Viscosité cinématique	m ² /s
ρ	Densité du mélange	kg/m ³
Ŧ	Tenseur des contraintes visqueuses	kg.m ⁻¹ .s ⁻²

<u>Liste des figures</u>

Figure I. 1: La filière hydrogène	6
Figure I. 2: Des sources primaires à «l'hydrogène énergie », nouveau vecteur de synthèse	7
Figure I. 3: Procédés de production de l'hydrogène	7
Figure I. 4: Les sources de production d'hydrogène	8
Figure I. 5: Consommation d'énergie primaire dans le monde et prévisions	8
Figure I. 6: Emissions mondiales de GES	9
Figure I. 7: Vaporéformage du gaz naturel	10
Figure I. 8: Principe du procédé de pyrolyse de la biomasse	13
Figure I. 9: Réacteur nucléaire à très haute température (VHTR) permettant la production	
d'hydrogène à grande échelle et simultanément de l'électricité	15
Figure I. 10: Principe de l'électrolyse	16
Figure I. 11: Représentation schématique du processus photo-électrochimique	17
Figure I. 12: Capacités volumiques des différents modes de stockage de l'hydrogène	18
Figure I. 13: Système de stockage d'hydrogène à 70 MPa développé par la société Quantur	m
(capacité de stockage de ce système est de 3.1 kg)	19
Figure I. 14 : Véhicule «HydroGen3 Compressed 700» développé par General Motors	19
Figure I. 15: Réservoir haute pression (95L/700bars) type IV (poids 85 kg), réalisé par	
« Stelia composites » (salon du JEC 2013)	21
Figure I. 16: Variation du travail de compression de l'hydrogène en fonction de la pression	1
pour différentes conditions	24
Figure I. 17: Diagramme de phases de l'hydrogène	27
Figure I. 18: Cycle de Linde pré-refroidi à l'azote liquide	28
Figure I. 19:Véhicule développé par BWM (série hydrogène 7) équipé d'un système de	
stockage d'hydrogène liquide disposé dans le coffre	28
Figure I. 20: Adsorption d'hydrogène	29
Figure I. 21: Réaction de l'hydrogène avec le métal : dissociation de l'hydrogène en surfac	e,
diffusion dans le métal et formation de l'hydrure métallique	30
Figure I. 22: Projet Solhy : schéma de principe	32
Figure I. 23: Absorption par le composé intermétallique et la diffusion	32
Figure I. 24: Solution hybride développée par Toyota	32
Figure I. 25: Schéma de fonctionnement de la pile à combustible (PEMFC)	34
Figure I. 26 : Couplage thermique entre la pile à combustible et le réservoir	35
Figure I. 27: Premier vélo électrique à hydrogène (VAE Gitane Alter Bike)	35
	20
Figure II. 1: Repartition de l'approvisionnement en energie primaire totale mondiale	38
Figure II. 2: Repartition des reserves prouvees en 2010 et 2020	39
Figure II. 3: Gisements de gaz naturel onsnore et offshore dans le monde.	40
Figure II. 4: Les reserves de gaz naturel conventionnel des quinze premiers pays	41
Figure II. 5: Les dix principaux producteurs de gaz naturel dans le monde	42
Figure II. 6: Origine du gaz naturel	43
Figure II. /: Cycle de vie du gaz naturel	45
Figure II. 8: Transport du gaz naturel	48
Figure II. 9: Principales utilisations du gaz naturel	50

Figure II. 10: Evolution de l'utilisation des GN dans le transport	54
Figure II. 11: Véhicule à Combustion Interne (MCI) fonctionnant au carburant HCNG	57
Figure II. 12: Station de production et de distribution du carburant HCNG	60
Figure III. 1: Configuration du réservoir	62
Figure III. 2: Modèle schématique du processus de ravitaillement en carburant	63
Figure III. 3: Volume de contrôle pour un écoulement bidimensionnel	74
Figure III. 4: Maillage	75
Figure III. 5: Conditions aux limites dans gambit	76
Figure III. 6: Evolution temporelle de la pression d'entrée du réservoir dans le cas du	
remplissage rapide (CHG) et (CNG)	78
Figure III. 7: Schéma général d'une itération de résolution numérique	80
Figure III. 8: Critères de convergence adoptés pour les calculs avec FLUENT	82
Figure III. 9: Variation temporelle de la température de (CHG) pendant le ravitaillement p	our
différents maillages	83
Figure III. 10: Variation temporelle de la température de (CHG), pour différentes pressions	5
initiales (Nos résultats numériques et résultats expérimentaux de Yan-Lei Liu et al)	83
Figure IV. 1: Contours de la vitesse du gaz dans le cylindre aux premiers instants du	
ravitaillement dans (a) cylindre de CHG, (b) cylindre de CNG	87
Figure IV. 2: Vecteur de vitesse dans (a) cylindre de CHG, (b) cylindre de CNG	87
Figure IV. 3: Contours de la température du CHG, dans le cylindre à différents instants de	;
remplissage	88
Figure IV. 4: Contours de la température du CNG dans le cylindre à différents instants de	
remplissage	89
Figure IV. 5: Variation temporelle de la température maximale des combustibles gazeux C	CHG
et CNG dans le cylindre pour une distance axiale de 1,56 m	90
Figure IV. 6: Distribution de la température axiale dans le cylindre aux temps de remplissa	age
de 10 s et 20 s	91
Figure IV. 7: Distribution de la température radiale ($x=0.5$ m) dans le cylindre aux temps	de
remplissage de 10 s et de 20 s	91
Figure IV. 8: Distribution de la température du HCNG, dans le réservoir pour différents	
pourcentages de H ₂	92
Figure IV. 9: Variation temporelle de la température maximale du HCNG	93
Figure IV. 10: Distribution de la température axiale du HCNG dans le cylindre pour	
différentes proportions d'hydrogène	95
Figure IV. 11: Distribution de la température radiale ($x=0.5$ m) du HCNG dans le cylindr	e
pour différentes proportions d'hydrogène	95
Figure IV. 12: Variations temporelles de la température et de la pression du CHG au cours	s du
remplissage du cylindre	97
Figure IV. 13: Variation de la température du CHG en fonction de la pression dans le cas	d'un
remplissage rapide du cylindre	97
Figure IV. 14: Distribution de la température dans le cylindre pendant le ravitaillement po	our
différentes pressions initiales à t=10 s	98
*	

Figure IV. 15: Variation temporelle de la température maximale du CHG à différentes
pressions initiales dans le cylindre
Figure IV. 16: Effet de la pression initiale sur la température maximale à la fin du remplissage
du CHG dans le réservoir
Figure IV. 17: Distribution de la température axiale du CHG dans le réservoir pour différentes
pressions initiales à l'instant t=20 s
Figure IV. 18: Distribution de la température axiale du CHG dans le réservoir à différents
instants de remplissage
Figure IV. 19: Distribution de la température radiale du CHG dans le réservoir
Figure IV. 20: Contours de vitesse du CHG dans le réservoir à l'instant t= 2 s pour différentes
pressions initiales
Figure IV. 21: Variation de la vitesse axiale du CHG dans le réservoir pendant le remplissage
à différents instants
Figure IV. 22: Variation temporelle de la vitesse du CHG dans le réservoir pour différentes
positions
Figure IV. 23: Distribution de la vitesse radiale du CHG à différents instants de remplissage
du réservoir et aux distances (a) x=0.4 m (b) x=0.8 m105
Figure IV. 24: Distribution des vitesses (a) axiale (b) radiale (à la distance x=0.4m) du CHG
dans le réservoir pour différentes pressions initiales et à t=2 s106
Figure IV. 25: Variation temporelle de la température maximale du CHG dans le réservoir
pour des temps de remplissage total de 40 s et de 60 s 107
Figure IV. 26: Contours de température du CHG dans le réservoir pour différents temps de
remplissage total
Figure IV. 27: Distribution de la température radiale du CHG dans le réservoir pour différents
temps de remplissage total à l'instant t=2 s
Figure IV. 28: Variations temporelles de l'enthalpie et de l'entropie du CHG dans le réservoir
$(P_0=10 \text{ MPa}, P_f=35 \text{ MPa})$
Figure IV. 29: Contours de la température du CHG dans le cylindre à différents instants de
remplissage (m =25 g/s)
Figure IV. 30: Contours de la température du CHG dans le cylindre à différents instants de
remplissage (\dot{m} =41 g/s)
Figure IV. 31: Variation temporelle de la température maximale du CHG dans le cylindre
pour différents débits massiques
Figure IV. 32: Effet du débit massique sur la température maximale du CHG à la fin du
remplissage dans le réservoir
Figure IV. 33: Variation de la température radiale du CHG à différents instants pendant le
remplissage d'un réservoir à x=0.4 m (\dot{m} =41 g/s)113
Figure IV. 34: Variation de la température radiale du CHG pendant le remplissage à t=10 s à
différentes positions dans le réservoir
Figure IV. 35: Distribution de la température axiale du CHG dans le cylindre à différents
instants de remplissage
Figure IV. 36: Distribution de la température axiale du CHG dans le cylindre à t=2 s pour
différents débit massiques 115

<u>Liste des tableaux</u>

Tableau I. 1 : Différents types de réservoirs gazeux	20
Tableau I. 2: Conditions d'hydruration de différents composés métalliques	31
Tableau I.3 : Principales caractéristiques des stockages solide, gazeux et hybride	
(solide/gazeux)	33
Tableau II. 1: Réserves de gaz naturel conventionnel des dix premiers pays	39
Tableau II. 2: Les découvertes des plus importantes de régions gazières en Algérie et le	urs
productions	41
Tableau II. 3: Composition volumique du gaz naturel de quelques gisements	44
Tableau II. 4: Caractéristiques physico-chimiques du GNV et d'autres carburants	52
Tableau II. 5: Emissions de polluants toxiques en fonction de l'ajout d'hydrogène dans	le gaz
naturel	57
Tableau III. 1: Constantes du modèle k - ε	68
Tableau III. 2: Conditions aux limites imposées aux frontières du domaine de calcul	75
Tableau III. 3: Conditions aux limites	78
Tableau III. 4: Propriétés du matériau du réservoir	79

Introduction générale

Introduction générale

L'utilisation des combustibles fossiles carbonés (charbon, gaz naturel, pétrole) dans les transports, l'habitat et l'industrie est à l'origine de la forte augmentation de la concentration en dioxyde de carbone (CO₂), dans l'atmosphère terrestre, depuis le début du siècle dernier, entraînant le réchauffement climatique de notre planète [1]. Pour faire face à cet enjeu, il est urgent de développer de nouvelles technologies de l'énergie, qui soient non émettrices de gaz à effet de serre.

Pour protéger le climat et assurer à long terme, l'approvisionnement énergétique mondial du secteur du transport, l'hydrogène est un très bon candidat, puisqu'il présente une combustion propre, produisant uniquement de l'eau et possédant un grand pouvoir calorifique (122 kJ/g). De ce fait, l'hydrogène comme combustible pour les véhicules est une option qui attire une attention de plus en plus soutenue, au niveau international de la part des constructeurs automobiles, des acteurs du secteur énergétique et des décideurs politiques. Pour ces raisons, l'hydrogène, vecteur énergétique a un très fort potentiel à moyen et long termes, pour devenir le combustible propre et durable dans le secteur du transport.

Cependant, des verrous technologiques majeurs restent à lever, avant que le scénario d'une utilisation massive de l'hydrogène dans les transports et dans les applications stationnaires ne devienne réalité. De plus, il sera très difficile de remplacer tout le parc automobile mondial en un temps réduit. Aussi une période de transition caractérisée par l'utilisation d'un nouveau carburant constitué du mélange Gaz Naturel dopé par de l'Hydrogène, appelé hythane «HCNG», dans les moteurs à combustion interne classiques est nécessaire pour permettre la levée de ces obstacles. Ce qui permettra d'éviter de changer le parc automobile du fait que la technologie H₂-MCI (Moteur à Combustion Interne) est très proche de celle utilisée couramment dans les moteurs CNG.

Le champ de recherche concernant les carburants de substitution est assez jeune, mais l'intérêt qu'il suscite se fait sentir dans de plus en plus de pays touchés par le problème de la pollution issue des gaz à effet de serre. Depuis environ une trentaine d'années, un nombre important de laboratoires se sont intéressés à la problématique des carburants de remplacement. A notre échelle, l'Algérie dispose d'un grand réservoir de gaz naturel constitué d'un composé majoritaire qui est le méthane (gisement Hassi R'Mel 79.6%). Ce nouveau

créneau (enrichissement à l'hydrogène), peut s'avérer d'une importance capitale pour notre pays.

La problématique du stockage d'hydrogène est un frein à son utilisation dans des applications mobiles et dans les transports. Celle-ci, est d'autant plus complexe que chacune des nombreuses technologies susceptibles d'être utilisée pour stocker l'hydrogène, présente des caractéristiques fortes qui la rendent optimale pour certaines situations et des faiblesses qui excluent son utilisation dans d'autres.

L'hydrogène peut être stocké de plusieurs manières, soit dans des réservoirs à hydrure métallique, ou sous forme de gaz comprimé ou encore cryo-liquéfié. Actuellement, le gaz comprimé (35-70 MPa) est la solution privilégiée pour stocker l'hydrogène à bord des véhicules en raison d'une plus grande maturité technologique et de meilleures capacités de support des infrastructures. Il a été noté qu'une augmentation conséquente et donc dangereuse, de la température dans le réservoir peut résulter de la compression quasi adiabatique du gaz lorsqu'une pression de stockage élevée (35 MPa) est associée à un remplissage rapide (environ 3 minutes), pour atteindre les objectifs compétitifs de temps de ravitaillement court et d'une longue autonomie [1], [2].

C'est dans ce contexte que s'inscrit ce travail de thèse, dont l'objectif sera d'étudier l'influence de l'utilisation des carburants de substitution, tels que le gaz naturel et l'hydrogène à l'état pur et sous forme de mélange, sur la température des carburants dans les réservoirs de stockage à haute pression. Notre contribution à ce vaste domaine de recherche portera principalement sur la problématique du stockage hyperbare à 35MPa.

La thèse est organisée en quatre chapitres, une introduction et une conclusion, générales

Le premier chapitre consiste en une synthèse bibliographique de différents procédés de production d'hydrogène, des principaux modes de son stockage et des technologies d'utilisation de gaz comme carburant.

Dans le deuxième chapitre les réserves et les productions algériennes en ressources gazières, ainsi que le programme national pour le développement du GNV et la possibilité d'introduire l'hydrogène en Algérie, sont présentés.

La géométrie du problème, le modèle mathématique choisi, les équations (continuité, conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie),qui gouvernent le champ

d'écoulement dans le réservoir des gaz, les conditions aux limites associées, les techniques spécifiques concernant l'application de la méthode des volumes finis, via le code commercial Fluent d'Ansys 15.0, et la mise en œuvre de ce dernier pour la simulation numérique des phénomènes d'échauffement étudiés, constituent le troisième chapitre.

Les résultats numériques de cette étude, analyse, interprétations et commentaires, sont rassemblés dans le quatrième chapitre.

Chapitre I ~ L'hydrogène vecteur énergétique

Introduction

Ces dernières années, en réponse à une inquiétude de plus en plus marquée à l'égard de l'impact écologique de la consommation d'énergie et à une vive préoccupation sur la sécurité des réserves de combustibles fossiles, la fourniture de services énergétiques à base d'hydrogène suscite un intérêt croissant. L'hydrogène, comme vecteur énergétique, peut en principe remplacer toutes les formes d'énergies utilisées aujourd'hui et fournir des services énergétiques à tous les secteurs de l'économie. L'attrait fondamental de l'hydrogène tient à ses avantages écologiques potentiels, par rapport aux combustibles fossiles. Sur le lieu d'utilisation, l'hydrogène peut être brûlé de manière à ne dégager aucune émission de dioxyde de carbone ou de tout autre gaz à effet de serre déréglant le climat. L'hydrogène pourrait ainsi constituer le fondement d'un système énergétique réellement durable.

Aujourd'hui, le recours à l'hydrogène (H₂) comme vecteur énergétique est l'une des solutions envisagées pour assurer la sécurité énergétique à l'avenir. Rappelons que l'hydrogène est un vecteur énergétique dans le sens où bien qu'il soit l'un des éléments les plus abondants sur terre, il n'est pas disponible à l'état pur dans la nature. On ne le trouve que sous forme combinée (dans l'eau H₂O, dans les hydrocarbures C_nH_m, etc...). Il est donc nécessaire de le produire et par conséquent de dépenser de l'énergie, avant de pouvoir l'utiliser lui-même pour la production d'énergie. Par conséquent il s'agit bien d'un vecteur énergétique et non pas d'une source d'énergie. Plusieurs programmes de recherche visent à construire et à développer la filière "énergie hydrogène" qui répondrait aux besoins énergétiques et environnementaux actuels.

La faisabilité de ce vecteur énergétique passe par l'étude du stockage d'hydrogène qui reste une étape clé dans son déploiement. L'ensemble de la filière hydrogène est schématisé par la figure I .1.



Figure I. 1: La filière hydrogène

Afin de donner au lecteur une vision globale sur les différents modes de stockage de l'hydrogène, nous présentons dans ce qui suit quelques technologies capables de le produire de manière non exhaustive, puis nous passerons en revue les différents systèmes de conversion d'énergie.

I.1. Production de l'hydrogène

L'hydrogène est aujourd'hui essentiellement produit directement à partir des hydrocarbures pour l'industrie chimique (hydrogène-chimie). Néanmoins, il est envisagé dans un proche avenir de produire de l'hydrogène-énergie, à usage énergétique (figure I.2) [3]. A court terme, l'exploitation des combustibles fossiles, polluantes, paraît incontournable mais des recherches sur la séquestration du carbone afin de réduire les émissions de GES sont engagées. A plus long terme cet hydrogène-énergie serait synthétisé par une électrolyse exploitant une électricité et une chaleur d'origines renouvelable et/ou nucléaire. On peut aussi l'obtenir par thermolyse avec un rayonnement solaire concentré.



Figure I. 2: Des sources primaires à «l'hydrogène énergie », nouveau vecteur de synthèse

De nos jours, l'hydrogène est produit pour près de 96 %, à partir des énergies fossiles (le gaz naturel est la matière première, la plus utilisée [4]). Le choix des méthodes de production dépend de la disponibilité de la matière de base ou de la ressource, de la quantité d'hydrogène à produire et de la pureté souhaitée. Les chercheurs et les industriels développent un éventail de processus pour produire l'hydrogène de manière économiquement et écologiquement satisfaisante. Les voies les plus connues pour la production d'hydrogène [5], [6], [7], sont illustrées par la figure I.3.



Figure I. 3: Procédés de production de l'hydrogène

Dans ce qui suit, les différents procédés de production de l'hydrogène seront exposés.

I.1.1. Production de l'hydrogène à partir des combustibles fossiles

Actuellement, la production d'hydrogène à partir de carburants fossiles est la plus répandue. 48% de l'hydrogène mondiale sont produits à partir du gaz naturel, 30% du pétrole (la plupart du temps consommée dans les raffineries), 18% du charbon, et les 4% restants proviennent de l'électrolyse de l'eau (figure I.4) [8].



Figure I. 4: Les sources de production d'hydrogène [5]

La consommation mondiale d'énergie ne cesse de croître (figure I. 5). Néanmoins, l'utilisation des énergies fossiles dont les ressources s'amenuisent de plus en plus et de ce fait a une durée limitée, ne peut être envisagée à long terme [9].



Figure I. 5: Consommation d'énergie primaire dans le monde et prévisions [9]

De plus l'utilisation des ressources d'énergie fossile contribue d'une manière très considérable au réchauffement climatique à travers des émissions des gaz à effet de serre (GES). Les données préliminaires indiquent qu'en 2019, les émissions de CO_2 issues des énergies fossiles ont atteint le chiffre record de 38,0 Gt CO_2 (fourchette : \pm 1,9) (figure I. 6).



Figure I. 6: Emissions mondiales de GES [10]

Les technologies de production d'hydrogène à partir des énergies fossiles sont catégorisés en quatre processus principaux, le vaporeformage, l'oxydation partielle, le reformage autotherme et la gazéification du charbon. Les trois principales étapes mises en jeux lors de la production d'hydrogène à partir des ressources fossiles sont :

- La production du gaz de synthèse.

-La conversion du monoxyde de carbone en hydrogène (Water Gas Shift).

-La purification : obtention d'hydrogène à grande pureté [4].

I.1.1.1. Le vaporeformage

Le reformage à la vapeur consiste à transformer les charges légères d'hydrocarbures en gaz de synthèse (mélange H_2 , CO, CO₂, CH₄ et H_2 O), par réaction avec la vapeur d'eau, sur un catalyseur au nickel [11]. Cette transformation a lieu à haute température (840 à 920°C) et à pression modérée (de l'ordre de 20 à 30 bars) [12]. Le gaz naturel contient en majeure partie du méthane, mais également du CO₂ et du soufre. Ce dernier composant doit d'abord être éliminé avec la désulfuration [13].

Le procédé de vaporeformage porte alors sur le méthane purifié et l'opération s'effectue en deux étapes, la première concerne la réaction du méthane avec l'eau qui produit du CO et de l'hydrogène selon l'équation :

$$CH_4 + H_2O + chaleur \xrightarrow{Catalyseur} CO + 3H_2$$
 (I.1)

La seconde, dite « Water Gas Shift » (équation I. 2), a lieu entre le CO et l'eau [14], et conduit à un gaz constitué essentiellement de CO₂, H₂. Ces étapes sont suivies d'une purification du gaz (Pressure Swing Adsorption (PSA)) qui permet d'obtenir l'hydrogène pur à 99,99% [15], (figure I. 7).

$$CO+H_2O \xrightarrow{Catalyseur} CO_2+H_2$$
 +un peu de chaleur (I. 2)

La réaction complète s'écrit :

$$CH_4 + 2H_2O \longrightarrow CO_2 + 4H_2 \qquad (I. 3)$$

Cette réaction nécessite un apport de chaleur de l'ordre de 165 kJ. mol⁻¹. On peut mentionner également que le gaz de synthèse, après conversion du CO, contient en moyenne 16 à 25 % en volume de CO_2 [12].



Figure I. 7: Vaporéformage du gaz naturel

I.1.1.2. L'oxydation partielle

L'oxydation partielle peut être effectuée sur des combustibles fossiles plus ou moins lourds, allant du gaz naturel jusqu'au charbon. L'opération se fait à haute température (900 à 1500 °C) et sous pression élevée (20 à 60 bars), en présence d'oxygène en tant qu'oxydant et d'un modérateur de température (la vapeur d'eau) [11].

$$CH_4 + \frac{1}{2}O_2 \longrightarrow CO + 2H_2 + chaleur$$
 (I. 4)

En revanche, cette réaction se déroule généralement sans catalyseur et dégage une chaleur de l'ordre de 77 kJ. mol⁻¹ [16], qu'il faudra dissiper.

Cette réaction exothermique, peut également être réalisée à une plus basse température (de 850 °C environ), en présence de catalyseurs, si les taux de soufre et d'hydrocarbure, ne sont pas trop élevés. Puis, comme dans le cas du reformage à la vapeur on procède ensuite à la conversion du gaz de synthèse (selon l'équation I.2).

I.1.1.3. Le reformage autotherme

C'est une combinaison de l'oxydation partielle et du vaporeformage, le carburant étant mélangé avec de l'air et de l'eau. L'oxydation partielle étant exothermique, la chaleur dégagée est utilisée par le vaporeformage, (réaction endothermique) [4].

Dans ce procédé, le gaz naturel et l'oxygène sont mélangés à de la vapeur d'eau avant d'être préchauffés ; ils sont ensuite dirigés vers le réacteur (pression de 20 à 60 bars, température de 900 à 1100 °C, en présence d'un catalyseur à base de nickel), pour la production du gaz de synthèse [11]. La composition du gaz obtenu est de 68 % d'H₂, 20 % de CO, 10 % de CO₂ et des traces de CH₄ et N₂ [16].

I.1.1.4. La gazéification du charbon

Cette technique qui fut la source principale de production d'hydrogène avant le reformage, n'est utilisé aujourd'hui, qu'en Afrique du Sud et en Chine. En effet elle n'est intéressante que lorsque les prix du pétrole et du gaz sont trop élevés.

La gazéification est une transformation thermochimique d'un solide combustible (charbon, bois, paille, ...), en présence d'un composé gazeux (O_2 , air, CO_2 , vapeur d'eau...), à la température de 1000 °C et sous haute pression, ce qui permet d'obtenir un gaz contenant en majorité du CO et de l'hydrogène. Généralement le but de cette transformation est de convertir le solide en un mélange gazeux combustible. D'autres auteurs [17], la décrivent

comme étant une réaction endothermique hétérogène entre le carbone (C) contenu dans le solide et un gaz réactant qui peut être de la vapeur d'eau (H₂O) ou du dioxyde de carbone (CO_2) :

- Gazéification à la vapeur d'eau:
$$C+H_2O \Rightarrow CO+H_2$$
 (I. 5)

- Gazéification au dioxyde de carbone: $C+CO_2 \Rightarrow 2CO$ (I. 6)

I .1.2. Production d'hydrogène à partir de la biomasse

La production d'hydrogène à partir de la biomasse, ensemble de matières organiques d'organismes vivants de divers écosystèmes et des produits qui en dérivent, (bois, paille, bois de rebut, etc.), est un procédé qui suscite de plus en plus l'intérêt. De nombreuses voies peuvent être exploitées, parmi lesquelles :

I.1.2.1. Les voies thermochimiques

On distingue:

📥 La pyrolyse

Elle constitue une voie de conversion thermochimique de la biomasse, en vue de produire de l'hydrogène. Les techniques de traitement de la matière végétale sont semblables à celles qui sont utilisées pour les combustibles fossiles.

L'opération de pyrolyse consiste à chauffer de la biomasse, à une température de 650 à 800 K sous une pression comprise entre 0,1 et 0,5 MPa, en l'absence d'air, pour la convertir en huiles liquides, charbon solide et composés gazeux (H₂, CO, CO₂, hydrocarbures légers) (figure I.8) [18]. Les fractions de ces différents produits dépendent fortement des conditions opératoires (température, conditions de chauffage...). Deux types de pyrolyses se distinguent ainsi selon les conditions opératoires :

- Un procédé à faible température extérieure (environ 300 °C) et un temps de contact long entre les vapeurs primaires et le solide en décomposition favorise la production de charbon (environ 35 %), de condensables à hauteur de 35 % et de 30 % de gaz incondensables (surtout du CO₂ et un peu de CO, H₂ et hydrocarbures). On parle alors de *pyrolyse lente* ou de *carbonisation* ; - Une température extérieure et/ou une densité de flux de chaleur imposée élevées a pour effet de minimiser considérablement la formation de charbon en faveur des vapeurs et/ou des gaz selon le temps de séjour des vapeurs. On parle dans ce cas de *pyrolyse flash, rapide* ou *éclaire.*



Figure I. 8: Principe du procédé de pyrolyse de la biomasse [19]

Gazéification de la biomasse

La production d'hydrogène par gazéification de la biomasse suscite actuellement un grand intérêt. La biomasse peut être gazéifiée à des températures élevées (supérieures à 1000 K). Les particules de biomasse subissent une oxydation partielle entraînant une production de gaz et de charbon. Le charbon de bois est finalement réduit pour former du H₂, CO, CO₂ et CH₄. Ce processus de conversion est opéré selon :

Biomasse+chaleur+vapeur \rightarrow H₂+CO+CO₂+CH₄+hydrocarbures légers et lourds+ charbon de bois (I.8)

La gazéification de la biomasse solide est réalisée en présence d' O_2 et vise à produire des produits gazeux, contrairement à la pyrolyse qui produit des bio-huiles et du charbon de bois. Les gaz produits peuvent être réformés à la vapeur pour donner de l'hydrogène. Le processus de gazéification qui s'applique à la biomasse ayant une teneur en humidité inférieure à 35 % [20], peut être amélioré par des réactions de changement d'eau-gaz.

Le problème majeur que pose la gazéification de la biomasse réside dans le traitement de la formation de goudron qui se produit au cours du processus et qui peut provoquer la formation d'aérosols de goudron et de polymérisation dans une structure plus complexe. Ce qui n'est pas favorable à la production d'hydrogène par la transformation à la vapeur [18].

I.1.2.2. Les voies biologiques

La production d'hydrogène à partir de la biomasse par voie biologique peut être scindée en deux types:

 Les procédés directs, dans lesquels, la production de l'hydrogène se fait directement à partir de la biomasse (sans sous- produits intermédiaires), grâce à des activités microbiologiques.
Ces procédés dépendent de la présence des enzymes producteurs d'hydrogène, qui catalysent la réaction chimique (équation I.9) [21], [22].

 $2H^+ + 2e^- \longrightarrow H_2$ (I. 9)

- Les procédés indirects qui se font en deux étapes :

1) Production d'un biocarburant (reformat): bioéthanol, biométhanol, ETBE, biogaz...

2) Reformage (traitement) de ce biocarburant en vue de produire de l'hydrogène.

L'avantage des procédés indirects réside dans la bonne maîtrise des deux étapes mises en jeu. En effet, les technologies de production des biocarburants sont parfaitement maîtrisées et leurs procédés de fabrication sont répandus dans plusieurs pays du monde. D'autre part les techniques de reformage des biocarburants, en vue de produire de l'hydrogène, ont fait l'objet ces dernières années d'études très approfondies et sont actuellement bien maitrisées.

I.1.3. Production d'hydrogène à partir du nucléaire

L'énergie nucléaire issue de la fission est utilisée actuellement pour la production d'électricité. L'hydrogène peut également être produit directement à partir de l'énergie thermique libérée pendant la fission, avec un rendement proche de 55 % [23]. Par électrolyse, il est possible d'obtenir des rendements compris entre 20 et 40 % à basses températures (<200°C) et jusqu'à 50 % pour de hautes températures (1100 °C) [23].

Une autre alternative de la production de l'hydrogène par voie nucléaire, réside dans la combinaison de l'électrolyse de la vapeur d'eau à haute température avec un réacteur nucléaire [24]. Cette possibilité a été envisagée par le département de l'énergie atomique canadien (EACL) avec un réacteur nucléaire de quatrième génération CANDU de type ACR-1000 [25]. En effet, l'électrolyse de la vapeur utilise une combinaison de la chaleur et de l'électricité. L'électrolyseur conçu pour fonctionner à des températures allant de 600 °C à 1000 °C est

approvisionné en chaleur à partir d'un réacteur nucléaire qui garantit en même temps l'appoint électrique.

Des travaux de recherche [26] via les centrales nucléaires par l'utilisation des VHTR (Very High Temperature Reactor) (figure I.9) ou encore des GFR (Gas-Cooled Fast Reactor), encore en développement, mais prometteurs de par leur rendement théorique de plus de 50 % et leur capacité à produire de l'hydrogène.



Figure I. 9: Réacteur nucléaire à très haute température (VHTR) permettant la production d'hydrogène à grande échelle et simultanément de l'électricité [27].

I.1.4. Production d'hydrogène par électrolyse

L'électrolyse consiste à séparer l'eau (H_2O) en hydrogène (H_2) et oxygène (O_2), lors d'une réaction d'oxydo-réduction. A l'heure actuelle, ce procédé est réalisé à l'échelle industrielle en utilisant de l'énergie électrique. Cependant, au regard du coût de la production, seul 4 % de l'hydrogène sont produits par électrolyse, (dans les cas où l'électricité est bon marché ou lorsqu'une haute pureté d'hydrogène est nécessaire).

Du point de vue de la réaction électrochimique, il s'agit de la réaction inverse de celle qui a lieu dans une pile. L'électrolyse de l'eau consiste en fait en deux réactions chimiques ayant lieu séparément sur deux électrodes. L'une à la cathode, où il se produit la réduction de l'eau (équation I. 10) et l'autre au niveau de l'anode, où a lieu l'oxydation des ions hydroxydes, (équation I. 11).

$$2H_2O + 2e^- \rightarrow H_2 + 2OH^-$$
 (I. 10)

$$2OH^{-} \longrightarrow \frac{1}{2}O_{2}+H_{2}O+2e^{-}$$
 (I. 11)

Les électrons (e^{-}) intervenant dans les réactions sont apportés par le circuit électrique. Le schéma classique d'une cellule d'électrolyse est illustré par la figure I.10.



Figure I. 10: Principe de l'électrolyse

Il existe différents procédés de production de l' H_2 , selon la nature de l'électrolyte (milieu conducteur ionique entre les deux électrodes employé). Il peut être une solution aqueuse acide ou basique, une membrane polymère échangeuse de protons (identique à celle utilisée dans les piles à combustible de type PEMFC).

I.1.5. Les photoprocédés de production d'hydrogène

Nous pouvons citer :

I.1.5.1. La biophotolyse

Les organismes photosynthétiques, comme certaines algues vertes unicellulaires ou cyanobactéries, possèdent l'avantage de produire de l'hydrogène à partir de l'énergie solaire en utilisant l'eau comme donneur d'électrons et de protons sans dégagement de gaz à effet de serre (CO_2) inhérent aux autres organismes hétérotrophes. Dans ce cas, un procédé totalement propre basé sur la photosynthèse peut être envisagé, avec comme source d'énergie les deux plus importantes ressources de notre planète, l'eau et le soleil [28].

De nombreux espoirs résident dans le procédé photobiologique. Cependant, ce dernier devra pour être efficace, surmonter la limitation de la sensibilité des enzymes vis-à-vis de l'oxygène. Pour résoudre ce problème la recherche d'organismes naturels qui soient plus tolérants envers l'oxygène est en cours. Une autre solution pourrait être obtenue par la création de nouvelles formes génétiques d'organismes végétaux, qui puissent continuer à produire de l'hydrogène en présence d'oxygène. Un nouveau système de commutateur métabolique est également développé afin de créer un cycle entre une phase photosynthétique de croissance et une phase de production d'hydrogène [12].

I.1.5.2. La photo- électrolyse

La photo-électrolyse est une technique de dissociation de la molécule d'eau par rayonnement solaire et énergie électrique (figure I.11), qui sont convertis en énergie chimique. La conversion solaire se fait à travers le support d'un semi-conducteur qui facilite l'absorption des photons.



Figure I. 11: Représentation schématique du processus photo-électrochimique

La photo électrolyse de l'eau apparait, à l'évidence, comme un procédé simple et séduisant. Les travaux de recherche actuels portent sur l'amélioration de l'absorption lumineuse par divers procédés (modification de la structure du semi-conducteur, couplage avec des structures photosensible, séparation des zones de production d'hydrogène et d'oxygène, etc.) et les résultats actuels de laboratoire (rendement de l'ordre de 12 %), sont très encourageants.

Néanmoins ce procédé est en concurrence avec un système intégré couplant directement une photopile avec une cellule d'électrolyse, dont les résultats expérimentaux sont meilleurs actuellement [16].

I .2. Différents modes de stockage de l'hydrogène

Pour le stockage de l'hydrogène, trois grandes familles sont recensées dans la littérature, les voies solide, liquide et gazeuse. Ces trois méthodes de stockage différent par leurs densités volumiques et gravimétriques, par leurs aspects sécuritaires et par leurs coûts. Les différents modes présentent chacun, leurs avantages et leurs inconvénients selon des critères économiques, énergétiques, de capacités massique et volumique [29].

Les capacités volumiques de stockage présentées par ces différentes méthodes sont représentées sur la figure I.12, qui met clairement en évidence d'une part la faiblesse du stockage sous pression et d'autre part la force du stockage solide dans les hydrures métalliques.



Figure I. 12: Capacités volumiques des différents modes de stockage de l'hydrogène [30]

Le stockage à l'état gazeux sous pression présente de nombreux avantages quand les quantités mises en jeu ne dépassent pas quelques kilogrammes ou dizaines de kilogrammes. C'est le cas, en particulier, des véhicules automobiles pour lesquels on vise une autonomie de l'ordre de 400 à 500 km, parfois même moins, pour des usages essentiellement urbains [31].

Nous exposerons dans ce qui suit, les différents modes de stockage de l'hydrogène

I.2.1. Stockage gazeux

La voie gazeuse est la plus simple et la plus répandue des technologies de stockage. L'hydrogène est contenu dans des réservoirs sous pression, la quantité d'hydrogène stocké est d'autant plus grande que la pression est plus élevée. Les réservoirs développés actuellement fonctionnent avec des pressions maximales de l'ordre de 300-350 bar (30-35 MPa) voire 480 bar. Des travaux sont menés dans l'objectif de concevoir des réservoirs gazeux sous une pression de 700 bar, afin d'améliorer la capacité volumique, principal inconvénient de cette technologie.

Le stockage sous pression de l'hydrogène pour les applications automobiles est réalisé à 35 MPa (une densité de l'hydrogène de 24 kg/m³, soit 2882 MJ/m³) ou à 70 MPa (une densité de l'hydrogène de 40,8 kg/m³, soit 4900 MJ/m³). Les deux fonctions essentielles que doivent assurer les réservoirs, généralement de forme cylindrique, sont l'étanchéité et la tenue mécanique. Pour la première, une vessie interne (le « liner ») métallique (réservoirs dits de type III), ou polymère (réservoirs dits de type IV) est utilisée. La fonction de tenue mécanique est qu'à elle assurée, par le bobinage d'un matériau composite constitué généralement d'une matrice polymère thermodurcissable et de fibres de carbone [32], [33].

Un système de stockage complet d'hydrogène à 70 MPa, a été développé par la société Quantum (figure I.13). De nombreux constructeurs automobiles (General Motors, PSA, Ford, Daimler, Honda, Toyota...) ont développé des véhicules prototypes, équipés de systèmes de stockage d'hydrogène sous pression. Une représentation schématique de l'intégration du système Quantum, dans un véhicule prototype, développé par General Motors, est illustrée par la figure I.14.



Figure I. 13: Système de stockage d'hydrogène à 70 MPa développé par la société Quantum (capacité de stockage de ce système est de 3.1 kg) [34].



Figure I. 14 : Véhicule «HydroGen3 Compressed 700» développé par General Motors [35]

Cette technique présente néanmoins des inconvénients dont les principaux sont, (i) la faible densité volumétrique, (ii) la nécessité de concevoir des réservoirs résistants aux chocs et adaptables aux véhicules pour les applications embarquées et (iii) la consommation d'énergie importante liée à la compression [29].

I .2.1.1. Les réservoirs adaptés au stockage par compression

Les technologies actuelles permettent d'atteindre des pressions de service de 350 bars à 700 bars. Les réservoirs utilisés dits "hyperbares" sont classés en quatre catégories (tableau I.1).

Type I	Réservoir cylindrique en métal.		
Type II	Réservoir contenant une enveloppe de métal pour la tenue mécanique, frettée par des fibres continues imprégnées de résine.		
Type III	Réservoir constitué d'une enveloppe de métal pour contenir l'hydrogène et d'une enveloppe de fibres continues imprégnées de résine pour la tenue mécanique.		
Type IV	Réservoir constitué d'une enveloppe non métallique pour contenir l'hydrogène et d'une enveloppe de fibres continues imprégnées de résine pour la tenue mécanique.		

Туре	I	П	III	IV
Schéma				
Réalisation				

Tableau I. 1 : Différents types de réservoirs gazeux [26], [36]

Le système de stockage le plus léger et le plus perfectionné dans le cas du gaz comprimé est un réservoir, en composite utilisant un liner axial, ne supportant pas la charge, métallique (Type III) ou plastique (Type IV) et enveloppé circulairement de filaments continus imprégnés de résine. Sa structure utilise deux composants fondamentaux, le liner, qui sert essentiellement de barrière de perméation (écoulement d'un fluide dans les milieux poreux) à l'hydrogène et l'élément composite qui assure l'intégrité mécanique du réservoir [37]. Aujourd'hui, les réservoirs en composite de Type IV (figure I. 15), représentent le moyen à plus fort potentiel pour le stockage de l'hydrogène à des pressions de service très élevées. Les réservoirs bobinés en composite de type IV sont devenus compétitifs par rapport aux réservoirs conventionnellement utilisés, et l'emploi de structures composites bobinées épaisses permet d'obtenir des pressions à rupture de l'ordre de 2000 bar (ce qui correspond à trois fois la pression de service), qui ne peuvent pas être atteintes avec des solutions de types I, II ou III.



Figure I. 15: Réservoir haute pression (95L/700bars) type IV (poids 85 kg), réalisé par « Stelia composites » (salon du JEC 2013) [38]

I.2.1.2. Principe de la compression

L'hydrogène utilisé sous forme gazeuse, doit être généralement comprimé à une pression élevée, ce qui nécessite évidemment un travail. Le calcul précis de ce dernier implique forcément la connaissance d'une équation d'état et d'une équation calorifique. Pour surmonter cet obstacle et simplifier les calculs, de nombreux chercheurs considèrent la compression de l'hydrogène comme un processus isentropique (pas d'échange de chaleur entre le compresseur et l'environnement et processus réversible) pendant la compression. Le travail requis pour augmenter la pression du gaz est alors calculée par la relation usuelle:

$$W = \int_{V_1}^{V_2} P dV$$
 (I. 12)

Si de plus l'hydrogène est supposé se comporter comme un gaz idéal, le travail d'une mole (soit 2,02 g), de la pression P_1 à la pression P_2 ($P_1 < P_2$) est donné par:

$$W_{\Delta S \to 0, id\acute{e}al} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} R T_1 \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma - 1}{\gamma}} - 1 \right]$$
(I. 13)

 T_1 étant la température de l'hydrogène à P_1 et γ le rapport des chaleurs spécifiques du gaz (C_p/C_v) , supposées être indépendantes de la température, (γ =1,4).

Or, le processus est irréversible, et travail réel de compression a pour expression :

$$W_{r\acute{e}el} = \frac{W_{\Delta S \to 0}}{\eta_{adiabatique}} \tag{I. 14}$$

η_{adiabatique} étant l'efficacité adiabatique du processus (de l'ordre de 75-85 %) [39].

Dans la réalité l'hydrogène ne se comporte pas comme un gaz idéal, à haute pression et de plus le processus est irréversible, les considérations susmentionnées peuvent par conséquent induire des erreurs importantes.

Une autre simplification qui consiste à supposer l'ensemble du processus de compression isotherme pourrait être adoptée pour le calcul du travail de compression de l'hydrogène (la température de l'hydrogène, T, demeure constante pendant la compression).

En utilisant les équations d'état des gaz parfait et réel (pour une mole), le travail de compression est alors :

(a) Pour un gaz parfait:

$$W_{isotherme, idéal} = RTln \frac{V_2}{V_1}$$
(I. 15)

(b) Pour un gaz réel (équation de Van Der Waals) [40] :

$$W_{isotherme, idéal} = RT ln \frac{V_2 - b}{V_1 - b} + \frac{\alpha}{V_2} - \frac{\alpha}{V_1}$$
(I. 16)

(c) Pour un gaz compressible (facteur Z):

$$W_{isotherme,Z} = ZRT ln \frac{V_2}{V_1}$$
(I. 17)

La relation entre le travail de compression et la pression finale (décharge) n'est pas linéaire, mais parabolique. Par conséquent, le travail requis pour comprimer de l'hydrogène par une augmentation donnée de la pression dépend de la pression initiale (aspiration). Ainsi, la demande d'énergie pour la compression est d'autant faible que la pression de l'aspiration est plus élevée.

En d'autres termes, il faut beaucoup moins d'énergie pour augmenter la pression de l'hydrogène de 350 bars à 700 bars, que, de la pression atmosphérique à 350 bars. Cette relation entre le travail et la pression met en évidence l'avantage de l'efficacité énergétique donnée par les méthodes de production d'hydrogène qui fournissent de l'hydrogène à des pressions élevées, tels que les électrolyseurs sous pression et les reformeurs.

Dans la réalité [41], la compression d'un gaz n'est ni rigoureusement isotherme, ni isenthalpique, évolutions qui conduisent respectivement aux dépenses minimale et maximale de travail. En pratique la transformation est considérée polytropique réversible, PV^n =constante, ou n est le coefficient polytropique, qui dépend essentiellement de la nature du gaz (si n>Ý, la chaleur est fournie au gaz, dans le cas contraire, n<Ý, la chaleur est cédée par le gaz).

Le travail de compression polytropique d'une mole d'hydrogène d'une pression d'aspiration P_1 , à une pression de décharge P_2 est donné par:

$$W_{polytropique} = \frac{n}{n-1} RT_1 \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{n-1}{n}} - 1 \right]$$
(I. 18)

Comme dans le cas d'une compression isentropique (équation I.13), le travail réel de la compression est supérieur à celui calculé selon l'équation I. 18. Le travail réel peut être calculé lorsque la valeur de l'efficacité polytropique du processus, η_p , est connue. L'efficacité polytropique est souvent l'efficacité rapportée par les fournisseurs d'équipement et peut être utilisée pour relier l'indice polytropique (n), au rapport des chaleurs spécifiques (γ) [42]:

$$n = \frac{\eta_P \gamma}{1 + \eta_P \gamma - \gamma} et \frac{n}{n-1} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \eta_P \tag{I. 19}$$

Comme le montre la figure I.16, le travail requis pour la compression isotherme est inférieur à celui de la compression isentropique (ou polytropique), pour un taux de compression et une pression initiale donnés. Cependant, comme la compression de
(I. 20)

l'hydrogène est un processus polytroptique, la température du gaz varie pendant le processus de T_1 à T_2 selon l'équation:

 $T_2 = T_1 \left(\frac{P_2}{P_1}\right)^{\frac{n-1}{n}}$

- Condition isothermes ($\Delta T = 0$), l'hydrogène est considéré comme un gaz parfait.
- Un gaz de Van des Waals.
- Un gaz compressible en utilisant le facteur Z.
- Compression adiabatique (Q=0) en considérant que l'hydrogène est un gaz parfait

[43].

Dans le cas du stockage gazeux, il a été noté que pendant la phase de remplissage rapide, il y avait tout d'abord une augmentation des contraintes mécaniques dues à l'accroissement de la pression interne du réservoir en même temps, qu'une augmentation de la température de l'hydrogène gazeux. Pour approfondir la question, différentes études sur l'augmentation de la température de l'hydrogène ont été menées. Pour ce faire, l'influence de différents paramètres a été examinée en mesurant l'évolution de la température du gaz dans le réservoir à l'aide d'un réseau de thermocouples. Des mesures expérimentales qui ont permis de valider des modèles qui prédisent ces évolutions de température ont été réalisées. Nous présentons dans ce qui suit quelques travaux recensés dans la littérature.

I .2.1.3. Travaux sur l'évolution de la température de l'hydrogène dans un réservoir

Pour éviter une montée rapide de la température de l'hydrogène, Dicken et Merida [44], [45] ont réalisé des études expérimentales et numériques sur les effets du temps de remplissage et de la masse initiale, sur la distribution de température dans les réservoirs d'hydrogène à haute pression lors du ravitaillement. A l'aide d'outils de simulation expérimentaux et numériques, les auteurs démontrent que la connaissance de la répartition spatiale de la température lors de la compression est très importante pour identifier la marge disponible à partir d'une température maximale admissible dans le réservoir. Leurs résultats ont montré que des temps de remplissage plus longs ont produit des températures de gaz moyennes finales plus basses (par rapport à des remplissages plus courts) et un champ de température avec une stratification verticale significative due aux forces de flottabilité à des vitesses d'entrée de gaz plus faibles. En outre, la température la plus basse se situait à l'entrée des cylindres.

Liu et al. [46] et Lei et al. [47] ont examiné l'impact du taux de remplissage massique, de la pression initial et de la température ambiante sur l'augmentation et la distribution de la température à l'aide d'outils expérimentaux et de simulation. Les auteurs ont noté que l'élévation de la température maximale croit avec l'augmentation du taux de remplissage massique et de la température ambiante, et diminue lorsque la pression initiale augmente. Une formule empirique est obtenue en ajustant des résultats numériques et des méthodes efficaces de contrôle de la température.

Q. Li et al. [48] ont étudié l'effet de différents rapports longueur/diamètre, diamètres d'entrée des cylindres et types de débits massiques sur l'élévation et la distribution de la température. Les résultats de simulation obtenus, ont révélé que l'élévation de température à l'intérieur du cylindre avec un rapport longueur/diamètre plus grand est plus élevée qu'avec un plus petit. Les auteurs ont également noté qu'un diamètre d'entrée plus grand peut limiter l'augmentation de la température. De plus, la comparaison des résultats des simulations pour des débits massiques constants, croissant et décroissant, montre que le ravitaillement avec un débit croissant conduit à la plus faible élévation de température.

Zheng et al [49] ont développé un système bien adapté pour le ravitaillement en hydrogène de 70 MPa. Plusieurs expériences sur un cylindre de type III, ont été menées pour étudier l'échauffement lors du processus de ravitaillement. Les résultats expérimentaux ont montré que le gaz dans la région caudale atteint l'élévation de température maximale. Un modèle de dynamique des fluides numérique (CFD) a également été validé par des résultats expérimentaux. Les effets de la pression initiale et de la température ambiante sur l'élévation de température ont été étudiés à l'aide de ce modèle. Les résultats obtenus montrent qu'avec l'augmentation de la pression initiale et la diminution de la température ambiante, la température finale du gaz diminue quasi linéairement.

Deymi-Dashtebayaz et al. [50] ont effectué une simulation numérique pour prédire le rapport de transfert de chaleur entre le flux à l'intérieur du cylindre et le mur. Les auteurs ont également développé un modèle thermodynamique pour prédire les changements transitoires de température pendant le remplissage. Ils ont démontré qu'une partie importante (qui peut atteindre jusqu'à 60 kW) de la dispersion de chaleur du flux dans le cylindre est stockée dans la paroi du cylindre. De plus, leurs résultats ont révélé que les températures ambiantes affectent significativement le processus de remplissage pendant le ravitaillement et, particulièrement la température finale dans le cylindre.

Cheng et al. [51] ont estimé la température finale de l'hydrogène dans des réservoirs de 35 MPa et de 70 MPa, par une solution analytique du modèle thermodynamique. Les résultats obtenus peuvent être utilisés pour connaître la relation entre les températures finales de l'hydrogène et les conditions de ravitaillement, ainsi que, pour contrôler le processus de ravitaillement afin d'assurer une température maximale en dessous de 85 °C.

Wang [52] a proposé une solution de remplissage efficace (remplissage à froid) pour réduire l'élévation de la température maximale. Le pré-refroidissement à l'hydrogène s'est avéré être une solution efficace pour réduire la température maximale.

Kim et al [53] ont entrepris une série d'expériences pour quantifier le changement de température dans le cylindre pendant le remplissage d'hydrogène à 35 MPa. Une analyse de dynamique des fluides numérique (CFD) a également été menée pour simuler les conditions des expériences. Les résultats prédits par l'analyse CFD montrent un accord raisonnable avec les expériences menées. L'écart entre les résultats CFD et expérimentaux diminue avec des pressions initiales de gaz plus élevées. Les parties supérieure et inférieure du récipient présentaient une différence de température dans le sens vertical. La température supérieure des gaz était plus élevée que celle de la partie inférieure en raison de l'effet de flottabilité dans le réservoir. La température maximale du gaz était supérieure à celle autorisée dans le code de sécurité ISO (85°C) pour le cas où le récipient était pressurisé de 0 MPa à 35 MPa.

I.2.2. Stockage liquide

Le diagramme de phase de l'hydrogène (figure I.17) montre clairement que l'hydrogène liquide ne peut être obtenu que dans un domaine de température compris entre 10 K et 30 K et un intervalle de pressions de 0.01 à 10 MPa [54]. Partant d'hydrogène obtenu par reformage à 300 K et 2 MPa, la technique de liquéfaction consiste à refroidir l'hydrogène à pression quasiconstante avant de le détendre à pression atmosphérique pour le stockage [55].



Figure I. 17: Diagramme de phases de l'hydrogène [56]

> Principe de la liquéfaction de l'hydrogène

La méthode de liquéfaction la plus simple est le cycle de Linde pré-refroidi également appelé cycle de Joule-Thomson. Initialement, le gaz est comprimé à température ambiante, puis refroidi, à 80 K, par un flux à contre-courant d'azote liquide (figure I. 18) [37], [57]. Pour une pression de travail donnée, la réduction de température doit permettre d'atteindre la température d'inversion en deçà de laquelle une détente adiabatique conduit à une diminution de la température. Finalement, le gaz comprimé et refroidi passe au travers d'une vanne d'étranglement ou détendeur mécanique où une détente isenthalpique a lieu jusqu'à la pression ambiante en produisant de l'hydrogène liquide. L'hydrogène liquide est soustrait et le gaz frais est renvoyé au compresseur via les échangeurs de chaleur.



Figure I. 18: Cycle de Linde pré-refroidi à l'azote liquide [58]

Les avantages de ce mode de stockage sont, (i) le réservoir nécessite moins d'espace qu'un réservoir sous pression (si l'on optimise les échanges); (ii) le remplissage est une technologie maîtrisée avec des stations-services spécialisées existantes (développées avec l'aide de l'industrie spatiale qui est la principale utilisatrice). Par contre, les problèmes majeurs de la liquéfaction sont, (i) la nécessité d'utiliser des cryostats à forte isolation thermique, (ii) le phénomène de *boil-off* (évaporation par échauffement) et (iii) la très grande consommation d'énergie liée à la liquéfaction (de 25 à presque 100 % du PCI « Pouvoir calorifique inférieur») [29], [59].

Un réservoir d'hydrogène liquide développé par BWM (série hydrogène 7) [26] est illustré par la figure I.19.



Figure I. 19:Véhicule développé par BWM (série hydrogène 7) équipé d'un système de stockage d'hydrogène liquide disposé dans le coffre [26]

I.2.3. Stockage solide

Contrairement aux méthodes précédentes, couramment utilisées, le stockage de l'hydrogène sous forme d'hôte dans des matériaux solides est encore peu répandu. Parmi ces matériaux, on distingue ceux dans lesquels l'hydrogène est adsorbé (sans dissociation de la liaison H–H), et ceux dans lesquels il est absorbé (la liaison H–H est rompue) [60].

I.2.3.1. Adsorption sur les matériaux carbonés

Certains matériaux carbonés sont structurés de telle manière qu'ils présentent de nombreux pores, offrant ainsi une surface spécifique (surface par gramme de matière) élevée, sur laquelle les molécules d'hydrogène pourront venir s'adsorber (figure I.20). Les réseaux organométalliques nanoporeux (MOF, pour Metal- Organic Framework) présentent des propriétés similaires vis-à-vis de l'hydrogène. Ainsi, et du fait de la faible masse du matériau hôte, des capacités massiques élevées peuvent être atteintes. Néanmoins, la densité de l'hydrogène ainsi stocké ne peut dépasser celle de l'hydrogène liquide. Ce mode de stockage est plus efficace à basse température, car l'agitation thermique y est réduite, ce qui augmente la densité des atomes d'hydrogène au voisinage des parois des pores. Le gain de capacité de stockage est ainsi de l'ordre de 100 % à 77 K et de 50 % à 150 K.



Figure I. 20: Adsorption d'hydrogène [61]

Les systèmes poreux comparés aux milieux gazeux et liquides offrent l'avantage d'une pression de stockage plus faible, d'une sécurité accrue, d'une flexibilité de conception et efficacité de stockage volumétrique raisonnables. Cependant, il n'existe pas encore de solution à court terme aux problèmes de coût, de poids et de gestion de la thermique associée à cette option. Sans être exhaustif parmi les matériaux de cette catégorie, nous pouvons citer:

• Les matériaux à base de carbone, les nanotubes (cylindres de graphite), dans lesquels le stockage est avantageux à 150 K et 50 bar, mais dont le gain n'est pas significatif à la

température de 293 K et sous la pression de 200 bar, les nanofibres, les charbons actifs, les fibres activées, les poudres, les charbons dopés et les alliages de nitrure de bore cubique,

• Les polymères, les zéolites, les silicas (aérogels) et le silicium poreux.

I .2.3.2. Absorption sur des hydrures métalliques

Une autre méthode de stockage de l'hydrogène, dite absorption, est fondée sur la formation d'hydrures métalliques solides. L'hydrogène moléculaire est absorbé en effet dans une large variété de métaux et d'alliages métalliques. Cette absorption résulte de la combinaison chimique réversible de l'hydrogène avec les atomes composant ces matériaux, (liaison dite métallique) (figure I.21). Les composés ainsi formés sont appelés hydrures métalliques [62], [63].

Un hydrure métallique classique de formule générique A_xB_y est composé de deux éléments. L'élément A est habituellement une terre rare ou un métal alcalino-terreux et tend à former un hydrure stable. L'élément B souvent un métal de transition, forme seulement des hydrures instables. Le nickel est souvent utilisé comme élément B, car il est un excellent catalyseur de la dissociation de l'hydrogène [37].



Figure I. 21: Réaction de l'hydrogène avec le métal : dissociation de l'hydrogène en surface, diffusion dans le métal et formation de l'hydrure métallique [64]

L'intérêt d'utiliser les hydrures métalliques pour stocker l'hydrogène est de minimiser le risque de manipuler de grandes quantités de cet élément très réactif. Cette méthode a comme autres avantages le fait que les pressions mises en jeu, à température ambiante, sont relativement faibles et que l'hydrogène obtenu est très pur. Parmi les inconvénients de ce mode, nous pouvons citer, (i) la capacité encore limitée, (ii) la cinétique de remplissage lente à basse température, (iii) le coût élevé pour certains métaux (V, Zr, terres rares...).

Composés métalliques	P (bar)	T (K)	$\operatorname{Cm}^{1}(\%)$	Hydrure formé
LaNi ₅	1.7	298	1.4	LaNi ₅ H ₆
ZrV ₂	1E-8	323	3.0	$ZrV_2H_{5,5}$
TiFe	5	303	1.9	TiFeH ₂
Mg ₂ Ni	1	555	3.6	Mg ₂ NiH ₄

Une comparaison des conditions d'hydruration de différents composés métalliques est présentée dans le tableau I. 2.

Tableau I. 2: Conditions d'hydruration de différents composés métalliques [30]

I.2.4. Stockage hybride

I.2.4.1. Projet Solhy

Dans ce projet qui a regroupé trois laboratoires, (FEMTO-ST DMA², ICMPE³, LEMTA⁴), l'idée a été d'associer une couche de composé intermétallique à un réservoir de stockage gazeux de type III (figure I.22). Ce composé joue le double rôle de capteur d'hydrogène en termes de la détection et de l'emprisonnement [36]. En cas de fuite ou d'amorce de fissure du liner métallique (ou polymère), l'hydrogène libéré serait capté par un composé intermétallique qui l'absorberait facilement mais ne le désorberait que difficilement (figure I.23).

L'absorption étant liée à une transformation de phase exothermique, de la chaleur serait alors dégagée en cas de fuite. Placer des capteurs de température sur la surface du réservoir permettrait ainsi de prévenir l'utilisateur de l'altération du réservoir. De plus, la dilatation volumique associée à la transformation de phase pourrait permettre de refermer la fissure. Cependant, les limites du système sont imposées par la capacité de l'intermétallique à absorber l'hydrogène avant que ce dernier ne l'ait traversé totalement par diffusion.

¹Capacité massique

²Institut FEMTO-ST, Département de Mécanique Appliquée, 24 rue de l'Épitaphe 25000 BESANÇON

³Institut de Chimie et des Matériaux de Paris Est, Bât. F, 2-8, rue Henri Dunant, 94320 THIAIS

⁴Laboratoire d'Énergétique et de Mécanique Théorique et Appliquée, 2 avenue de la Forêt de Haye, 54504VANDOEUVRE LÉS NANCY



Figure I. 22: Projet Solhy : schéma de principe [36]



I .2.4.2. Stockage des hydrures sous haute pression gazeuse

Fort du grand succès de sa voiture hybride Prius (essence-électrique), le constructeur automobile Toyota mise à long terme sur un réservoir hybride alliant stockages solide dans des composés intermétalliques et gazeux avec forte pression d'hydrogène (figure I.24).

Les avantages de la solution hybride, comparativement aux technologies gazeuse ou solide sont consignés dans le tableau I. 3. Cependant, la solution hybride cumule les inconvénients des deux technologies, à savoir le problème de la sécurité lié à la pression élevée et celui du poids. Les avantages de légèreté de la solution gazeuse et de sécurité de la solution solide sont contrebalançaient par les contraintes cités précédemment et ne suffisent plus.





Figure I. 24: Solution hybride développée par Toyota [26]

Réservoir	MH Basse Pression	Haute Pression	MH Haute Pression		
Capacité de stockage	3.5 kg/120 L	3 kg/180 L	7.3 kg/180 L		
d'hydrogène					
Poids du réservoir	300 kg	<100 kg	420 kg		
Rapport massique	1.16 %	<3 %	1.74 %		
	30 min -1 h avec un		5 min/80 % égales au		
Temps de remplissage	système de	5-10 min	réservoir haute pression		
	refroidissement		sans système de		
	externe		refroidissement		
Restitution de	Impossible à basse				
l'hydrogène à basse	température	Possible	Possible même à 243 K		
température					
Sécurité	Basse pression	Haute pression	Haute pression		
	(<10 bar)	(350 bar)	(350 bar)		

 Tableau I.3 : Principales caractéristiques des stockages solide, gazeux et hybride

 (solide/gazeux) [26]

I.3. Les technologies d'utilisation de l'hydrogène comme carburant

Pour les applications mobiles, deux voies se présentent principalement pour l'utilisation de l'hydrogène comme vecteur d'énergie, le moteur à combustion interne et la pile à combustible.

I.3.1. Combustion interne

Le moteur à combustion interne (MCI) est le moteur à pistons qui équipe depuis des décennies toutes les voitures. La technologie est maîtrisée et s'adapte à différents carburants gazeux (gaz naturel, GPL), ainsi qu'à l'hydrogène.

Les moteurs à combustion interne à hydrogène sont en moyenne 20 % plus efficaces que les moteurs à essence similaires [65].

Les inconvénients de la combustion interne résident dans le rendement limité par le cycle de Carnot (30 -35 %) et la formation d'oxydes d'azote, non désirable [66].

I .3.2. Pile à combustible

Découverte en 1839, par le physicien anglais William Grove, la pile à combustible a été reprise en 1960 par la NASA, qui a commencé à l'utiliser pour alimenter en électricité ses véhicules spatiaux. Ce dispositif transforme l'énergie chimique en électricité, par un processus d'oxydation qui ne dégage que de l'eau (figure I. 25).



Figure I. 25: Schéma de fonctionnement de la pile à combustible (PEMFC) [67]

La réaction se produit au sein d'une structure composée de l'anode (qui reçoit l'hydrogène) et de la cathode (recevant l'oxygène de l'air), séparées par un électrolyte (matériau qui permet le passage des ions).

Le rendement électrique d'une pile à combustible est de l'ordre de 50 %, et promet de s'améliorer grâce à la recherche et au développement.

Une grande partie de l'énergie se dégage sous forme de chaleur qui peut être réutilisée (figure I.26) pour libérer l'hydrogène du réservoir (désorption par élévation de la température dans les CIMs) ou pour participer à un phénomène de co-génération (production conjointe d'électricité et de chaleur), portant le rendement global d'une telle installation à 80, voire 90 % [57].



Figure I. 26 : Couplage thermique entre la pile à combustible et le réservoir [68]

De nombreuses applications ont vu le jour, parmi elles nous pouvons citer le prototype de vélo VAE Gitane Alter Bike [69], proposé par un groupe français de trois entreprises (Cycleurope, Pragma Industries et Ventec) qui vient de commercialiser un vélo alimenté à hydrogène. Ce type de vélo fonctionne grâce à des minis cartouches d'hydrogène (faciles à changer, entièrement recyclable) avec une autonomie de 20 km environ pour chaque cartouche (figure I.27). Dans ce cas, l'hydrogène est stocké sous forme de borohydrures.



Figure I. 27: Premier vélo électrique à hydrogène (VAE Gitane Alter Bike) [69]

Conclusion

Dans ce premier chapitre et afin de donner un aperçu assez large sur la filière hydrogène, de la production à l'utilisation, une étude bibliographique en rapport avec ce sujet a été menée. Cette investigation a permis de noter que les résultats obtenus jusqu'à maintenant étaient controversés sur un certain nombre d'aspects, à savoir (1) l'H₂ peut être produit et converti en électricité avec de hauts rendements ; (2) c'est un combustible renouvelable, ou plus exactement recyclable, si l'on considère le cycle parfait de l'hydrogène ; (3) il respecte l'environnement car son utilisation avec une pile à combustible génère moins de polluant ou de gaz à effet de serre que les autres carburants ; (4) il peut être stocké sous forme gazeuse (ce qui est pratique pour les stockages à grande échelle), sous forme liquide (transports aériens et spatiaux).

Cependant, la problématique du stockage reste encore un frein à l'utilisation de l'hydrogène. Les technologies mises en œuvre jusqu'à maintenant pour la résoudre, présentent des avantages dans certaines conditions et des limites dans d'autres. Le champ d'investigation reste largement ouvert. Il est à noter cependant que le stockage hyperbare de l'hydrogène gazeux (H₂) contenu dans des réservoirs sous pression, est aujourd'hui la voie la plus mature, la plus simple et la plus répandue de toutes les technologies de stockage.

Chapitre II ~ Le gaz naturel

Introduction

Le gaz naturel est un mélange gazeux, composé principalement de méthane (85-95 %), avec des quantités mineures d'éthane, d'autres hydrocarbures plus lourds, d'azote et de dioxyde de carbone, provenant d'accumulations souterraines de gaz seuls ou de gaz associés au pétrole [70], [71].

C'est la source d'énergie fossile qui a connu depuis les années 70, la plus forte progression. Actuellement, elle représente le cinquième de la consommation énergétique mondiale. Pour beaucoup de pays, le gaz naturel devient de plus en plus attractif, en raison de ses avantages économiques.

Ce combustible peut être utilisé dans tous les secteurs de l'énergie. Son domaine d'applications industrielles est très vaste, production de plastiques, produits chimiques et engrais, dans les industries du fer et de l'acier, des minéraux non métalliques, de l'alimentaire, du tabac, du papier, de l'imprimerie, de même que dans le secteur producteur d'énergie [70]. L'emploi du gaz naturel dans le secteur résidentiel et celui des services commerciaux et publics, pour le chauffage et la cuisine, ne cesse d'augmenter significativement dans de très nombreux pays [72], pour répondre aux besoins énergétiques croissants dans le monde et aux préoccupations concernant l'environnement (figure II.1).



Figure II. 1: Répartition de l'approvisionnement en énergie primaire totale mondiale par carburant [73]

II.1. Réserves de gaz naturel

II.1.1. Dans le monde

Les réserves mondiales prouvées de gaz naturel (figure II. 2), sont réparties dans le monde de manière très hétérogène. La majeure partie des réserves de gaz naturel est concentré dans le Moyen-Orient qui capitalise à lui seul près de 48.3 % des réserves de gaz (Iran 17.1 %, Qatar13.1 %, Arabie Saoudite 3.2 %). Les pays de l'Afrique dont le Nigéria et l'Algérie, recèlent 7.2 % des réserves mondiales prouvées de gaz naturel. Les réserves les plus importantes sont situées en Russie (tableau II. 1) [74].

Pays	Réserves de gaz naturel (en	Part des réserves	
	milliers de milliards de m ³)	mondiales	
1. Russie	37,4	19,90 %	
2. Iran	32,1	17,1 %	
3. Qatar	24,7	13,1 %	
4. Turkménistan	13,6	7,2 %	
5. États-Unis	12,6	6,7 %	
6. Chine	8,4	4,5 %	
7. Venezuela	6,3	3,3 %	
8. Arabie Saoudite	6	3,2 %	
9. Émirats arabes unis	5,9	3,2 %	
10. Nigéria	5,5	2,9 %	

Tableau II. 1: Réserves de gaz naturel conventionnel des dix premiers pays [74]



Figure II. 2: Répartition des réserves prouvées en 2010 et 2020 [74]

Il a été recensé que seuls 40% de gaz naturel, des 70 % des réserves mondiales de gaz ''onshore'', sont facilement exploitables (pression suffisante pour une extraction du gaz sans apport d'énergie) (figure II.3). Le reste (environ 28%) est constitué de gisements ''offshore'' [75].



Figure II. 3: Gisements de gaz naturel onshore et offshore dans le monde.

II.1.2. En Algérie

II.1.2.1. Réserves gazières

Le territoire algérien recèle d'immenses réserves de gaz naturel, dont les plus importantes sont celles des champs de HASSIR'MEL, considéré le plus grand à l'échelle mondiale, et de AIN-SALAH.

La première découverte d'hydrocarbures en Algérie, fut celle du gaz du bassin de l'Ahnet en 1954, dont les réserves estimées à 100 Milliards de m³, ne seront pas exploitées de suite, faute de débouchés commerciaux. Dans la même période, de larges concentrations de gaz seront également identifiées, à IN SALAH (400 km du bassin d'Ahnet), leur exploitation a été jugée à l'époque non économique. Les contraintes de transport sur de longues distances et l'absence de marché à l'époque, n'avaient pas donné de place au gaz, dans l'industrie pétrolière algérienne.

En Novembre 1956, fut découvert le champ "Hassi R'mel" considéré comme l'un des plus grands, voire le plus grand champ de gaz au monde en ces temps, avec une capacité de réserves initiale estimée à 200 Milliards de m³. De plus, ce gaz de haute qualité (GNL) constitue une matière première très prisée par la pétrochimie. Cette découverte fut suivie de beaucoup d'autres situées au Sahara Algérien, tels que les gisements de Tin Fouyé Tabankort (TFT) en 1960, d'Alrar en 1961, de Rhoude Nouss en 1962, de Tiggentourine en 1960 etc.

Cependant, seuls deux gisements entreront en production au cours de la décennie soixante (Hassi R'Mel en 1961 et Alrar en 1965), suivi timidement par (TFT) puis Ahnet en 2004 (tableau II. 2) [76].

Années	1 ^{ere} découverte du	Réserves initiales	1 ^{ere} production du
Régions	gaz		gaz
Ahnet (In salah)	1954	100 Millardsde m ³	2004
In salah	1956	-	2004
Hassi R'mel	1956	2000 Millards de m^3	1961 et 1964
Tin Fouyé Tabankort	1960	110 Millards de m ³	1963 et 1999
(TFT)			
GassiTouil	1961	138 Millards de m ³	-
Alrar	1961	132Millards de m ³	1965
Rhourde Nouss	1962	132 Millards de m ³	1988
Tiggentourine (Illizi)	1960	9 Millards	2006
Ohant (Illizi)	1960	=	1961 et 2003

Tableau II. 2: Les découvertes des plus importantes de régions gazières en Algérie et leurs
productions [77], [78]

En 2019, les réserves prouvées de gaz naturel en Algérie ont été estimées à 4 300 milliards de m³, Cette richesse confère à l'Algérie une dimension gazière d'envergure internationale, à savoir la onzième plus grande réserve de gaz naturel au monde avec 2,2 % du total mondial (figure II.4), et la deuxième plus grande réserve d'Afrique après le Nigeria [79].



Figure II. 4: Les réserves de gaz naturel conventionnel des quinze premiers pays [79].

II.1.2.2. Production de gaz naturel

Il a fallu attendre quasiment le début des années 2000 (tableau II. 2) [74], pour que la production de gaz connaisse un développement réel. En 2005 [80], la production gazière a atteint près de 232 millions de TEP, tous produits confondus.

En 2019, l'Algérie a produit 86,2 milliards de m^3 de gaz naturel, soit 3,10 EJ (<u>exajoules</u>), en progression de 12 % par rapport à 2009. Elle se classe au 10^e rang mondial (figure II.5) avec 2,2 % de la production mondiale et au 1^{er} rang en Afrique.



Figure II. 5: Les dix principaux producteurs de gaz naturel dans le monde [79]

II.2. Origine du gaz naturel

Le gaz naturel est issu de la transformation naturelle, pendant des millions d'années, de matières organiques comme les végétaux et les animaux, ces résidus organiques se décomposent et sont enterrés sous des couches de sédiments. Avec le temps et sous l'effet de la pression et de la chaleur, ces couches sédimentaires se transforment en hydrocarbures (pétrole ou gaz naturel), à l'intérieur d'une couche rocheuse (roche-mère). Grace à sa faible masse, le gaz monte à l'intérieur de roches plus poreuses, jusqu'à ce qu'il se heurte à une couche de roche imperméable, bloqué à cet endroit, une poche de gaz naturel se crée. Ce processus prend des millions d'années (figure II.6).



Figure II. 6: Origine du gaz naturel

II.3. Composition chimique du gaz naturel

La composition chimique du gaz naturel est un facteur des plus importants, qui conditionne un transport optimal. Le gaz naturel est un mélange d'hydrocarbures légers comprenant du méthane, de l'éthane, du propane, des butanes et des pentanes. D'autres composés tels que, le CO_2 , l'hélium, le sulfure d'hydrogène et l'azote peuvent également être trouvés. Sa composition n'est jamais la même, cependant, son composant principal reste le méthane (environ 75 % à 95 %). Considéré comme un combustible propre, le méthane sous sa forme commercialisable, ne contient presque pas de soufre et ne produit pratiquement aucun dioxyde de soufre (SO₂). Ses émissions d'oxydes d'azote (NO_x) sont plus faibles que celles provenant du pétrole ou du charbon, de même que le gaz carbonique (CO₂) émis est inférieur à celui des autres combustibles fossiles, (40 à 50% de moins que pour le charbon et 25 à 30% de moins que pour le pétrole, selon Eurogas [73]). La composition chimique du gaz naturel détermine les étapes de traitement qu'il devra subir. Le sulfure d'hydrogène pose les problèmes les plus graves dans le processus de transport de gaz naturel. La composition du gaz naturel de quelques gisements dans le monde est consignée dans le tableau II.3.

Pays	Gisement	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	C ₄ H ₁₀	C ₅ H ₁₂	N_2	CO ₂	H ₂ S	Autre composés sulfuriques
	Ems	81.8	1.6	0.6	0.6	0.6	14.0	0.7	<0.1	
Allemagne	Weser	88.0	1.0	0.2	0.2	0.2	9.5	0.8		
Hollande	Groningue	81.7	2.7	0.4	0.1	0.2	14.0	0.8		<0.1
	Lacq	69.3	3.0	0.9	0.4	0.8	0.2	9.5	15.8	0.1
France	Saint Marcet	70.7	4.3	1.4	0.7	1.0	3.0	3.0		
Ukraine	Ukraine de l'Ouest	97.8	0.5	0.3	0.3	0.3	0.8	-	-	-
Angleterre	Mer de Nord A Mer de Nord B	86.0 95.0	5.1 2.6	1.3 0.5	0.2 0.2	0.3 0.2	6.8 1.2	0.1	<0.1	<0.1
Algérie	Hassi R'Mel	79.6	7.4	2.7	1.4	3.6	5.1	0.2	-	-
Roumanie	Mislea Boldesti Margineni Sarmasel	75.8 82.8 74.0 96.4	10 9.3 10.0 1.8	6.5 4.0 7.1 1.6	3.9 2.6 4.5 0.2	3.8 1.3 4.4	- - - -	- - - -	- - - -	- - - -

Tableau II. 3: Composition volumique du gaz naturel de quelques gisements [81].

II.4. Etapes du cycle de vie du gaz naturel

Le cycle de vie du gaz naturel est illustré par la figure II.7. Les principales étapes de celuici seront détaillées dans ce qui suit.



Figure II. 7: Cycle de vie du gaz naturel [81]

II. 4.1. Extraction du gaz naturel

Les gisements de gaz naturel sont classés généralement en trois principales catégories. On distingue :

- Les gisements où le gaz naturel n'est pas en contact avec le pétrole ;
- Les gisements où le gaz naturel est associé au pétrole. Dans ce cas, le gisement possède alors un chapeau de gaz;
- Les gisements où le gaz naturel est dissout dans le pétrole (communément appelé "gaz dissout").

Le gaz naturel et le pétrole brut, sont souvent associés et extraits simultanément des mêmes gisements, ou encore des mêmes zones de production. Les hydrocarbures liquides proviennent du pétrole brut dans une proportion moyenne de l'ordre de 80%. Dans les 20% restants, parmi les fractions les plus légères, le propane et le butane, sont presque toujours liquéfiés pour faciliter le transport. Lors de l'extraction, la détente à la tête du puits provoque la condensation des hydrocarbures C_5 à C_8 , les liquides récupérés appelés « condensats de gaz naturel » ou « liquide de puits de gaz naturel » correspondent à un pétrole extrêmement léger de très haute qualité (donnant de l'essence et du naphta). Tout le reste (hydrocarbures C_1 à C_4 , CO_2 , H_2S , He) est à l'état gazeux à température ambiante et est acheminé par gazoducs vers une usine de traitement de gaz. Deux réseaux de collecte, un pour le gaz et l'autre pour les condensats sont ainsi nécessaires.

L'énergie électrique utilisée par les installations de pompage et des compresseurs est produite dans les installations énergétiques (généralement un moteur thermique qui utilise le gaz naturel).

II.4.2. Traitement du gaz naturel

A sa sortie du gisement, le gaz naturel est inutilisable en cet état. En effet, essentiellement constitué de méthane, il contient, selon sa provenance, une quantité variable d'autres composants dont certains sont impropres à la distribution. Le gaz naturel va par conséquent subir une série de traitements, dont le triple objectif sera d'éliminer les éléments nocifs, d'augmenter son PCI et de donner au gaz son odeur caractéristique. Le traitement du gaz naturel consiste à séparer l'eau, les gaz acides et les hydrocarbures lourds, afin d'adapter le gaz aux spécifications commerciales ou de transport. La répartition de ces opérations entre le gisement et le point de livraison est dictée par des facteurs économiques. Il est habituellement préférable de n'exécuter sur la plate-forme d'extraction de gaz naturel que les opérations qui

permettent le transport du gaz. Au cours du traitement, le gaz naturel passe par plusieurs étapes telles que, le séchage, la désulfuration, le dégazolinage et l'odorisation.

Au cours de la première étape (déshydratation), les fractions liquides que pourrait comporter le gaz brut extrait sont séparées.

La seconde étape du traitement consiste en l'élimination des composées sulfurique et d'hydrocarbures liquides. Le gaz naturel et ses différentes fractions peuvent être transportés sous diverses formes :

- Par gazoduc (gaz naturel comprimé).
- Par méthanier (gaz naturel liquéfié).

Chacun de ces modes de transport comporte une succession d'étapes.

En fait le gaz naturel que nous utilisons n'est pas du tout le même que celui qui a été extrait du gisement. Pour prétendre au titre de «combustible utilisable par le consommateur», il est obligatoire que le gaz naturel soit:

- "Sec", c'est-à-dire, ne contenir ni eau, ni hydrocarbures à l'état liquide.

- Débarrassé de ses composants acides ou de ses corps toxiques.

- Avoir un pouvoir calorifique et une densité invariables.

C'est la mission dévolue au traitement, dont l'objectif est par ailleurs de récupérer séparément, le cas échéant, les hydrocarbures qui pourraient être commercialisés, comme l'éthane, les GPL (gaz de pétrole liquéfiés) ou l'hydrogène sulfuré (H₂S).

II.4.3. Transport du gaz naturel

Une fois extrait du sous-sol et épuré, le gaz naturel doit être acheminé vers les zones de consommation, qui sont parfois extrêmement éloignées du lieu de production, soit par gazoducs en phase gazeuse, soit par méthanier sous forme de gaz naturel liquéfié (GNL) (figure II.8).



---- -Energie électrique utilisée soit pour transporter le gaz naturel gazeux soit pour le stocker soit pour liquéfier ;

---- -Energie primaire contenue dans le gaz naturel utilisée pour la production d'énergie électrique

Figure II. 8: Transport du gaz naturel [82]

II.4.3.1. Gazoducs

Ils sont le moyen de transport du gaz le plus utilisé car ils sont fiables et rentables. Des tubes d'acier sont soudés pour former une canalisation pouvant atteindre plus de 3 000 kilomètres de long. Le diamètre de ces tubes varie entre 50 centimètres et un mètre.

Lorsque le gaz est sous pression, il occupe moins de volume et circule plus vite. Il peut atteindre une vitesse de 40 km/h dans les gazoducs. Pour garantir une vitesse optimum et

éviter les déperditions énergétiques, des stations de compression sont installées à intervalles réguliers le long du gazoduc (tous les 100 à 200 km). La pression est fixée entre 16 et 100 bars [83].

II.4.3.2. Méthaniers

Considérés comme une alternative aux gazoducs lorsque ceux-ci sont trop coûteux ou pratiquement inconstructibles, les méthaniers permettent d'acheminer du gaz liquéfié, sous forme de GNL, sur de longues distances et de le stocker. A pression atmosphérique et à une température de -161°C, le gaz se condense et le volume du gaz est réduit de 600 fois (contre, 100 fois seulement dans le cas d'un transport par gazoduc à une pression de 100 bars), ce qui permettrait de transporter plus facilement de plus grandes quantités. Le gaz liquéfié est quasiment du méthane pur car l'oxygène, le dioxyde de carbone et les éléments sulfurés sont extraits dans les usines de liquéfaction [84].

II.4.4. Utilisations du gaz naturel

Le gaz naturel est l'un des moyens de production d'énergie les moins polluants. En effet, lorsque sa combustion est complète, il n'émet que de l'eau et du dioxyde de carbone :

$$CH_4+2O_2 \longrightarrow CO_2+2H_2O$$
 (II.1)

Comme tous les combustibles fossiles, le gaz naturel, rejette après combustion du gaz carbonique, mais en très faible quantité, seulement 55 kg par giga Joule de chaleur produite, contre 75 pour le pétrole brut, et environ 100 pour le charbon. De plus, l'utilisation du gaz naturel ne produit pratiquement pas d'oxydes d'azote (NO_x), et quasiment aucune pollution locale, comme les oxydes de soufre, les poussières, les cendres etc. Elle ne nécessite pas par conséquent, des systèmes de dépollution, à l'opposé des installations (centrale électrique, chaufferie, cimenterie ou autre), dont la combustion de charbon engendre du soufre, des NO_x et des poussières de fumées et qui de plus sont très couteuses (construction et entretien). Cet aspect écologique a une conséquence économique directe. Le gaz naturel est utilisé comme source d'énergie dans l'industrie afin de produire de la chaleur (chauffage, fours...) et de l'électricité (figure II. 9).



Figure II. 9: Principales utilisations du gaz naturel [82]

En 2019, plus de 23.3 % de l'électricité ont été produits dans le monde [85], à partir du gaz naturel, et cette part ne cesse d'augmenter. Ce gaz a de multiples autres utilisations, chauffage, comme carburant pour les véhicules (GNV). Depuis quelques années, plus d'un million de véhicules fonctionnent au gaz naturel, dans le monde (Argentine, Italie, **Algérie** etc.). Ce combustible est également utilisé dans une bonne partie de l'industrie chimique et pétrochimique servant à la production de la quasi-totalité de d'hydrogène, du méthanol et de l'ammoniac, trois produits de base, qui à leur tour sont employés dans diverses industries (engrais, résines, plastiques, solvants, raffinage du pétrole).

II.5. Le gaz naturel pour véhicules (GNV)

Le marché des véhicules fonctionnant avec du gaz naturel s'élargit de plus en plus, du à la forte demande des véhicules d'une part et aux problèmes environnementaux posés par l'utilisation de carburants pollueurs, notamment le mazout, d'autre part. Aussi et pour que le gaz naturel soit compétitif, il est indispensable de prendre en compte dans la conception,

l'ensemble des exigences environnementales (réglementations de plus en plus sévères vis à vis des émissions de gaz à effet de serre), l'évolution des réseaux de distribution et les législations incitatives de chaque pays. Le Gaz Naturel Véhicule (GNV), utilisé essentiellement sous forme comprimée, a fait l'objet depuis le début des années 90, de nombreuses études.

Le gaz naturel constitue sans doute une des solutions les plus attractives, confortée par ses multiples aspects que nous exposons dans ce qui suit [86].

II.5.1. Aspect énergétique

Le gaz naturel a toujours été reconnu comme un substitut important des combustibles dérivés du pétrole. Il est moins cher que l'essence (de 15 à 25% environ) et que le gasoil et peut se substituer à l'essence, dans les moteurs à allumage commandé, sans modifications majeures [87].

Le pouvoir calorifique du gaz naturel (55 200 kJ/kg) est supérieur à celui de l'essence (44 700 kJ/kg), mais son inconvénient majeur réside dans son état de combustible gazeux. Même comprimé à 200 atm, la densité énergétique volumique du gaz naturel (8,8 MJ/1) est environ quatre fois plus petite que celle de l'essence (34,8 MJ/1). Aussi, l'autonomie d'une voiture fonctionnant au gaz naturel (GNV) est donc approximativement de 1/4 à 1/3 de celle des voitures à essence avec le même volume de stockage de carburant [88]. Le danger d'explosion et d'incendie avec le gaz naturel comprimé est moindre qu'avec l'essence, même en cas d'accident, car le méthane est plus léger que l'air et se dissipe rapidement dans l'atmosphère en cas de fuite. La température d'inflammation du gaz est supérieure à 450 °C, alors que celle des produits pétroliers liquides est inférieure à 240 °C.

II.5.2. Aspect environnemental

Comme en témoignent les différentes conférences annuelles sur les risques environnementaux liés à la croissance de la consommation énergétique, depuis le protocole de Kyoto en 1995, le monde de plus en plus préoccupé par les conséquences des changements climatiques s'attèle à la réduction des émissions des gaz à effet de serre. Le transport est sans doute l'un des secteurs les plus polluants, d'où la nécessité de trouver une alternative permettant de réduire de manière drastique les émissions de gaz à effet de serre [89]. L'utilisation d'un véhicule léger GNV à la place d'un véhicule à essence actuel, permettrait de diminuer les émissions totales de gaz à effet de serre de 15 % environ. Du point de vue environnemental, le gaz naturel offre de grandes possibilités de réduction des émissions polluantes car sa combustion engendre sensiblement moins de dioxyde de carbone (CO_2) que les autres carburants. Actuellement une GNV produit 99% moins de CO, 30 % moins de NO_x, 96 % moins d'hydrocarbures et très peu de résidus solides [89], que les véhicules à essence.

II.5.3. Aspect économique

Contrairement à de nombreux carburants alternatifs (dihydrogène, GNV, biogaz, bioéthanol, biodiesel....), le surcoût total du développement de la filière GNV, principalement lié à l'installation de stations de ravitaillement et au système de stockage à bord du véhicule, est relativement faible. Dans certains pays [90], compte tenu des aides à l'acquisition du véhicule et du coût relativement faible du carburant (notamment en raison d'une faible taxation), l'utilisation du GNV apparaît économiquement plus intéressante que celle des véhicules à essence [90].

II.6. Caractéristiques techniques des carburants

Les principales caractéristiques physico-chimiques du GNV et des carburants usuels sont regroupées dans le tableau II.4.

		Essence sar		
	GNV	GPL	plomb	Diesel
Formule chimique	CH ₄ (Méthane)	$C_{3}H_{8}$ (Propane)	$C_{7}H_{16}$	$C_{12}H_{26}$ (Dodécane)
		C ₄ H ₁₀ (Butane)	(Heptane)	
Etat	Gazeux	Liquide	Liquide	Liquide
Acheminement	Canalisations	Camion	Camion	Camion
	(enterrées)			
Pression dans le	200	5	1	1
réservoir (en bar)				
Indice d'octane	125/130	92/96	95/98	-
Masse volumique (en	0.16 (pression	0.6	0.75	0.83
kg/litre stocké)	de stockage			
	200 bar)			
Densité par rapport à	0.55 à 0.65	1.55	4	Variable et très élevée
l'air				
Température d'auto	537	420 à 480	255	235
inflammation (en °C)				

Tableau II. 4: Caractéristiques physico-chimiques du GNV et d'autres carburants [91]

II.7. Stockage du gaz naturel

Le stockage du gaz naturel à bord des véhicules est un paramètre de très grande importance pour son utilisation. Actuellement, le gaz naturel est principalement stocké sous forme comprimée dans des réservoirs à une pression de l'ordre de 200 bars. Il peut être également stocké sous forme liquéfiée à une température de l'ordre de -162 °C, ce qui nécessite l'utilisation de réservoirs cryogéniques, ou encore par adsorption, à une pression de près de 35 bars et à température ambiante dans des milieux poreux tels que les charbons actifs [92].

II.7.1. Stockage gazeux

Le gaz naturel (GN), carburant gazeux composé d'un mélange d'hydrocarbures, principalement le méthane, peut être comprimé à une pression de 200 à 250 bars, pour former du gaz naturel comprimé (CNG). La pression de stockage de 200 bars constitue une valeur optimale pour une énergie embarquée, compte tenu de la masse des réservoirs (l'épaisseur des parois de ces derniers et donc de la masse, est d'autant grande, que la pression est plus élevée). Le CNG est stocké à bord du véhicule dans des cylindres, de volumes et donc de dimensions différentes pour permettre leur installation sur divers types de véhicules.

La conception des cylindres à haute pression pour le stockage à bord, du gaz naturel comme carburant pour les véhicules comprend : (i) le type I, cylindres constitués de matériaux métalliques ; (ii) le type II, ceux avec une doublure métallique et un renfort composite enroulé; (iii) le type III, ceux dotés d'un revêtement métallique et un renfort composite entièrement enveloppé, et (iv) le type IV, caractérisés par revêtement non métallique, sans partage de charge et un renfort composite à la fois sur la partie cylindrique et sur les extrémités du dôme [93]. L'avantage d'utiliser des matériaux tels que les polymères et les composites de fibres pour les réservoirs de carburant alternatifs réside dans la légèreté tout en offrant une résistance élevée aux chocs et une longue durée de vie [94].

II.7.2. Stockage par adsorption

Le gaz naturel (GN) stocké sous forme d'une phase adsorbée dans des matériaux poreux, donne du gaz naturel adsorbé (GNA). Cette option peut être une alternative intéressante, qui permettrait de surmonter les problèmes du CNG. Ainsi, l'utilisation de matériaux adsorbants pour le stockage du GN, à une pression relativement faible (3,5- 4 MPa) et à température ambiante, est une possibilité pour rendre les véhicules GN compétitifs avec d'autres types de véhicules [92].

En effet, cette technologie qui utilise des charbons actifs ou des oxydes métalliques permet de stocker des composés gazeux en limitant la pression de stockage à quelques dizaines de bars et ce en employant des matériaux poreux ou des structures offrant de grandes surfaces de contact. Les molécules de gaz sont alors retenues par les forces de Van der Waals. L'intérêt de cette technologie est donc de réduire la compression du gaz pour la distribution et le stockage et de ce fait, de diminuer la masse des réservoirs et de pouvoir ainsi les adapter plus facilement aux véhicules (car les contraintes sont réduites).

II.7.3. Stockage liquide

Le gaz naturel liquéfié, ou GNL, est tout simplement du gaz naturel à l'état liquide. Lorsque le gaz naturel est refroidi à une température d'environ -160 °C à la pression atmosphérique, il se transforme en un liquide clair, transparent et inodore. Le GNL est non corrosif et non toxique.

II.8. Utilisation à l'échelle mondiale des véhicules GNV

Au cours de ces dernières décennies (figure II.10), une forte croissance de l'utilisation de véhicules GNV (Gaz Naturel pour véhicules).



Figure II. 10: Evolution de l'utilisation des GN dans le transport [95]

Le gaz naturel est largement utilisé dans l'industrie, le secteur de l'énergie et le résidentiel. En raison d'avantages écologiques et économiques, le gaz naturel est également de plus en plus utilisé comme carburant alternatif dans le secteur des transports sous forme de gaz naturel comprimé (CNG) et de gaz naturel liquéfié (GNL). L'histoire des carburants gazeux utilisés dans les moteurs à combustion interne remonte aux années 1860 lorsque l'inventeur français Etienne Lenoir construisit le premier moteur à deux temps propulsé par un mélange de gaz de ville et d'air [96]. Depuis lors, les carburants gazeux ont été utilisés pour propulser les véhicules, et étaient les plus populaires en temps de crise liée à la pénurie de

carburants conventionnels [97], [98]. Une augmentation dynamique du nombre de véhicules au gaz naturel (GNV) a été alors observée.

Ainsi des pays comme, le Pakistan, l'Inde, le Brésil, l'Iran et autres, ont mené des politiques diverses motivées par des raisons économiques, politiques, environnementales et de sécurité énergétique, qui ont permis l'essor de ce type de véhicules. Le Pakistan est un des plus grands utilisateurs des véhicules GNV, résultant de la volonté des autorités à réduire non seulement la pollution dans le transport mais également la pression sur les réserves de devises étrangères en raison du faible taux de change de la roupie pakistanaise et de la flambée des prix mondiaux du pétrole [99]. Cette démarche s'appuie sur la disponibilité de grandes réserves de gaz de ce pays, qui lui permettrait d'assurer une sécurité énergétique dans le secteur des transports. L'Europe avait par contre accusé au début, un retard dans l'utilisation des véhicules GNV par rapport aux pays d'Asie et d'Amérique latine, dû, en partie, à la dépendance de la plupart des pays européens aux importations de gaz [100]. Cependant, l'augmentation des prix du pétrole et la volonté de réduire les émissions de gaz à effet de serre encouragées par différentes mesures incitatives ont conduit par la suite, à une forte croissance du parc de véhicules GNV au cours de ces dernières années [101], [89]. C'est le cas de l'Italie, qui est le pays européen où les véhicules GNV sont les plus utilisés. De même que pour la France, et comme l'atteste l'IFP (Institut Français du Pétrole) dans son rapport " Le GNV : quel potentiel ? " [102], la filière GNV a connu un nouvel essor. Les auteurs du rapport ont fait un point de situation, sur les technologies actuelles des moteurs fonctionnant au gaz naturel et sur les évolutions possibles et ont présenté une étude comparative des bilans environnementaux des filières essence, gasoil et gaz pour véhicules.

En 2020, il y avait plus de 28,5 millions de véhicules. Le leader mondial de l'utilisation du CNG dans les transports est la Chine, avec plus de 6,7 millions de véhicules GNV, suivie par l'Iran avec 4,9 millions et l'Inde avec 3,3 millions de GNV. Les leaders de l'UE sont l'Italie avec 1,1 million de GNV, l'Allemagne avec 98 200 GNV et la Bulgarie avec 69 800 GNV [103].

II.9. Développement du GNV en Algérie

Le Ministère de l''Energie et des Mines, en collaboration avec ses entreprises, NAFTAL, SONATRACH et SONELGAZ, a lancé un programme national pour le développement du GNV dans les années 80 [104]. Le programme d'expérimentation de NAFTAL, qui a démarré en Avril 1989, a permis la transformation de, deux bus, deux véhicules lourds, et un léger de même que l'acquisition de deux stations de compression et de leurs installations. Cette initiative a été définitivement arrêtée en septembre 1996. Dans la même période, NAFTAL s'était attelée à développer l'utilisation du GPL/C, dont le coût d'investissement revenait beaucoup moins cher que le GNV, mais sans tenir compte du coût des kits de conversion GPL/C, nettement inférieur à celui du GNV. Puis, entre 1999- 2002, le développement du GNV par SONELGAZ a permis la réalisation d'une station de remplissage des autobus, dans un dépôt de l'entreprise de transport urbain d'Alger (ETUSA), d'une station - service mixte (GNV, GPL/C), ouverte au public, la conversion d'une flotte de véhicules du parc SONELGAZ et l'acquisition de cinq bus fonctionnant au GNV par l'ETUSA. Entre 2007 et 2012, le groupe NAFTAL, SONELGAZ, ETUSA et MATE (Ministère d'Aménagement du Territoire et de l'Environnement) a élaboré un plan de développement pour la conversion de 14 000 véhicules légers, l'acquisition de 175 bus au gaz naturel, le raccordement et l'équipement de 40 stations -services pour la distribution du GNV.

En 2021 [105] il a été prévu de convertir 500000 véhicules particuliers au GPL, et d'atteindre 1.3 million de véhicules à l'horizon 2030. En outre, 11.000 bus devraient être convertis au gaz naturel comprimé (CNG) dans la période (2016-2030).

En 2030, il serait proposé [105] un modèle où, 50% des véhicules circulant en Algérie utiliseraient des carburants propres (25% GPL et CNG, 25% de véhicules électriques).

II.10. Mélange méthane – hydrogène

Dans une phase transitoire il serait possible d'introduire de l'hydrogène produit en utilisant des ressources renouvelables, dans les hydrocarbures tel que le méthane. Cette opération est dite enrichissement à l'hydrogène [106]. L'utilisation d'un carburant enrichi à l'hydrogène ne nécessite pas de changer les installations et les systèmes de combustion utilisés dans les différents domaines, de plus elle permet d'introduire une part de renouvelable dans les hydrocarbures. Ce nouveau créneau de recherche (enrichissement à l'hydrogène), peut s'avérer d'une importance capitale pour l'Algérie qui dispose d'un excellent potentiel d'énergies renouvelables (solaire et éolien) [105] et d'un gisement de gaz naturel important.

Le HCNG, nouveau carburant est constitué de gaz naturel carburant, enrichi par de l'hydrogène. En théorie, les deux composants peuvent être mélangés dans n'importe quelle proportion, mais en pratique, le HCNG avec 8% à 20% (en volume) d'hydrogène, représente

l'option la plus prometteuse à court terme. Avec de tels taux, la technologie du HCNG est compatible avec celle utilisée actuellement dans les moteurs fonctionnant avec du gaz naturel carburant (CNG) (figure II.11). Cette technologie (CNG), étant parfaitement maîtrisée et disposant d'une importante infrastructure de distribution et de transport, compatible avec celle de l'hydrogène, permettrait à la technologie du mélange des deux carburants de bénéficier de ses avantages. Un autre atout du CNG est d'être plus "propre" que les autres carburants conventionnels.

Un des avantages de l'enrichissement du carburant des moteurs à combustion interne par un apport (injection) d'hydrogène est de rend la combustion plus complète, ce qui diminue la consommation et l'encrassement du moteur et conduit à une réduction d'émission de polluants, notamment les gaz NO_X, CO, HC, (tableau II.5).

g/km	СО	НС	CH ₄	NO _X	Particules
GNV (CNG)	0.010	0.000	0.250	2.080	0
HCNG (20%)	0.008	0.000	0.205	1.248	0
HCNG (30%)	0.008	0.000	0.180	1.000	0
H ₂ (MCI)	0	0	0	>0	0

Tableau II. 5: Emissions de polluants toxiques en fonction de l'ajout d'hydrogène dans le gaznaturel [107]



Figure II. 11: Véhicule à Combustion Interne (MCI) fonctionnant au carburant HCNG

Il faut noter néanmoins que pour un ajout au gaz naturel, d'une quantité d'hydrogène supérieure à 20 % en volume (afin de réduire davantage les émissions polluantes), des adaptations importantes à la technologie CNG existante seront obligatoires. En effet, pour des pourcentages d'hydrogène supérieur à 30-40 % du volume, une corrosion intensive peut apparaître, d'où la nécessité de modifier la configuration du système de contrôle existant et de changer les matériaux en contact direct avec l'hydrogène par d'autres plus résistants à la corrosion [107].

> L'hythane

L'Hythane, appellation déposée par l'UQTR, (Université du Québec), est un enrichissement du gaz naturel (méthane) par de l'hydrogène, jusqu'à 20 %. Ce combustible permet d'utiliser les infrastructures existantes de transport et de distribution de gaz ainsi que les chaudières à gaz, cuisinières et chauffe-eau.

A moyen et long termes, l'hydrogène, vecteur énergétique, a le plus fort potentiel pour devenir le combustible propre et durable dans le secteur du transport. En attendant le développement de nouvelles technologies, les mélanges gaz naturel/hydrogène, peuvent être une solution de transition vers une «énergie hydrogène».

Actuellement, des ajustements technologiques et réglementaires sont encore nécessaires pour rendre l'hythane commercialisable. Parmi les nombreux intérêts que présente ce nouveau combustible, nous pouvons citer :

• C'est quasiment la seule technologie permettant de faire pénétrer l'hydrogène commercialement et à brève échéance, dans le pool des carburants.

• Son utilisation génère des émissions extrêmement faibles de polluants, inférieures de moitié à celles induites par le GNV. De plus, si l'hydrogène combiné est d'origine renouvelable la réduction des émissions de CO₂, sera encore plus importante.

• Ce nouveau carburant permettra à l'utilisateur de se familiariser peu à peu avec l'hydrogène comme vecteur énergétique appliqué au transport automobile et d'admettre l'hythane en tant que carburant du futur.

58

II.11. Possibilité d'introduire l'hydrogène en Algérie

Utiliser des véhicules à l'hydrogène en Algérie, n'est pas raisonnablement envisageable actuellement, puisqu'il n'existe pas de réseau national de distribution de l'hydrogène. En attendant que les défis liés à l'utilisation de l'hydrogène comme carburant, soient relevés de manière satisfaisante, le gaz naturel renfermant de l'hydrogène, est un carburant alternatif transitoire qui permettrait de préserver l'environnement.

Ainsi l'idée d'utilisation de l'hydrogène pour la carburation/combustible n'est pas à écarter, du fait que l'ajout d'une quantité d'hydrogène dans le gaz naturel permet non seulement d'améliorer la combustion, mais également de réduire significativement les GES. Des projets d'utilisation de l'hydrogène dans le transport, par le biais d'un mélange gaz naturel- hydrogène comme carburant [108], sont en cours.

Ainsi, l'hythane (carburant composé de 80 % de gaz naturel et de 20 % d'hydrogène) est utilisé dans des moteurs conventionnels non ou peu modifiés. Cette composition conduit à une réduction significative des imbrûlés et des NO_X et même du CO et du CO_2 (la combustion de l'hydrogène ne produit que de l'eau). Séduit par ses propriétés voisines de celles du gaz naturel, une équipe de chercheurs [109] a conduit un projet qui consiste en la réalisation d'une station -service prototype (figure II.12) pour la distribution du carburant HCNG, composée essentiellement de :

• Un système de production d'hydrogène par voie renouvelable, utilisant un électrolyseur alimenté par des générateurs photovoltaïques et éoliens.

• Deux systèmes de compression, utilisant des compresseurs à plusieurs étages, dont l'un est pour le gaz naturel et l'autre pour l'hydrogène.

• Deux systèmes de stockage, l'un à 200 bars pour le gaz naturel et l'autre à 350 bars pour l'hydrogène.

• Un mélangeur de gaz qui permet grâce à des débitmètres et électrovannes d'obtenir le carburant HCNG, constitué respectivement de 8 % et 92 % en volume d'hydrogène et de gaz naturel.

• Un système de distribution étanche, constitué d'une borne de distribution rapide, permettant l'approvisionnement des véhicules à 200 bars pour une plus grande autonomie et un gain de volume. Pour compléter le projet, l'acquisition d'un véhicule dédié au CNG, qui sera alimenté avec le carburant HCNG, est prévue.
Chapitre II



Figure II. 12: Station de production et de distribution du carburant HCNG [109]

Conclusion

L'hydrogène comme combustible pour les véhicules, est une option qui attire une attention de plus en plus soutenue, au niveau international de la part des constructeurs automobiles, des acteurs du secteur énergétique et des décideurs politiques. Cependant, divers obstacles technico - économiques retardent la généralisation de l'utilisation de l'hydrogène malgré les grandes capacités en gaz naturel du pays et les caractéristiques avantageuses quant à ses divers emplois, notamment comme carburant respectueux de l'environnement en comparaison avec l'essence et le diesel.

L'hythane peut être considéré comme une phase transitoire pour l'introduction de l'hydrogène comme carburant dans les moteurs à combustion interne. Dans les années à venir l'ajout d'installations de production et de stockage de l'hydrogène aux installations du GNV déjà existantes est une solution très facilement réalisable et fortement appropriée pour l'utilisation à court terme de l'hydrogène, en Algérie.

Chapitre III – Modélisation physique et numérique

Introduction

La résolution numérique des équations de transport régissant les phases de remplissage de l'hydrogène dans les réservoirs est abordée dans ce troisième chapitre.

Après une présentation du domaine d'étude et un bref rappel des équations générales régissant les écoulements compressibles de transport, des modèles de turbulence recensés dans la littérature sont relatés. On y trouvera également une étude du maillage, afin de faire ressortir le plus adéquat pour ce type de géométrie, ainsi que la méthode de résolution des équations de mécanique des fluides par le solveur CFD et les différents aspects à prendre en compte au niveau de leur résolution numérique. Les conditions aux limites imposées dans le logiciel «ANSYS Fluent » sont également indiquées.

III. 1. Présentation du domaine d'étude

Les réservoirs étudiés sont des enceintes cylindriques axisymétriques. La configuration géométrique adoptée dans ce travail, est celle utilisée par Yan-Lei Liu et al. [46] dans leur étude expérimentale et par Zhao et al. [47], dans leurs travaux de simulations numériques. Le domaine de calcul à deux dimensions considéré, est illustré par la figure III.1. Il s'agit d'un cylindre, d'un rayon interne de 376 mm, d'une longueur de 1652 mm et d'une contenance de 150 L. L'alimentation en hydrogène est effectuée en une section de faible diamètre en amont d'un élargissement brusque, entre la conduite d'alimentation et le réservoir.



Figure III. 1: Configuration du réservoir

III .2. Phénomène de remontée de la température au cours du remplissage rapide du carburant gazeux

La thermodynamique du remplissage des bouteilles de gaz comprimé (CHG) et (CNG) a fait l'objet à ce jour, de nombreuses études sur le remplissage rapide [44], [46], [110], [111], [112]. Ces travaux ont permis de noter une augmentation significative de la température du gaz pendant le remplissage, trois causes principales ont été avancées. La première pourrait être liée à l'énergie cinétique du gaz (CHG et CNG) à haute vitesse qui se transforme en énergie interne, pendant le processus de remplissage. Pour la seconde, il pourrait s'agir de la forte compression du carburant dans le cylindre résultant de l'introduction de gaz à une pression plus élevée que celle de la station de (CHG) ou de (CNG) [47], [113], [114]. Quant' à la troisièmement, l'hydrogène aurait un coefficient Joule-Thomson négatif qui est différent des autres gaz. Le processus par lequel l'hydrogène traverse le dispositif d'étranglement du distributeur à partir du réservoir à haute pression entraîne une augmentation de la température, appelée effet Joule-Thomson.

Le modèle schématique du processus de ravitaillement en provenance de la station CHG pour un cylindre à hydrogène est représenté sur la figure III.2.



Figure III. 2: Modèle schématique du processus de ravitaillement en carburant

III .3. Formulation mathématique

Pour mesurer et modéliser l'élévation de la température du gaz (CHG et CNG) pendant le remplissage d'un réservoir, de nombreux travaux ont été réalisés [111], [112], [115]. Un modèle de dynamique des fluides de calcul (CFD) [116], [117], [118], [119] a été développé pour discrétiser spatialement le cylindre, afin de prédire la distribution de la température du gaz. Le modèle considère l'écoulement visqueux instable compressible, les effets des gaz réels et le transfert de chaleur à travers les parois du cylindre.

III.3.1. Equations gouvernantes

Les équations fondamentales, de continuité, de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie, décrivent l'écoulement des fluides visqueux compressibles. Elles découlent des principes fondamentaux de la physique des moyennes continues.

L'équation de continuité qui traduit la conservation de la masse du fluide dans un volume de contrôle d'un domaine en mouvement est donnée par [120] :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v}) = 0 \tag{III.1}$$

L'équation de la conservation de la quantité de mouvement, pour un fluide newtonien visqueux compressible en mouvement non stationnaire, a selon [118], [119], [121] pour expression:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{v}) + \nabla .(\rho\vec{v}\vec{v}) = -\nabla p + \nabla .(\bar{\tau})$$
(III.2)

L'équation de l'énergie [118], [119], est donnée par:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \left(\vec{v}(\rho E + p)\right) = \nabla \left(k_{geff}\nabla T + \left(\bar{\bar{\tau}}_{eff}, \vec{v}\right)\right)$$
(III.3)

Avec :

- ρ : Densité du gaz
- \vec{v} : Vitesse moyenne
- *p* : Pression statique
- $\overline{\overline{\tau}}$: Tenseur de contrainte

Le tenseur de contraintes est donné par la relation suivante:

$$\bar{\bar{\tau}} = \mu [\nabla \vec{v} - (2/3)\nabla . \vec{v}I] \tag{III.4}$$

Où μ est la viscosité dynamique et I le tenseur unitaire.

$$E = h - (p/\rho) + (1/2)v^2$$

La conductivité thermique effective k_{aeff} est donnée par la relation :

$$k_{geff} = k_g + k_t,$$

Avec : $k_t = (C_{p,g}\mu_t/Pr_t)$, Pr_t étant le nombre de Prandtl turbulent.

Le terme impliquant $\bar{\bar{\tau}}_{eff}$ représente le chauffage visqueux,

Le terme, μ qui figure dans le tenseur de contraintes (équation III.4), peut être remplacé par, μ_{eff} ($\mu_{eff} = \mu + \mu_t$)

III.3.2. Ecoulement turbulent

III.3.2.1. Analyse dimensionnelle

Une analyse dimensionnelle du flux entrant dans le cylindre donne une idée de la nature du champ d'écoulement. Dans cette étude, un cylindre d'une contenance de 150L, à une pression de 350 bars est utilisé pour le test.

Le nombre de Reynolds (rapport des forces d'inertie aux forces de viscosité), à l'entrée de réservoir peut être déterminé à l'aide de la relation:

$$Re = \frac{vL}{v} = \frac{\rho vL}{\mu} \tag{III.5}$$

Avec:

v: Vitesse moyenne du fluide

L: Longueur caractéristique de l'écoulement

v : Viscosité cinématique du fluide

μ: Viscosité dynamique du fluide

La viscosité du gaz varie tout au long du remplissage en fonction de la densité et de la température du gaz à l'entrée. Dans le cas de notre étude, le nombre de Reynolds moyen à

l'entrée est de l'ordre de 10^5 , ce qui correspond à un régime d'écoulement turbulent. L'écoulement à l'entrée du cylindre est de ce fait considéré comme turbulent.

III.3.2.2. Modélisation de la turbulence

La modélisation de la turbulence est l'un des éléments-clé de la CFD. Il est difficile d'établir un modèle mathématique capable d'approximer le comportement physique des écoulements turbulents avec une grande précision.

Au cours de ces dernières décennies, plusieurs modèles du phénomène de turbulence ont été élaborés. Il n'existe pas de modèle unique, qui décrit complètement le processus de ce phénomène naturel. En effet, chaque modèle de turbulence dispose de conditions particulières qui le caractérisent et le différencient des autres modèles, le rendant ainsi adapté à un type de simulation donné, chacun d'eux a évidemment des avantages et des inconvénients. CFD ANSYS-Fluent, utilisé pour effectuer des simulations, compte plusieurs modèles de turbulence. Aussi, pour décider du choix du modèle de calcul, il nous parut judicieux de recenser différents modèles de la littérature qui reposent sur la *méthode moyennée de Reynolds RANS (Reynolds Average Navier Stokes)* [122] pour laquelle les petites fluctuations de turbulence doivent être négligées.

III.3.2.2.1. Théorie de Reynolds

Les équations de Reynolds, Navier-Stokes déterminent le transport des quantités moyennes d'écoulement, avec un domaine complet des échelles de turbulence. Celles- ci sont modélisées comme des propriétés moyennes de l'écoulement qui changent très peu dans l'espace et dans le temps. Cette approche qui réduit considérablement l'effort et les ressources de calcul, est par conséquent utilisée dans plusieurs applications pratiques dans l'ingénierie [122].

La théorie de Reynolds permet de décomposer chaque propriété de l'écoulement en une valeur moyenne $\overline{\Phi}$ et une valeur fluctuante Φ ', de telle sorte que:

$$\Phi = \overline{\Phi} + \Phi' \tag{III.6}$$

L'application de la théorie de Reynolds aux équations de Navier Stokes, conduit aux équations moyennées de Reynolds Navier-Stokes (RANS) [123] :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \overline{u_i}) = 0 \tag{III.7}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{u}_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}(\rho \overline{u}_{i} \overline{u}_{j}) = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\mu \left(\frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \overline{u}_{j}}{\partial x_{i}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial x_{i}} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(-\rho \overline{u_{i}} \overline{u_{j}} \right)$$
(III.8)

Les variables dépendantes sont maintenant les valeurs moyennées par rapport au temps.

 δ_{ij} est le tenseur de Kroneker et $\rho u'_i u'_j$ un terme supplémentaire résultant des effets de la turbulence, qui peut être considéré comme le transport dans la direction *j* de la quantité de mouvement de la direction *i*. Il peut être assimilé à l'effet d'une tension sur une surface, d'où l'appellation de "tension de Reynolds" Pour la fermeture de l'équation de la quantité de mouvement (équation III.8), ce terme doit être modélisé.

III.3.2.2.2. Modèles de fermeture

A l'heure actuelle, les modèles de turbulence les plus utilisés dans les codes CFD sont les modèles à 2 équations, particulièrement le modèle de turbulence standard k- ε , qui est de loin le plus répandu.

a) Modèle de turbulence standard k-e

Ce modèle proposé par Launder et Spalding [124], est fréquemment utilisé dans la simulation des écoulements turbulents, du fait qu'il est en général facile à appliquer, robuste et économique. Le modèle de turbulence k- ε introduit deux équations de transport supplémentaires au système. La première est celle du transport de l'énergie cinétique turbulente k alors que la seconde fait intervenir ε , le taux de dissipation [125].

Les équations pour l'énergie cinétique k et le taux de dissipation ε prennent alors la forme:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \rho \varepsilon$$
(III.9)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} G_k - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k}$$
(III.10)

La viscosité turbulente est calculée par l'expression suivante:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{III.11}$$

 ρ , étant la densité du fluide et C_{μ} une constante

Le terme G_k , qui représente la production d'énergie cinétique turbulente, due aux gradients de la vitesse moyenne est calculé en utilisant la relation:

$$G_k = -\rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \tag{III.12}$$

 $-\rho \overline{u'_i u'_j}$ est la tension de Reynolds, elle est donnée par:

$$-\rho \overline{u_i' u_j'} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial \overline{x_i}} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} \right) \delta_{ij}$$
(III.13)

Pour ce modèle semi-empirique, l'équation de l'énergie cinétique est déduite mathématiquement, tandis que celle de la dissipation résulte des contraintes d'ordre physique. Les constantes du modèle k- ε sont regroupées dans le tableau III.1.

$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	C_{μ}	σ_k	$\sigma_{arepsilon}$
1.44	1.92	0.09	1.0	1.3

Tableau III. 1: Constantes du modèle k-E

b) Modèle de turbulence k-E RNG

Le modèle k- ε RNG est de la même forme que le modèle Standard, excepté que les coefficients sont différemment spécifiés [126]. Dans ce modèle, les constantes sont évaluées par des calculs théoriques et non empiriques. Le modèle de turbulence k- ε RNG est déduit des équations de Navier-Stokes, en utilisant une technique mathématique dite *"du groupe renormalisè"*. Dans les équations de transport (énergie cinétique et de dissipation), équations (III.9) et (III.10) des termes et fonctions supplémentaires apparaissent. Il s'ensuit que les équations de transport du modèle k- ε RNG, sont données par:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k - \rho \varepsilon$$
(III.14)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_{\varepsilon}\mu_{eff}\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j}\right) + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}G_k - C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{k} - R_{\varepsilon}$$
(III.15)

La différence principale par rapport au modèle k- ε standard réside dans le terme supplémentaire R_{ε} , défini par:

$$R_{\varepsilon} = \frac{C_{\mu}\rho\eta^{3}(1-\eta/\eta_{0})}{1+\beta\eta^{3}}\frac{\varepsilon^{2}}{k}$$
(III.16)

Où

$$\eta \equiv Sk/\varepsilon, S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \tag{III.17}$$

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

 $C_{\mu} = 0.085, \quad C_{1\epsilon} = 1.42 - \frac{\eta (1 - \eta/\eta_0)}{1 + \beta \eta^3}, \quad C_{2\epsilon} = 1.68$ (III.18)

 η_0 et β sont les constantes du modèle.

$$\eta_0 = 4.38$$
 et $\beta = 0.015$

 α_k et α_{ε} sont les inverses du nombre de Prandtl effectif pour k et ε

c) Modèle *k-E* Réalisable

" k- ε réalisable", est un modèle de turbulence relativement récent. A la différence des deux précédents modèles, il satisfait certaines contraintes mathématiques imposées au tenseur des tensions, en accord avec les propriétés physiques des écoulements turbulents. Proposé par Shih et al [127], il se distingue du modèle k- ε standard, par deux aspects importants:

- Une formulation différente de la viscosité turbulente.

- L'utilisation d'une nouvelle équation qui gouverne la vitesse de variation de la dissipation.

Ainsi, l'équation de transport de la dissipation découle de l'équation exacte de transport de la moyenne carrée des fluctuations tourbillonnaires. Ce modèle est constitué des équations de transport de l'énergie cinétique k et de la dissipation ε suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \rho \varepsilon$$
(III.19)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\varepsilon\overline{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S\varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu\varepsilon}}$$
(III.20)

Avec :

$$C_1 = max \left[0.43 \frac{\eta}{\eta + 5} \right], \qquad \eta \equiv S \frac{k}{\varepsilon}, \qquad S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$$

L'équation de transport cinétique a la même forme que celles des modèles k- ε standard et k- ε RNG, mais l'équation de transport pour la dissipation est différente. Le terme de

production de la turbulence, dans l'équation (III.20) pour la dissipation ε est donné par la relation :

$$P_{\varepsilon} := \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S \varepsilon$$

 $\rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{v\varepsilon}}$ est le terme de destruction.

d) Modèle k-w standard

Il repose sur le modèle k- ω de Wilcox [120]. Le modèle k- ω standard est un modèle de turbulence semi empirique, formé de l'équation de transport de l'énergie cinétique k comparable à celle du modèle k- ε , et de l'équation de transport pour la dissipation, qui quant 'à elle est différente. Au lieu de la dissipation sur l'unité de masse ε , on utilise la vitesse de variation de la dissipation spécifique ω . Cette quantité peut être considérée, comme le rapport entre ε et k. Les deux équations de transport pour l'énergie cinétique et la vitesse de variation de la dissipation spécifique prennent les formes suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k \overline{u_i}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - Y_k$$
(III.21)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\omega\overline{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \omega \right] + G_\omega - Y_\omega$$
(III.22)

Où G_k représente la génération de l'énergie cinématique et G_{ω} celle de la vitesse de dissipation spécifique. Les dissipations de k et de ω dues à la turbulence sont représentées respectivement par Y_k et Y_{ω} .

e) Modèle de transport Shear-Stress (SST) k-w

Le modèle SST $k-\omega$ (de transport à pression de cisaillement) a été élaboré par Menter [128] en 1994, pour combiner d'une manière efficace le modèle $k-\omega$, robuste et précis, dans la zone de proche paroi avec le modèle $k-\varepsilon$ adapté en champ éloigné.

Pour ce faire, le modèle *k-e* est converti par la formule *k-* ω . Le modèle *SST k-* ω est similaire au modèle *k-* ω standard, mais comporte des améliorations supplémentaires. Les détails de ce modèle sont donnés d'une façon très explicative dans Menter [128].

III.3.3. Equations des gaz réels

Alors que la loi des gaz parfaits reste approximativement précise pour les gaz à faibles pressions et à températures modérées, elle devient de plus en plus inexacte à des pressions plus élevées et à des températures plus basses. Pour intégrer les effets de la compressibilité sur l'hydrogène gazeux et sur le gaz naturel à haute pression, l'équation d'état de gaz réel est alors adoptée dans le cadre de ce travail.

Des équations d'état ont été développées pour des gaz réels [119]. À l'heure actuelle, il n'existe pas d'équation d'état unique qui prédit avec précision les propriétés de toutes les substances et dans toutes les conditions.

Quatre modèles de gaz réels sont disponibles dans la littérature, pour les calculs de densité du gaz [129] pendant le processus de remplissage :

- ✓ Equation d'état de Redlich-Kwong.
- ✓ Equation de Soave-Redlich-Kwong.
- ✓ Equation d' Aungier-Redlich et Kwong.
- ✓ Equation de Peng-Robinson.

III.3.3.1.Equation d'état de Redlich-Kwong

Introduite en 1949 [130], son utilisation reste encore très courante pour les propriétés de la phase gazeuse en raison de sa forme simple et de sa facilité de mise en œuvre. Elle est généralement plus précise que l'équation de Van der Waals et celle des gaz parfaits. Elle est donnée par :

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{\sqrt{T} V_m (V_m + b)}$$
(III.23)

Où p et T sont la pression et la température du gaz, R la constante des gaz parfaits, et V_m le volume molaire spécifique. Les constantes a et b sont données par:

$$a = (0.42748 R^2 T_c^{2.5})/p_c \ et \ b = (0.08662 RT_c)/p_c$$

Ces constantes peuvent être évaluées à partir des, température et pression (T_c et p_c) du point critique, de chaque gaz. (Pour l'hydrogène gazeux, $T_c = 32,97$ K et $p_c = 1,293$ MPa).

III.3.3.2. Equation de Soave-Redlich-Kwong

La modification proposée par Soave [131] introduit une fonction $\alpha(T, \omega)$ impliquant la température et le facteur acentrique ω (nombre conceptuel introduit par Pitzer [132]) pour remplacer le terme $1/\sqrt{T}$ de l'équation (III.23). L'équation modifiée est alors donnée par :

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a\alpha}{V_m (V_m + b)}$$
(III.24)

Avec :

$$a = \frac{0.42747R^2T_c^2}{p_c},$$

$$b = \frac{0.08664 RT_c}{p_c}$$

$$\alpha = \left(1 + (0.48508 + 1.55171 \,\omega - 0.17613 \,\omega^2)(1 - T_r^{0.5})\right)^2$$

$$T_r = \frac{T}{T_c}$$

Pour l'hydrogène, $\alpha = 1.202 \exp(-0.30288 T_r)$.

III.3.3.3. Equation d' Aungier-Redlich et Kwong

Son expression est [133] :

$$p = \frac{RT}{V_m - b + c} - \frac{a}{V_m (V_m + b)T_R^n}$$
(III.25)

Avec:

$$a = \frac{0.42747R^2T_c^2}{p_c}$$
$$b = \frac{0.08664 RT_c}{p_c}$$
$$c = \frac{RT_c}{p_c + \frac{a}{V_c(V_c + b)}} + b - V_c$$

 $n = 0.4986 + 1.1735\,\omega + 0.4754\,\omega^2$

V_c: Volume spécifique critique

T_R : Température réduite

III .3.3.4. Equation d'état de Peng-Robinson

L'équation d'état de Peng-Robinson [134] a pour expression :

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a\alpha}{V_m^2 + 2bV_m - b^2}$$
(III.26)

Où :

$$a = \frac{0.45724 R^2 T_c^2}{p_c}$$
$$b = \frac{0.07780 R T_c}{p_c}$$

$$\alpha = \left(1 + (0.37464 + 1.54226 \,\omega - 0.26992 \,\omega^2)(1 - T_r^{0.5})\right)^2$$

$$T_r = \frac{T}{T_c}$$

III.3.4. Modélisation numérique

III.3.4.1. Méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis est utilisée pour la discrétisation des équations modélisant le problème. Il s'agira de découper le domaine de calcul en une multitude de volumes de contrôle (cellules), enveloppant tout le domaine de calcul sans chevauchement et de telle façon que leur somme soit exactement égale au volume de celui-ci. Un point noté *P* est positionné au centre de chaque volume (centre du volume de contrôle), les nœuds des volumes voisins selon leur position (Nord, Sud, Est, Ouest) auront respectivement pour notation N, S, E, W (figure III.3). Les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie sont exprimées localement sous une forme intégrale. La pierre angulaire de cette méthode réside dans le théorème de *Gauss* (théorème de la divergence ou d'*Ostrogradski*) qui permet de transformer une intégrale de volume en une intégrale de surface. La résolution des équations discrétisées est entreprise à l'aide du logiciel ANSYS Fluent.



Figure III. 3: Volume de contrôle pour un écoulement bidimensionnel

Le domaine physique considéré est un réservoir cylindrique pour le stockage d'hydrogène gazeux et le gaz naturel. Ce domaine est divisé en un certain nombre de volumes finis 2D, de forme triangulaire.

III.3.4.2. Maillage à l'aide de GAMBIT

Le premier travail à accomplir dans la réalisation d'une simulation numérique est la définition d'un maillage adapté à l'écoulement, dont la qualité dépend la précision des calculs attendue. Un nombre de mailles insuffisant fera diverger les calculs ou sera responsable d'une diffusion d'erreur trop importante. Il faut donc trouver un compromis entre le nombre de mailles et le temps de calcul qui augmente considérablement avec le raffinement du domaine.

La création de la géométrie ainsi que le maillage dans nos simulations ont été effectués au moyen du programme de génération de maillage automatique GAMBIT 2.2.30. Ce mailleur propose des solutions étendues pour les géométries les plus complexes. Les types de maillages supportés sont de géométries 2D triangulaire/quadrilatérale, 3D tétraédrique/hexaédrique/pyramide/prisme et les maillages mixtes. GAMBIT est également utilisé pour définir les frontières appropriées au système considéré (interfaces, parois rigides, fluides etc.). Celui-ci permet de construire deux types de maillage, structuré ou non-structuré [135].

Pour nos configurations le maillage de calcul utilisé pour le modèle est illustré par la figure III.4. Un maillage triangulaire sous Gambit, d'une moyenne de 3 872 mailles est adopté. Des études antérieures [136] ont indiqué que des gradients de température existent au voisinage de l'entrée du réservoir où les vitesses de gaz les plus élevées sont observées. Pour

cela, le maillage est raffiné dans cette région [113], [136]. Il faut souligner que la qualité du maillage joue un rôle signifiant dans la précision et la stabilité du calcul numérique.



> Définition des frontières sous GAMBIT

En plus d'un maillage adéquat, les conditions aux limites sont très importantes pour obtenir une solution précise avec une convergence rapide. En effet, celles-ci spécifient l'écoulement et les variables thermiques du modèle physique et sont par conséquent des composantes indispensables pour les simulations par Fluent. De ce fait, il est très important de les spécifier correctement.

Les conditions aux limites imposées aux frontières, suivant la notation adoptée par GAMBIT (figure III.5), de la configuration bidimensionnelle étudiée du réservoir sont résumées dans le tableau III.2.

Frontière	Conditions	
1	Entrée de pression (Pressure inlet)	3
2	Symétrie (Symmetry)	
3 – 4	Paroi (Wall)	
Domaine	Fluide	2

Tableau III. 2: Conditions aux limites imposées aux frontières du domaine de calcul



Figure III. 5: Conditions aux limites dans gambit

III.3.4.3. Le code de calcul

La technique CFD repose sur une approche numérique des phénomènes d'écoulement, la modélisation de la turbulence étant l'un de ses éléments clé. Malgré les progrès considérables de l'informatique, ces vingt dernières années [122], la technique CFD, reste encore un domaine non maitrisé, car la résolution exacte des équations de Navier-Stokes pour des conditions aux limites données est encore, une tâche très difficile, voire impossible. D'ailleurs, cette technique se propose de fournir seulement des solutions numériques approximatives.

Néanmoins, l'étude de l'écoulement des fluides étant un domaine difficile à aborder et à mener expérimentalement, certains chercheurs préfèrent l'approche simulation, par l'intermédiaire de la technique CFD, même si cela nécessite des ressources importantes de calcul, en coût et en temps. A l'heure actuelle, il existe un certain nombre de codes tridimensionnels performants permettant la prédiction d'écoulements fluides par la résolution des équations de Navier stokes, dont les plus utilisés sont, CFX, FLUENT, PHOENICS, Star-CD et Flow-3D. Tous ces codes utilisent la méthode FVM (méthode des volumes finis) [137].

Le calcul numérique dans le cadre de ce travail a été mené à l'aide du code de calcul "Fluent" V15.0. Il s'agit d'un solveur utilisant la méthode des volumes finis pour la discrétisation des équations de conservation de la masse et de quantité de mouvement.

Le code "Fluent" est écrit en langage C et utilise pleinement la flexibilité et la puissance offertes par ce langage (allocation de la mémoire dynamique). En outre, il emploi une architecture qui lui permet de s'exécuter en tant que plusieurs processus simultanés sur le même poste de travail ou sur des postes séparés, pour une exécution plus efficace.

"Fluent" s'utilise à travers une interface graphique très simple. L'utilisateur avancé peut adapter ou augmenter l'interface aux besoins en écrivant des macros et des fonctions de menu, afin d'automatiser certaines procédures.

III.3.4.3.1. Conditions aux limites

La résolution des équations de transport dans la configuration de réservoir schématisées en figure III.5 nécessite de spécifier des conditions aux limites à l'entrée et sur l'enveloppe métallique du réservoir.

La principale différence constatée sur un ensemble de recherches en rapport avec des simulations sur le remplissage rapide [115], [116], [117], [119], [124], [138], réside dans le réglage des conditions aux limites à l'entrée du réservoir, qui domine directement la réponse thermodynamique et la stratégie correspondante du contrôle de la température pendant le processus de remplissage. Deux types de conditions aux limites d'entrée du réservoir sont couramment adoptés, l'entrée de pression et l'entrée de débit massique constant. Cependant, au cours de l'expérience réelle, le contrôle du remplissage rapide est principalement effectué en régulant la pression interne du cylindre, ce qui montre que la condition à la limite d'entrée de pression est la plus importante.

Dans la présente étude les conditions aux limites d'entrée utilisées sont illustrées par la figure III.6. La pression d'entrée du cylindre varie avec le temps selon les données expérimentales. Dans le cas du (CNG), la pression à l'entrée du réservoir est définie en

utilisant les valeurs mesurées de Shipley [139]. Dans le cas de (CHG) les données expérimentales de Hirotani et al [140] (figure III.6), sont adoptées.



Figure III. 6: Evolution temporelle de la pression d'entrée du réservoir dans le cas du remplissage rapide (CHG) et (CNG) [139], [140]

La température d'entrée du gaz est supposée être la température ambiante, qui est considérée constante pendant tout le processus de remplissage du fait que ce dernier est très rapide.

Un coefficient de transfert de chaleur constant de 6 W/m²K est considéré sur la paroi extérieure de l'enveloppe du réservoir [47], [119], et aucune condition aux limites n'est spécifiée au niveau des parois intérieures.

Les conditions aux limites utilisées pour simuler le remplissage du réservoir sont consignées dans le tableau III.3 [119].

Condition aux limites	
Température ambiante	293 K
Coefficient de transfert de chaleur par convection entre la	$6 \text{ W/m}^2\text{K}$
surface du cylindre extérieur et l'air ambiant	
Pression d'entrée du gaz	(figure III.6)
Température d'entrée du gaz	293 K

Tableau III. 3: Conditions aux limites

Les conditions initiales du modèle sont définies par la température et la pression initiales du gaz dans le cylindre. On suppose que les parois du cylindre sont à la même température que le gaz et que la pression et la température du gaz sont uniformes dans le cylindre avant le remplissage et égales respectivement à 2, 5, 10, 15, 25 MPa et à 293 K.

T	es propriétés	du mat	ériau du i	réservoir	sont donn	ées dans	le tableau	III 4
L	les proprietes	uu mai	chau uu		som uom	ices uaits	ic tableau	111.4.

Propriétés du matériau	
Conductivité thermique	202 W /m.K
Densité	2719 kg /m ³
Chaleur spécifique	871 J/kg.K

Tableau III. 4: Propriétés du matériau du réservoir

III.3.4.3.2. Choix de la formulation du solveur

Le logiciel Fluent propose deux méthodes numériques :

• La formulation "découplée", ou isolée (implicite), qui résout les équations gouvernantes, séquentiellement, c'est-à-dire indépendantes les unes des autres. Elle est employée pour les écoulements incompressibles et ceux dont la compressibilité est modérée.

• La formulation "*Coupled*", ou couplée (implicite ou explicite), qui permet la résolution simultanée des équations gouvernantes, couplées les unes avec les autres. Cette démarche a été conçue principalement pour les écoulements compressibles à grandes vitesses (Mach et Reynolds élevés). Ce qui lui donne un avantage pour le traitement des écoulements à forte interdépendance entre la densité, la pression et la température. Cette formulation est fortement recommandée pour les écoulements transsoniques à un nombre de Reynolds élevé. C'est pour cette raison qu'elle a été choisie pour nos simulations bien qu'elle exige le double de la mémoire que nécessite la formulation découplée dans le cas des écoulements instationnaires.

Les deux méthodes numériques emploient un schéma de discrétisation similaire (méthode des volumes finis), mais les approches utilisées pour linéariser et résoudre les équations discrétisées, sont différentes.

La démarche suivie par Fluent, au cours d'une itération, pour la résolution des équations de Navier-Stokes est illustrée par la figure III.7. Une boucle est constituée des étapes suivantes :

1. A partir de l'initialisation puis de l'itération précédente, les propriétés du fluide (viscosité turbulente, pression, masse volumique ...), sont mises à jour.

2. Les équations discrétisées de la vitesse et de la pression sont résolues de manière couplée.

3. A partir des nouveaux champs de pression et de vitesse, les flux de masse à travers les faces des cellules, sont mis à jour.

4. Les équations discrétisées de transport des quantités turbulentes sont résolues.

5. La convergence du calcul d'une itération à l'autre, est contrôlée en s'assurant de la baisse des résidus.



Figure III. 7: Schéma général d'une itération de résolution numérique [141]

III.3.4.3.3. Choix du schéma de discrétisation

Le code Fluent nous permet de choisir le schéma de discrétisation pour les termes convectifs de chaque équation gouvernante (le second ordre est automatiquement le plus utilisé pour les termes visqueux). Quand le solver couplée (coupled) est utilisé, les équations sont résolues en utilisant par défaut le schéma du second ordre. Les autres équations utilisent le schéma du premier ordre par défaut.

Le schéma du premier ordre converge facilement mais les résultats ne reflètent pas suffisamment la réalité physique. Le schéma du second ordre qui donne de meilleurs résultats est utilisé malgré la difficulté pour atteindre la convergence. Pour nos simulations le schéma second ordre upwind a été choisi.

Notons qu'il existe d'autres schémas de discrétisation, tels que:

• Le schéma "QUICK" (Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinetics) qui procure une meilleure précision que le schéma au second ordre, pour les écoulements rotationnels et tourbillonnaires (Swirling) avec un maillage régulier. Cependant, il ne s'applique pas à un maillage triangulaire.

• Le schéma "Power Law" qui est plus précis que le "First Order Upwind Scheme" pour les écoulements à très bas nombres de Reynolds (<5).

III.3.4.3.4. Convergence d'un calcul

Une étape importante lors d'un calcul est l'observation de la convergence de ce dernier. Ceci peut être réalisé à partir du tracé des résidus pour chaque équation à résoudre par le code.

La convergence sous "Fluent" est principalement surveillée suivant la valeur des résidus des différents paramètres de l'écoulement. Le logiciel cessera les itérations dès lors que tous les résidus calculés sont sous la valeur du critère de convergence entrée par l'utilisateur.

Dans la plupart des cas, le critère de convergence par défaut dans FLUENT (basé sur le *résidu*) est suffisant. La solution est considérée comme convergente quand les résidus atteignent une valeur de 10^{-3} . Toutefois, dans certains cas il faut pousser les calculs à 10^{-4} ou 10^{-6} afin d'obtenir des résultats plus précis, (il n'a y pas de règle générale).

La figure III.8 illustre les valeurs choisies comme critères de convergence pour tous les cas examinés numériquement.

Options	Equations				-
V Print to Console	Residual	Monitor	Check Convergence	Absolute Criteria	<u>_</u>
V Plot	continuity			1e-05	
Window	x-velocity	V		1e-05	=
Iterations to Plot	y-velocity	V		1e-05	
1000	energy		Cap 🔽 e rectar	1e-05	-
	Residual Values			Convergence Cr	iterion
1000	Normalize		Iterations 5	absolute	
	Compute L	ocal Scale			

Figure III. 8: Critères de convergence adoptés pour les calculs avec FLUENT [119]

Une partie des calculs de nos simulations a été effectuée sur un PC Pentium \mathbb{R} Dual-Core CPU et l'autre sur un PC intel \mathbb{R} CoreTM i7. Les temps des simulations prenaient en moyenne approximativement une quinzaine de jours, pour un cas typique (nécessitant des temps d'écoulement de 50 à 80 secondes, avec des pas du temps de l'ordre 10⁻⁵).

III.3.4.3.5. Sensibilité du maillage

Après avoir établi le modèle mathématique décrivant le problème étudié et choisi la méthode numérique appropriée pour sa résolution, des tests de calculs ont été exécutés pour examiner l'effet du maillage adopté dans les calculs sur la solution numérique obtenue. Le modèle a été évalué pour trois grilles constituées de 1667, 3872 et 4517 cellules (figure III.9). L'écart de température du modèle, en utilisant 1667 et 3 872 mailles est approximativement de 5%, alors que si l'on considère 3872 et 4517 cellules, il n'est plus que de 0,2 %. Aussi, le maillage comportant 3872 cellules sera retenu pour nos simulations.



Figure III. 9: Variation temporelle de la température de (CHG) pendant le ravitaillement pour différents maillages

III.3.4.4. Validation des résultats numériques

Les résultats numériques de la température maximale du gaz dans le cylindre, obtenus dans le cadre de notre étude, sont comparés aux valeurs issues de l'étude expérimentale de Yan-Lei Liu et al [46] du processus de remplissage rapide d'hydrogène comprimé (figure III.10). Pour tous les remplissages, la température ambiante, la pression finale et la pression initiale sont respectivement de 20 °C, 35 MPa et (15 MPa, 25 MPa). Il est aisé de remarquer un accord satisfaisant entre les valeurs mesurées et numériques. Nous pouvons également noter que l'élévation de la température maximale de l'hydrogène au sein de réservoir atteint 45 K.





Conclusion

Après un rappel des équations régissant les écoulements compressibles, différents modèles de turbulence ont été présentés. La géométrie du domaine d'étude a été présentée, ce dernier a été subdivisé en des volumes de contrôle discrets en utilisant un maillage de calcul par le mailleur «Gambit».

Le modèle CFD développé dans le cadre de ce travail inclut les effets de l'écoulement visqueux, instationnaire et compressible. Les effets des gaz réels sont considérés également. Le logiciel de calcul FLUENT d'Ansys 15.0 a été utilisé. Les conditions aux limites imposées dans Fluent sont précisées. La validation du modèle est réalisée à l'aide d'un ensemble de travaux de la littérature [46], [47].

Chapitre IV ~ Résultats et interprétations

Introduction

Les propriétés thermiques d'un gaz peuvent affecter significativement les paramètres de sécurité du processus de remplissage d'un réservoir. Si un temps de remplissage très court est bénéfique sur le plan économique, une élévation conséquente de la température du gaz (hydrogène, méthane, mélange H_2 - CH_4 dans le cadre de cette étude), lors du processus de remplissage d'un réservoir, peut se produire et conduire à une infraction des normes de sécurité. L'effet de l'ajout d'hydrogène au méthane (enrichissement en H_2 du CH_4), sur les paramètres, vitesse et température du mélange CH_4 - H_2 , lors de la phase dynamique de charge dans une enceinte cylindrique sera examiné.

IV .1. Effet du type de gaz

Avant d'aborder les points susmentionnés, il nous a paru utile d'examiner l'impact de la nature du gaz sur le processus de remplissage d'un réservoir. Deux combustibles gazeux, l'hydrogène et le méthane, ont été considérés. La visualisation numérique des comportements dynamique et thermique des gaz CHG (Gaz d'Hydrogène Comprimé) et CNG (Gaz Naturel Comprimé), à différents temps du processus de remplissage d'un réservoir, est illustrée par les figures IV. 1, IV. 2, IV. 3 et IV. 4.

IV .1.1. Vitesse du gaz pendant le ravitaillement

L'analyse des contours de vitesse des combustibles gazeux, CHG et CNG, aux premiers instants de remplissage, (t= 0.5 s et t= 2 s), pour une pression initiale P₀ de 2 MPa (figure IV.1), révèle que la vitesse des gaz la plus élevée est située dans la région d'entrée du réservoir et au voisinage de l'axe de symétrie de ce dernier. Celle-ci diminue au fur et à mesure que s'effectue le remplissage, résultant du fait que la vitesse d'écoulement diminue graduellement avec l'augmentation de la densité du gaz, à mesure que le réservoir se remplit.

Nous pouvons également noter, qu'à t= 0.5 s, la vitesse du CHG, estimée à 81.01 m/s est plus élevée que celle du CNG, qui quant 'à elle est de l'ordre de 17.82 m/s et ce en raison de la plus faible densité de l'hydrogène.



Figure IV. 1: Contours de la vitesse du gaz dans le cylindre aux premiers instants du ravitaillement dans (a) cylindre de CHG, (b) cylindre de CNG

Les vecteurs de vitesse des combustibles gazeux CHG et CNG, aux premiers instants du processus de remplissage (à t=1 s), pour une pression initiale P_0 de 2 MPa, sont illustrés par la figure IV.2. On peut observer sur cette figure que la vitesse d'écoulement à l'entrée et près de l'axe de symétrie du réservoir pendant le remplissage de CHG et de CNG indique une valeur élevée. Cela est dû au fait que le flux atteint le fond du réservoir, puis se dirige (en sens inverse), vers l'entrée du réservoir, formant ainsi un flux secondaire en plus du flux à l'entrée.



Figure IV. 2: Vecteur de vitesse dans (a) cylindre de CHG, (b) cylindre de CNG

IV .1.2. Distribution de la température dans le réservoir

Concernant la distribution de la température, des combustibles gazeux CNG et CHG dans un cylindre, pendant le processus de remplissage, des simulations numériques ont été effectuées à des intervalles réguliers de 5, 10, 15 et 20 s. L'examen des figures IV. 3 (pour le CHG) et IV. 4 pour le (CNG), révèle que pour les deux combustibles, la température n'est pas uniforme dans le cylindre mais augmente progressivement dans les directions axiale et radiale. Il apparait également que lors du remplissage, la température la plus élevée se produit dans la région caudale du réservoir tandis que la plus basse se situe près de l'entrée du réservoir. Nous pouvons également noter que dans l'intervalle de temps de 20 s, l'élévation de la température du CNG, environ de 23.31 K est plus faible que celle de l'hydrogène comprimé, qui quant' à elle atteint 42.67 K.







Figure IV. 4: Contours de la température du CNG dans le cylindre à différents instants de remplissage

Ajouté aux observations précédentes, il a été noté également que pour tous les temps du processus de remplissage considérés (5, 10, 15 et 20 s), que la température maximale se situe dans la région caudale du réservoir, à une distance axiale de x=1.56 m. Ainsi, il nous a paru utile de porter une attention particulière à l'étude de la variation temporelle de la température maximale dans la région caudale du réservoir et qui fera l'objet de la partie qui suit.

IV .1.3. Température maximale des combustibles gazeux

La distribution temporelle de la température maximale des gaz CNG et CHG dans le cylindre, lors du remplissage et pour une distance axiale de 1,56 m est étudiée. Les résultats numériques obtenus (figure IV. 5) permettent de noter que l'augmentation temporelle de la température du méthane (CNG) est de moindre importance que celle de l'hydrogène (CHG). Ainsi et pour une température initiale de l'ordre de 293 K, une élévation de température (écart entre les valeurs initiale et finale de températures), de près de 40 K est enregistrée pour le

CNG, alors qu'elle atteint approximativement les 50 K pour le CHG. Ces comportements sont liés aux propriétés thermodynamiques des deux combustibles gazeux [142], [143], [144].



Figure IV. 5: Variation temporelle de la température maximale des combustibles gazeux CHG et CNG dans le cylindre pour une distance axiale de 1,56 m

La distribution axiale de la température des deux combustibles gazeux, dans un cylindre, aux temps 2 s et 10 s du processus de remplissage est représentée sur la figure IV. 6. Nous pouvons remarquer que si le profil de température le long de la ligne centrale est quasisimilaire pour CNG et CHG pour les deux instants de remplissage considérés, les températures maximales atteintes sont par contre différentes. En effet des maximas de températures de 323.29 K et de 305.8 K sont obtenus respectivement pour CHG et pour CNG, à t=10 s.

Il apparait, également que la température la plus basse du gaz est située au niveau de l'entrée du réservoir, alors que la plus élevée est atteinte à l'autre extrémité de celui-ci, ce qui peut s'expliquer par la pression exercée par le combustible gazeux entrant sur celui contenu dans le cylindre (au fur et à mesure du remplissage). Il faut signaler également que dans les réservoirs de carburant cylindriques, les mesures de température sont en pratique [44] effectuées au niveau de l'axe du réservoir cylindrique (position où les thermocouples peuvent être fixés).

La distribution radiale de la température des deux combustibles, aux temps de remplissage de 2 s et 10 s, et pour une distance axiale de 0,5 m a été également examinée. Les courbes de la figure IV.7, révèlent un gradient de température significatif dans la direction radiale, au cours du processus de remplissage. L'échauffement du CHG est plus important que celui du CNG.



Figure IV. 6: Distribution de la température axiale dans le cylindre aux temps de remplissage de 2 s et 10 s

(a) CHG, (b) CNG



Figure IV. 7: Distribution de la température radiale (x = 0.5 m) dans le cylindre aux temps de remplissage de 2 s et de 10 s

(a) CHG, (b) CNG.

IV.2. Effet de l'enrichissement du méthane à l'hydrogène sur la température

Pour étudier l'effet de l'addition de l'hydrogène au gaz naturel (Hydrogène Gaz Naturel Comprimé HCNG), sur la température, des simulations numériques ont été effectuées avec des pourcentages de 0%, 8%, 15% et 20% d'hydrogène.

La répartition de la température dans le cylindre à l'instant t=20 s du ravitaillement de HCNG est illustrée par la figure IV. 8. Il est aisé de remarquer que la température du HCNG dans le cylindre se répartit de manière non uniforme et augmente progressivement dans les directions axiale et radiale. De plus la visualisation des contours montre que le réservoir comporte deux régions principales, la région d'entrée avec un gradient de température élevé et une région d'écoulement caudale sans changement significatif de température. Le gradient de température élevé au voisinage de l'entrée est dû à l'influence du gaz entrant plus froid [145].

Nous pouvons également noter que l'augmentation du taux d'hydrogène dans le HCNG (hythane), conduit à un accroissement de la température de ce dernier [146]. L'analyse des résultats numériques, permet d'avancer que l'élévation de la température dans le réservoir avec 8% d'H₂ est plus faible que celles dans les réservoirs de 15% H₂ et de 20% H₂.



Figure IV. 8: Distribution de la température du HCNG, dans le réservoir pour différents

pourcentages de H_{2.}

La partie qui suit, sera réservée à l'effet de l'addition d'hydrogène au gaz naturel comprimé, sur la variation temporelle de la température dans la région caudale x=1.56 m distance où la température maximale a été observée selon la section précédente. Des taux d'hydrogène de 0%, 10%, 20% et 30%, seront considérés.

La variation temporelle de la température maximale du HCNG, pour une pression initiale de 2 MPa et un débit de 41 g/s et pour différents taux d'hydrogène est représentée sur la figure IV. 9. L'analyse des résultats numériques montre que la température du HCNG à l'intérieur du cylindre augmente progressivement avec le temps, pour tous les taux d'H₂ considérés. Ce comportement peut être expliqué par la compression du gaz entrant sur celui déjà contenu dans le cylindre, au fur et à mesure du remplissage, ce qui conduit à une augmentation de la pression (travail de compression converti en énergie interne pendant le processus de remplissage de réservoir [145]), et donc de la température, cette dernière atteindra sa valeur maximale à la fin du remplissage.

Il peut être observé également sur cette figure, que l'élévation de la température maximale est d'autant plus importante que le taux d'hydrogène ajouté est grand, (48 K pour un ajout de d'H₂ de 20% et 40 K pour le gaz exempt d'hydrogène).



Figure IV. 9: Variation temporelle de la température maximale du HCNG, Pour différents taux d'hydrogène ($P_0=2$ MPa et $\dot{m}=41$ g/s)

L'effet de la proportion d'hydrogène ajoutée, sur la distribution axiale de la température du HCNG aux instants t=10 s et t=40 s du processus de remplissage, est mis en évidence par les courbes de la figure IV. 10. L'analyse des profils de température le long de la ligne centrale, qui ont une forme similaire pour les quatre taux d'hydrogène considérés, conduit aux mêmes remarques que celles formulées pour les courbes de la figure IV.9. Il apparait clairement que la température du HCNG, augmente, d'une part avec le taux d'hydrogène et d'autre part avec la distance axiale, et ce pour les temps de remplissage de 10 et 40 s. De plus il existe un gradient de température important le long du trajet du jet. La température minimale du HCNG est observée près de l'entrée du cylindre, dû au fait que le gaz entrant est à une température beaucoup plus basse que la température du gaz à l'intérieur du réservoir. Néanmoins, le gaz injecté se réchauffe rapidement en raison du transfert de chaleur avec le HCNG pré-rempli. La température du HCNG la plus élevée est située dans la région caudale, en raison de la compression qui est plus importante dans cette région [147]. La simulation numérique de la distribution axiale de température du gaz étudié dans le réservoir permettra une meilleure compréhension de la variation spatiale de la température pendant le processus de remplissage.

Les distributions radiales de la température pour différentes proportion d'hydrogène ajoutées au méthane pendant le processus de remplissage, à la distance x=0.5 m et aux instants t=10 s et t=40 s, illustrées respectivement par les courbes (a) et (b) de la figure IV. 11, présentent une allure similaire. Nous pouvons également noter l'existence d'un gradient de température significatif dans la direction radiale, et cela pour les différents taux d'hydrogène considérés. De plus, les profils de température radiale (pour tous les taux d'H₂) montrent une diminution significative de la température au niveau de l'axe du cylindre, lorsque le jet du gaz frais provenant de l'entrée se dirige le long de celui-ci.



Figure IV. 10: Distribution de la température axiale du HCNG dans le cylindre pour différentes proportions d'hydrogène

(a) t=10 s, (b) t=40 s



Figure IV. 11: Distribution de la température radiale (x= 0.5 m) du HCNG dans le cylindre pour différentes proportions d'hydrogène

(a) t=10 s, (b) t=40 s
Dans la partie qui suit, notre attention portera sur l'effet de la pression initiale sur la température du CHG. La vitesse du combustible CHG, sera également examinée.

IV.3. Effet de la pression

Avant d'entamer l'étude de l'effet de la pression initiale sur la température du CHG, les variations temporelles de la température et de la pression du CHG dans le cylindre, au cours du processus de ravitaillement rapide, de même que la variation de la température du CHG en fonction de la pression à l'intérieur du réservoir, seront examinées.

L'analyse des courbes de la figure IV. 12 représentant les variations temporelles de la pression et de la température du CHG dans le cylindre au cours du processus de ravitaillement rapide de la pression initiale $P_0 = 10$ MPa jusqu'à la pression finale $P_f=35$ MPa, et à la température initiale $T_0=293$ K, permet de noter que la pression du CHG augmente rapidement et de manière quasi linéaire. Par contre il est aisé de remarquer que la variation de la température augmente quant'à elle de façon non linéaire.

L'observation de la figure IV. 13, illustrant la variation de la température du CHG en fonction de la pression à l'intérieur de cylindre, de la pression initiale $P_0 =10$ MPa jusqu'à la pression finale $P_f=35$ MPa, et à la température initiale $T_0=293$ K montre que le taux d'augmentation de la température diminue lorsque la pression dans le cylindre augmente à plus de 30 MPa. Ce comportement est dû probablement au taux croissant peu élevé de la pression, conjugué au transfert vers les parois du cylindre de la chaleur générée, à la fin du processus de remplissage. Il est à noter également que l'augmentation de la température du CHG survient principalement au premier quart du temps de remplissage du réservoir [147], [148], [149].



Figure IV. 12: Variations temporelles de la température et de la pression du CHG au cours du remplissage du cylindre

(P₀=10 MPa, P_f=35 MPa, T₀=293 K)





IV .3.1. Effet de la pression initiale sur la température

La pression initiale du CHG dans le réservoir ayant un effet significatif sur la température du gaz d'hydrogène comprimé pendant le ravitaillement, des simulations de remplissages à des pressions initiales de 2, 5, 15 et 25 MPa jusqu'a 35 MPa, et à une température initiale de 293 K, ont été entreprises, pour une meilleure compréhension de celui-ci.

La distribution de la température du CHG pour différentes pressions initiales (2, 5, 15 et 25 MPa) à l'instant 10 s, sont représentées sur la figure IV.14. Il est aisé de remarquer que le remplissage à une pression initiale de 2 MPa conduit à l'augmentation de température du CHG dans le réservoir la plus importante et celui à la pression initiale de 25 MPa à la plus faible.





La variation temporelle de la température maximale dans la région caudale du réservoir pour différentes pressions initiales a également retenu notre attention et fera l'objet de ce qui suit.

La température maximale du CHG (à la distance x=1.56 m) pendant le remplissage du réservoir, pour des pressions initiales de 5, 10, 15 et 25 MPa, jusqu'à la pression finale de 35 MPa et à la température initiale 293 K, en fonction du temps, est illustrée par la figure IV.15. Nous pouvons observer que toutes les courbes présentent une allure similaire. Il apparait également que la plus grande augmentation de température se produit aux premiers instants du remplissage, puis le taux d'accroissement de la température du CHG diminue graduellement tout au long du remplissage. En outre, il est aisé de remarquer que le remplissage à la pression initiale de 5 MPa conduit à la plus forte augmentation de température du CHG dans le réservoir, et celui à 25 MPa à la plus faible. Il apparait ainsi que l'augmentation de la température du CHG dest d'autant plus faible que le remplissage est opéré à une pression initiale plus élevée, résultant d'une plus grande quantité (masse) de CHG chargée, lorsqu'on démarre le remplissage à une pression plus basse [150]. Les remplissages à partir de pressions plus élevées sont plus courts, car il faut moins de temps pour obtenir la quantité de CHG souhaitée dans le réservoir [144].



Figure IV. 15: Variation temporelle de la température maximale du CHG à différentes pressions initiales dans le cylindre

Les résultats obtenus dans la partie précédente, nous ont incités à porter une attention particulière à l'examen de la relation entre la température maximale à la fin de remplissage du réservoir du CHG et la pression initiale. La courbe de la figure IV. 16 révèle une variation linéaire entre les deux grandeurs. De plus, il apparait que la température maximale à la fin de remplissage du CHG dans le réservoir est d'autant moins importante que la pression initiale de remplissage est plus élevée [151].



Figure IV. 16: Effet de la pression initiale sur la température maximale à la fin du remplissage du CHG dans le réservoir.

Les températures du gaz d'hydrogène comprimé (CHG) le long de l'axe central à l'instant t= 20 s et pour différentes pression initiales (5, 15 et 25 MPa), d'une part et à différents instants de remplissage (t=2, 10 et 24 s), à une pression initiale P_0 = 25 MPa et jusqu'à la pression finale P_f =35 MPa sont représentées respectivement sur les figures IV. 17 et IV. 18. L'observation de l'ensemble des courbes des deux figures révèle une allure similaire. De plus, on peut remarquer que la température du CHG simulée le long de l'axe central augmente considérablement de l'entrée vers l'extrémité opposée du réservoir, résultant de la compression (et donc de la température du CHG), qui est plus importante dans la région caudale du réservoir.



Figure IV. 17: Distribution de la température axiale du CHG dans le réservoir pour différentes pressions initiales à l'instant t=20 s



Figure IV. 18: Distribution de la température axiale du CHG dans le réservoir à différents instants de remplissage

(P₀= 25 MPa, P_f=35 MPa)

La variation de la température du CHG dans la direction radiale du réservoir pour une pression initiale $P_0=5$ MPa, aux instants de remplissage t=2 s et t=20 s et aux emplacements horizontaux x /L = 0.2, 0.35 et 0.5, est représentée sur la figure IV. 19. Nous pouvons noter l'existence d'un gradient de température qui est significatif dans la direction radiale au voisinage du tube d'entrée du réservoir, puis qui diminue à quelques centimètres le long de la direction axiale. En outre, les profils de température du CHG, aux deux instants de remplissage considérés, montrent une forte baisse de température à la ligne centrale du cylindre du CHG, due au gaz frais entrant.



Figure IV. 19: Distribution de la température radiale du CHG dans le réservoir (a) à 2 s, (b) à 20 s

 $(P_0 = 5 \text{ MPa}, P_f = 35 \text{ MPa})$

IV .3.2. Vitesse du CHG

Les contours de vitesse du CHG dans le cylindre à l'instant t=2 s du remplissage pour différentes pressions initiales sont illustrés par la figure IV.20. Il est aisé de constater que la vitesse du CHG, n'est pas uniforme dans le cylindre. Nous pouvons également remarquer une réduction de la vitesse d'écoulement du CHG avec l'augmentation de la pression initiale, résultant probablement de l'accroissement de la densité du CHG due elle-même, à l'augmentation de la pression [47], [152]. Des variations assez importantes, de l'ordre de 36 m.s⁻¹ et 6.31 m.s⁻¹, respectivement pour des pressions initiales de 2 MPa et 15 MPa, sont observées au niveau de l'injection dans le réservoir.



Figure IV. 20: Contours de vitesse du CHG dans le réservoir à l'instant t= 2 s pour différentes pressions initiales

Les profils de la vitesse axiale du CHG dans le réservoir aux instants correspondant au début, au quart, à la moitié et aux $\frac{3}{4}$ de la durée de remplissage, à partir d'une pression initiale P₀=2 MPa et jusqu'à la pression finale P_f=35 MPa, (figure IV.21), ont une allure quasilinéaire pendant la phase de charge du réservoir. Il apparait également que la vitesse du CHG chute de sa valeur maximale à l'entrée du réservoir à une valeur nulle à la région caudale. Par ailleurs et au fur et à mesure que le temps augmente, la valeur de la vitesse à l'entrée du réservoir diminue en raison de l'augmentation de la densité du CHG, pendant le remplissage. Il en résulte ainsi, qu'avec une plus grande densité, une vitesse moindre est nécessaire pour atteindre le même débit massique de gaz. Il convient également de noter que la vitesse du CHG la plus élevée est située dans la région d'entrée du réservoir.



Figure IV. 21: Variation de la vitesse axiale du CHG dans le réservoir pendant le remplissage à différents instants $(P_0=2 MPa, P_f=35 MPa)$

L'examen des courbes de la figure IV. 22, illustrant l'évolution de la vitesse temporelle du CHG au cours du processus de remplissage, pour trois positions différentes dans le réservoir (L =0, L/4 et L/2 (P_0 =10 MPa, P_f =35 MPa), révèle que la vitesse du CHG la plus élevée se produit dans la région d'entrée du réservoir. Celle -ci diminue à mesure que le remplissage progresse. Ceci est dû à l'augmentation de la densité résultant de celle - de la pression. En effet, l'accroissement rapide de la quantité de carburant stockée (CHG) conduit à une plus grande compression à l'intérieur du réservoir [145] du carburant et donc à une plus forte élévation de sa température.



Figure IV. 22: Variation temporelle de la vitesse du CHG dans le réservoir pour différentes positions $(P_0=10 \text{ MPa}, P_f=35 \text{ MPa})$

La distribution radiale de la vitesse d'écoulement du CHG dans le réservoir, aux instants t= 2, 20 et 46 s et pour les deux distances x=0.4 m et x=0.8 m, est illustrée par les courbes de la figure IV. 23. Nous pouvons aisément remarquer que la valeur de la vitesse d'écoulement du CHG, est maximale à l'entrée du réservoir pendant le remplissage, aux tous les instants du processus puis diminue rapidement, juste après. Ceci est dû à l'augmentation de la densité découlant de celle de la pression. Il apparait en outre, que pour la distance x=0.8 m, la vitesse du gaz hydrogène comprimé augmente dans la région proche de la paroi intérieure, à la moitié du cylindre de CHG. Ceci est causé par le retour d'écoulement du gaz hydrogène comprimé dans cette région, tel qu'expliqué dans le paragraphe IV .1.1



Figure IV. 23: Distribution de la vitesse radiale du CHG à différents instants de remplissage du réservoir et aux distances (a) x=0.4 m (b) x=0.8 m (P₀=2 MPa, P_f=35 MPa)

L'effet de la pression initiale sur les distributions axiale et radiale (x=0.4 m) de la vitesse d'écoulement du CHG, à l'intérieur du réservoir à t=2 s, est mis en évidence par les courbes de la figure IV. 24. Nous pouvons noter que les profils de vitesse sont similaires pendant le régime de charge du réservoir, du gaz d'hydrogène comprimé. Il apparait également que l'augmentation de la pression initiale, conduit à une réduction de la vitesse du CHG dans les directions radiale et axiale du réservoir, probablement due à l'augmentation de la pression et donc de celle de la densité du CHG, dans le réservoir. Ainsi pour le même débit

massique, une plus grande densité conduit à une réduction de la vitesse du CHG dans le cylindre.



Figure IV. 24: Distribution des vitesses (a) axiale (b) radiale (à la distance x=0.4 m) du CHG dans le réservoir pour différentes pressions initiales et à t=2 s

IV.4. Effet du temps total de remplissage

L'effet du temps total de remplissage du CHG dans le réservoir sur la température maximale (x=1.56 m) du CHG, a été étudié. Pour cela, des simulations aux temps de remplissage total de 40 s, et de 60 s, à une pression initiale $P_0=10$ MPa et jusqu'à une pression finale $P_f=35$ MPa (arrêt du remplissage) ont été entreprises. Les résultats obtenus (figure IV.25), mettent en exergue que le temps de remplissage total le plus grand (t=60 s), ''qui correspond à un remplissage lent'', conduit à une élévation de température du CHG, plus faible que celle dans le cas d'un remplissage total de temps plus court (t=40 s) ''remplissage rapide''. Ce comportement pourrait être expliqué par l'absorption par la paroi intérieure du cylindre, de l'énergie interne découlant de la transformation de l'énergie cinétique et du transfert de cette chaleur avec le milieu extérieur [44], [46], sur un temps plus long, que dans le cas du remplissage total de 40 s.

106





L'analyse des contours de température du gaz d'hydrogène comprimé, dans le cylindre pour les deux temps de remplissage de 40 s et de 60 s, (figure IV. 26), permet de noter une stratification axiale et verticale de la température du CHG.





Les profils de distribution de la température radiale du CHG dans le réservoir, aux distances x=0.4 m et x=0.8 m, pour les temps de ravitaillement total, le plus court (t_{otal} =40 s) et le plus long (t_{otal} = 60 s), sont tracés sur la figure IV.27. Il est aisé de remarquer d'une part, que le temps total de remplissage du CHG le plus court présente la plus grande variation de température dans la direction verticale, et que d'autre part, le gradient de température le plus élevé est situé au voisinage du tube d'entrée du réservoir du CHG.

Ce comportement est observé pour les deux temps de remplissage total du CHG dans le réservoir. Il peut être également noté que les profils de température le long de la direction radiale montrent une baisse significative de la température au niveau de la ligne axiale du cylindre du CHG (due à l'entrée de gaz frais).



Figure IV. 27: Distribution de la température radiale du CHG dans le réservoir pour différents temps de remplissage total à l'instant t=2 s (a) x=0.4 m (b) x=0.8 m

Les évolutions temporelles de l'enthalpie et l'entropie du gaz d'hydrogène comprimé, dans le réservoir lors de son ravitaillement, à partir d'une pression initiale $P_0=10$ MPa et jusqu'à une pression finale $P_f=35$ MPa, et pour le temps total de remplissage de 60 s, a également retenu notre attention. Les résultats des simulations (figure IV. 28), montrent clairement que l'enthalpie du CHG dans la direction axiale du cylindre augmente progressivement avec le temps, alors que l'entropie du CHG dans le réservoir, quant'à diminue à mesure que le remplissage progresse.



Figure IV. 28: Variations temporelles de l'enthalpie et de l'entropie du CHG dans le réservoir ($P_0=10$ MPa, $P_f=35$ MPa)

IV. 5. Effet du débit massique sur la température

La température maximale du CHG dans le cylindre joue un rôle important en termes de sécurité. Le débit massique de remplissage du CHG est quant'à lui, un paramètre crucial du ravitaillement d'un réservoir. Il a été montré précédemment que le ravitaillement en gaz d'hydrogène comprimé, d'un réservoir, doit être accompli sur une courte période et qu'un débit massique élevé conduit à une grande vitesse à l'entrée du réservoir du gaz d'hydrogène comprimé [47].

Aussi et afin de cerner l'effet du débit massique d'une part, sur la température du CHG à différents instants du ravitaillement d'un réservoir et d'autre part, sur la température maximale du CHG dans le cylindre du véhicule à hydrogène, des simulations numérique ont été conduites. Pour le premier point, deux débits massiques de remplissage (25 g/s et 41 g/s) ont été considérés et pour le second point, différents débits massiques de remplissage (130g/s, 65 g/s, 41 g/s et 25 g/s), et une pression initiale $P_0=2$ MPa ont été pris en compte. L'analyse des résultats reportés sur les figures IV.29, IV.30 et IV.31, permet de remarquer que l'augmentation de la température du CHG est d'autant plus importante que le débit massique de remplissage est élevé. Cette tendance a été également rapportée par d'autres auteurs [47], [147], [153], [154]. Par ailleurs la température (non uniforme) du CHG à l'intérieur du cylindre augmente progressivement dans les directions axiale et radiale.



Figure IV. 29: Contours de la température du CHG dans le cylindre à différents instants de remplissage (*m*=25 g/s)



Figure IV. 30: Contours de la température du CHG dans le cylindre à différents instants de

remplissage (*m*=41 g/s)

Concernant la température maximale du CHG dans le cylindre, il peut être noté sur la figure VI.31 que sa valeur est d'autant plus élevée que le débit massique de remplissage est plus important. Néanmoins, l'augmentation temporelle de la valeur maximale de la température du CHG avec le débit massique de remplissage n'est pas linéaire. En effet, la température maximale du CHG à l'intérieur du cylindre croît rapidement dans les premiers instants du ravitaillement, ensuite l'augmentation ralentit, puis la température devient quasiment constante en fin du remplissage.



Figure IV. 31: Variation temporelle de la température maximale du CHG dans le cylindre pour différents débits massiques

Il est aisé de noter sur la figure IV.32, une relation de type exponentiel entre le débit massique de remplissage et la température maximale du CHG dans le réservoir, à la fin de remplissage.



Figure IV. 32: Effet du débit massique sur la température maximale du CHG à la fin du remplissage dans le réservoir

Les profils de température radiale du CHG à la distance x = 0,4 m de l'entrée du réservoir, aux instants 2 s, 10 s et 20 s et avec un débit massique de remplissage de 41 g/s, sont illustrés sur la figure IV.33. Nous pouvons constater l'existence d'un gradient de température significatif du CHG dans la direction radiale, au voisinage du tube d'entrée du réservoir qui croit avec le temps de remplissage. Ce comportement a été noté précédemment et expliqué par la chaleur produite par le travail de compression.

La distribution radiale de la température du CHG dans le réservoir à différentes positions (x = 0.4 m et x = 0.8 m) ont été également examinées. Les mêmes remarques précédentes peuvent être avancées. Il apparait clairement sur la figure IV. 34 que le gradient de température du CHG le plus élevé est situé au voisinage du tube d'entrée du réservoir.



Figure IV. 33: Variation de la température radiale du CHG à différents instants pendant le remplissage d'un réservoir à x=0.4 m (*m*=41 g/s)



Figure IV. 34: Variation de la température radiale du CHG pendant le remplissage à t=10 s à différentes positions dans le réservoir

Concernant la variation de la température du CHG le long de la direction axiale du réservoir, aux instants 2 s, 10 s et 25 s, il peut être observé sur la figure IV.35, une croissance rapide de la température du gaz d'hydrogène comprimé dans la direction axiale du réservoir. Ceci est dû au fait que le gaz d'hydrogène comprimé entrant est à une température beaucoup plus basse que celle du CHG à l'intérieur du réservoir.



Figure IV. 35: Distribution de la température axiale du CHG dans le cylindre à différents instants de remplissage.

En résumé, il a été noté sur toutes les figures IV.33, IV.34 et IV.35, que la température du gaz d'hydrogène comprimé est non-uniforme dans le cylindre et augmente progressivement dans les directions axiale et radiale, au cours du remplissage.

La distribution axiale de la température du gaz hydrogène comprimé dans le réservoir, pour différents débits massiques de remplissage a été également simulée. Les résultats obtenus sont illustrés sur la figure IV.36



Figure IV. 36: Distribution de la température axiale du CHG dans le cylindre à t=2 s pour différents débit massiques.

L'analyse des courbes de la figure IV.36 montre que l'augmentation de la température du CHG dans la direction axiale est d'autant plus importante que le débit massique est grand. En outre, il peut être remarqué l'existence d'un gradient de température du gaz d'hydrogène comprimé considérable, le long du trajet du jet dans le réservoir du CHG.

Conclusion

L'étude de l'échauffement des combustibles CNG, CHG et HCNG (un nouveau combustible), au sein d'un réservoir hyperbare, a fait l'objet de ce chapitre. Il peut être avancé que les effets thermiques ayant lieu lors de la phase de charge d'un réservoir, peuvent résulter essentiellement de l'énergie cinétique des gaz entrants dans le réservoir qui se transforme en énergie interne et de la conversion en chaleur du travail des forces de pression. L'effet de différents facteurs (pression initiale, débit massique, temps de remplissage) sur la température du gaz hydrogène comprimé (CHG), lors du ravitaillement d'un réservoir a été examiné. L'analyse des résultats obtenus fait ressortir principalement l'augmentation de la température de l'hytane, par l'ajout d'hydrogène, l'élévation maximale de la température du CHG dans les deux directions axiale et radiale.

Conclusion générale

L'hydrogène apparait comme une alternative sérieuse pour devenir le vecteur énergétique de demain. Il semble inépuisable, puisque présent dans le monde entier sous forme d'eau. De plus, sa production ne crée, a priori, aucune pollution. Néanmoins cette vision extrêmement simpliste est entravée par les diverses difficultés rencontrées au cours de sa production, de son stockage, de sa distribution et de son utilisation.

Cette étude s'inscrit dans le cadre de travaux, de recherche et développement, menés actuellement sur le stockage de l'hydrogène gazeux sous haute pression dans des réservoirs de type I (réservoir cylindrique en métal). Notre travail portera plus précisément sur l'étude de l'échauffement au cours de la phase de remplissage d'un réservoir de stockage hyperbare d'hydrogène.

Un modèle CFD axisymétrique 2D a été construit, pour étudier la distribution et l'évolution de la température pendant le processus de remplissage rapide dans un réservoir d'hydrogène. Les effets de l'écoulement visqueux instationnaire compressible et des gaz réels sont considérés. La validation du modèle est réalisée avec les travaux expérimentaux de Yan-Lei Liu [46], sur le remplissage rapide du gaz hydrogène comprimé (CHG) dans un réservoir.

Nous avons dans un premier temps, entrepris une étude comparative des combustibles hydrogène et méthane. Puis, dans un second temps, l'effet de l'addition d'hydrogène au méthane sur l'augmentation de la température a été étudié. Des taux volumiques d'hydrogène dans le méthane de, 8%, 15% et 20% ont été considérés. Pour chaque mélange, les contours de température, les distributions temporelles axiale et radiale de la température, ont été examinées. Les résultats obtenus ont conduit aux observations suivantes:

- Une élévation de la température du gaz de près de 40 K et de 50 K respectivement pour les combustibles gazeux CNG et CHG, dans le cylindre pendant le remplissage.
- L'influence significative des propriétés thermodynamiques du gaz sur le profil de température.
- L'addition d'hydrogène conduit à une augmentation de la température du méthane.
- L'introduction de l'hydrogène réduit la densité du mélange.

Par ailleurs, les résultats de simulation ont également révélé que la pression initiale, le débit massique et le temps de remplissage, sont les principaux facteurs qui affectent l'augmentation de la température du gaz hydrogène comprimé (CHG), dans le réservoir. En effet, les simulations de remplissage d'un réservoir de CHG, pour différentes pressions

initiales (5, 10, 15 et 25 MPa, jusqu'à 35 MPa) et une température ambiante de 293 K, menées, ont montré que l'augmentation de la température du CHG, dans le réservoir, lors du remplissage est d'autant plus faible que la pression initiale du combustible gazeux (CHG) est élevée. Il est apparu en outre une diminution quasi-linéaire de la température maximale du gaz pendant le processus de ravitaillement, quand la pression initiale du gaz augmente. Il a été noté qu'une augmentation de 1 MPa de la pression initiale a conduit à une diminution de 2 K, de la température du CHG dans le réservoir. La principale cause d'échauffement étant probablement la conversion du travail des forces de pression en chaleur.

Concernant l'effet du débit massique de remplissage sur la température du CHG dans le cylindre, les différentes valeurs (25 g/s, 41 g/s, 65 g/s et 130 g/s) considérées, ont permis de constater que la température du CHG était plus élevée quand le taux massique de remplissage était plus important. Il a été observé qu'une variation du débit massique, de 25 g/s à 130 g/s conduit à un accroissement de la température de 45 à 51 K. Une relation exponentielle entre l'élévation de la température maximale du CHG et le débit massique de remplissage est notée.

D'autre part, un remplissage très rapide peut entraîner une élévation de température conséquente et conduire à une violation des normes de sécurité du réservoir de CHG. Pour mettre en exergue ce comportement, deux temps de remplissage (40 et 60 s) ont été envisagés, la pression au début du remplissage étant de 10 MPa. Les résultats obtenus ont permis de noter que l'élévation de la température du gaz est d'autant plus faible que le remplissage est plus lent. En outre qu'il existe un gradient de température plus élevé au voisinage du tube d'entrée du réservoir du CHG, pour le temps total de remplissage le plus court.

Ainsi, il apparait clairement qu'un temps de remplissage minimal aurait un impact bénéfique sur la commercialisation du réservoir du CHG.

Il faut signaler que dans toutes les simulations réalisées pour l'ensemble des combustibles étudiés (CHG, CNG, HCNG), la température la plus élevée a été enregistrée dans la région caudale, tandis la plus basse est située à l'entrée du réservoir.

Références bibliographiques

- M. Fanhua et al, *«Effects of hydrogen addition on cycle-by-cycle variations in a lean burn natural gas spark-ignition engine»*, Int J Hydrogen Energy, vol. 33, pp. 823 831, (2008).
- [2] K. Barral, S. Pregassame, P. Renault, *«Thermal effects of fast filling hydrogen compression in refueling stations»*, in Proc 15th World Hydrogen Energy, (2004).
- [3] S. Rabih, « *Contribution à la modélisation de systèmes réversibles de types électrolyseur et pile à hydrogène en vue de leur couplage aux générateurs photovoltaïques* », Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, (2008).
- [4] N. Hajjaji, «Analyse du cycle de vie exégétique de systèmes de production d'hydrogéné », Thèse de doctorat, l'Institut National Polytechnique de Lorraine, (2011).
- [5] R. Kothari, D. Buddhi, and R. L. Sawhney, *«Comparison of environmental and economic aspects of various hydrogen production methods»*, Renewable and Sustainable Energy Reviews, vol. 12, pp. 553-563, (2008).
- [6] M. R. Mahishi, M. S. Sadrameli, S. Vijayaraghavan, and D. Y. Goswami, «A novel approach to enhance the hydrogen yield of biomass gasification using CO₂ sorbent», Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, vol. 130, pp. 011501–0115018, (2007).
- [7] A. Midilli, M. Ay, I. Dincer, and M. A. Rosen, *«On hydrogen and hydrogen energy strategies i: current status and needs»*, Renewable & sustainable energy reviews, vol. 9, pp. 255-271, (2005).
- [8] S. His, «*L'Hydrogène, vecteur énergétique du futur ?*», IFP, (2003).
- [9] A. Mirecki, «*Etude comparative de chaînes de conversion d'énergie dédiées à une éolienne de petite puissance* », Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, France, (2005).
- [10] Rapport 2020 sur l'écart entre les besoins et les perspectives en matière de réduction des émissions, ONU programme pour l'environnement, (2020)
- [11] G. Bourbonneux, «Procédés de Transformation », Techni p, (1998).
- [12] P. Marion, S. Vinot, *«Production d'hydrogène à partir des combustibles fossiles»*, Association Français de l'Hydrogène (AFH₂), (2009). http://www.afh2.org/index.php?page=memento fiches
- [13] M. Dufoix, J. F. Mastrangelo, and F. Valmage, *«Quelle place pour l'hydrogène dans les systèmes énergétiques»*, Atelier Changement Climatique ENPC, (2003).
- [14] http://www.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/production/current technology. html
- [15] E. Curcio, A. Criscuoli, and E. Drioli, *«Membrane crystallizers»*, Industrial Engineering Chemistry Research, vol. 12, pp. 2679-2684, (2001).
- [16]J.C. Sabonnadière, «Nouvelles technologies de l'énergie 2 stockage et technologies à émission réduite», éditions Lavoisier, (2007)
- [17] E. Kikuchi and Y. Chen, «Low-temperature syngas formation by CO₂ reforming of methane in a hydrogen-permselective membrane reactor», Studies in Surface Science and Catalysis, vol.107, pp. 547–553, (1997).
- [18] M. Ni, D. Y. C. Leung, M. K. H. Leung, and K. Sumathy, «An overview of hydrogen production from biomass», Fuel Processing Technology, vol. 87, pp. 461-472, (2006).
- [19] http://eereweb.ee.doe.gov/biomass/large_scale_gasification.html.
- [20] A. Demirbaş, *«Hydrogen production from biomass by the gasification process»*, Energy Sources, vol. 24, pp. 59-68, (2002).
- [21] S. Manish, R. Banerjee, *«Comparison of biohydrogen process»*, International Journal of Hydrogen Energy, vol. 33, pp. 279-286, (2008).
- [22] P.C.Hallenbeck, J.R. Benemann, *«Biological hydrogen production fundamentals and limiting processes»*, International Journal of Hydrogen Energy, vol. 27, pp.1185-1193, (2002).

- [23] M. Piera, J. M. Martínez-Val, and M. J. Montes, *«Safety issues of nuclear production of hydrogen»*, Energy Conversion and Management, vol. 47, pp. 2732-2739, (2006).
- [24] S. Fujiwara, S. Kasai, H. Yamauchi, K. Yamada, S. Makino, K. Matsunaga, M. Yoshino, T. Kameda, T. Ogawa, S. Momma, and E. Hoashi, *«Hydrogen production by high temperature electrolysis with nuclear reactor»*, Progress in Nuclear Energy, vol.50, pp, 422-426, (2008).
- [25] D. K. Ryland, H. Li, and R. R. Sadhankar, *«Electrolytic hydrogen generation using CANDU nuclear reactors»*, International Journal of Energy Research, vol. 31, pp.1142-1155, (2007).
- [26] D. Mori and K. Hirose, *«Recent challenges of hydrogen storage technologies for fuel cell vehicles»*, International Journal of Hydrogen Energy, vol. 34, pp. 4569-4574, (2009).
- [27] EIA, «A technology roadmap for generation iv nuclear energy systems», E.N.E.R, (2002).
- [28] J. Legrand, «Bioproduction d'hydrogène par des microorganismes photosynthétiques», Association Français de l'Hydrogène (AFH₂), (2003) http://www.afh2.org/index.php?page=memento fiches
- [29] B. Ourane, «*Recherche exploratoire de nouveaux intermétalliques ternaires à base de magnésium. Application au stockage d'hydrogène*», Thèse de doctorat, Universités de Bordeaux et de Sfax, Tunisie, (2014).
- [30] C. I. P. Stan, «Phases et nouveaux composés à base de magnésium pour le stockage de l'hydrogène», Thèse de doctorat, Université Sciences et Technologies - Bordeaux I, (2008).
- [31] D. Perreux, *«Stockage de l'hydrogène sous forme de gaz pressurise»*, Association Français de l'Hydrogène (AFH₂), (2008).
- [32] F. Montignac, V. Mousseau, D. Bouyssou, S. Damart, M. A. Aloulou, B. Rousval, *«L'évaluation multicritère comme aide à l'orientation de la recherche: application aux technologies de stockage embarque de l'hydrogène»*, Centre National de la Recherche Scientifique, Université Paris, (2013).
- [33] S. Maus, J. Hapke, C. N. Ranong, E. Wüchner, G. Friedlmeier, and D. Wenger, *«Filling procedure for vehicles with compressed hydrogen tanks»*, International Journal of Hydrogen Energy, vol. 33, pp. 4612-4621, (2008).
- [34] A. R. Abele, *«Quantum hydrogen storage systems»*, ARB ZEV Technology Symposium Sacramento, (2006).
- [35] U. Eberle, *«GM's research strategy towards a hydrogen-based transportation system»*, FuncHy-Workshop Hamburg, (2006).
- [36] L. Nancy, L. Thiais, and L. Besancon, « Projet SOLHY : analyse et développement d'une solution hybride combinant les voies solide et gazeuse-pour le stockage d'hydrogène », Action Concertée Énergie CNRS - Ministère de La Recherche (2006).
- [37] G. Hermosilla-Lara, « Stockage de l'hydrogène par adsorption sur charbon actif : étude des effets thermiques lors de la charge dynamique d'un réservoir à lit fixe adsorbant », Thèse de doctorat, Université Joseph-Fourier, (2007).
- [38] M. EL Moussaid, «Analyse et intégration des spécificités liées au procédé de fabrication dans les modèles de calcul des structures composites application à la simulation du comportement mécanique des fonds des réservoirs bobinés», Thèse de doctorat, Université de Bordeaux, (2016).
- [39] R. Drnevich, *«Hydrogen delivery–liquefaction & compression*, in *strategic initiatives for hydrogen delivery»*, Workshop USA, (2003).
- [40] I. Klotz, «Introduction to chemical thermodynamics», W.A. Benjamin, Inc., NY, USA, (1964).

- [41] T.D. Eastop, A. Mcconkey, *«Applied thermodynamics for engineering technologists»*, 5th Edition, Addison Wesley Longman Limited, Essex England, (1998).
- [42] R. B. Eldridge, *«Compressors»*, Lecture at University of Texas at Austin, (2003). http://utwired.engr.utexas.edu/che354a/mom/compd.ppt
- [43] E. Tzimas, C. Filiou, S. Peteves, and J.-B.Veyret, *«Hydrogen storage: state-of-the-art and future perspective»*, Rapport de SETRIS, Sustainable Energy Technologies Reference and Information System, (2003).
- [44] C. J. B. Dicken and W. Mérida, «Measured effects of filling time and initial mass on the temperature distribution within a hydrogen cylinder during refueling», Journal of Power, vol.165, pp. 324-336, (2007).
- [45] J. C. Crivello, «Contribution à l'étude des propriétés thermodynamiques et électroniques d'hydrures de composés de haucke substitués», Thèse de doctorat, Université Paris Sud -Paris XI, (2005).
- [46] Y. L. Liu, Y. Z. Zhao, L. Zhao, X. Li, H. Chen, L. F. Zhang, H. Zhao, R. H. Sheng, T. Xie, and D. H. Hu, *«Experimental studies on temperature rise within a hydrogen cylinder during refueling»*, International Journal of Hydrogen Energy, vol.35, pp. 2627-2632, (2010).
- [47] L. Zhao, Y. Liu, J. Yang, Y. Zhao, J. Zheng, H. Bie, and X. Liu, *«Numerical simulation of temperature rise within hydrogen vehicle cylinder during refueling»*, International Journal of Hydrogen Energy, vol. 35, pp. 8092-8100, (2010).
- [48] Q. Li, J. Zhou, Q. Chang, W. Xing, *«Effects of geometry and inconstant mass flow rate on temperatures within a pressurized hydrogen cylinder during refueling»*, International Journal of Hydrogen Energy, vol. 37, pp. 6043-6052, (2012).
- [49] J. Zheng, J. Guo, J. Yang, Y. Zhao, L. Zhao, X. Pan, J. Ma, Lifang Zhang, « Experimental and numerical study on temperature rise within a 70 MPa type III cylinder during fast refueling», International Journal of Hydrogen Energy, vol. 38, pp. 10956-10962, (2013).
- [50] M. Deymi-dashtebayaz, «The complete modelling of the filling process of hydrogen onboard vehicle cylinders», Brazilian journal of chemical engineering, vol. 33, pp. 391-399, (2016).
- [51] J. Chenga, J. Xiao, P. Bénardb, R. Chahine, *«Estimation of final hydrogen temperatures during refueling 35MPa and 70MPa tanks»*, Energy Procedia, vol. 105, pp. 1363-1369, (2017).
- [52] L. Wang, C.X. Zheng, R. Li, B.B. Chen, Z.X. Wei, «Numerical analysis of temperature rise within 70 MPa composite hydrogen vehicle cylinder during fast refueling», Journal of Central South University, vol. 21, pp. 2772-2778, (2014).
- [53] S. C. Kim, S. H. Lee, K. B. Yoon, *«Thermal characteristics during hydrogen fueling process of type IV cylinder»*, Journal of Hydrogen Energy, vol.35, pp. 6830-6835 (2010).
- [54] D. Clémençon, «Mg(BH4)2: Synthèse, nano-confinement et catalyse», Thèse de doctorat, Université Picardie Jules Verne, (2019).
- [55] G. Momen, «Modélisation numérique et étude expérimentale du stockage de l'hydrogène dans des réservoirs à lit fixe adsorbants », Thèse de doctorat, Université Paris XIII, (2006).
- [56] W. Leung, N. March and H. Motz, *« Primitive phase diagram for hydrogen »*, Physics Letters A, vol. 56, pp.425-426, (1976).
- [57] G. Gondor, « Pour le stockage de l'hydrogène : Analyse thermodynamique de la formation d'hydrures métalliques et optimisation du remplissage d'un réservoir », Thèse de doctorat, Université de Franche-Comté, (2008).
- [58] M. Zemansky, R. Dittman, «Heat and thermodynamics : an intermediate textbook », 7th

Edition, The McGraw Hill Companies, Inc., NY, USA, (1997).

- [59] F. Darkrim-Lamari and P. Malbrunot, «*Combustible hydrogène utilisation* », Chimie Verte, (2013).
- [60] B. Massicot, «Étude du système Fe-Ti-V et de ses applications au stockage de l'hydrogène », Thèse de doctorat, Université Paris Est, (2009).
- [61] P. Jena, *«Materials for hydrogen storage: past, present, and future »*, Journal of Physical Chemistry Letters, vol. 2, pp. 206-211, (2011).
- [62] A. Züttel, «Materials for hydrogen storage», Materials Today, vol.6, pp. 24-34, (2003).
- [63] D. Lamari, *«Stockage de l'hydrogène Dans Les Solides»*, Association Français de l'Hydrogène (AFH₂), (2007).
 - http://www.afh2.org/index.php?page=memento_fiches
- [64] P. De Rango, S. Nachev, D. Fruchart, P. Marty, and S. Miraglia, « Le stockage solide de l'hydrogène au service des énergies renouvelables », Congrès International Matériaux, Madhia, Tunisia, (2015).
- [65] S. A. Sherif, F. Barbir, and T. N. Veziroglu, *«Wind energy and the Hydrogen economy review of the technology »*, Solar Energy, vol. 78, pp. 647-660, (2005).
- [66] T. Alleau, « Pourquoi l'Hydrogène ? », In Pollutec, Paris, (2005).
- [67] S. Couillaud, « Synthèse, structure, propriétés physiques et réactivité vis-à-vis de l'hydrogène de nouveaux composés ternaires à base de magnésium », Thèse de doctorat, Université Sciences et Technologies - Bordeaux I, (2011).
- [68] http://www.iea.org/textbase/papers/2006/hydrogen.pdf.
- [69] http://www.technologicvehicles.com/fr/.
- [70] E. Brucart, «Gas Natural: características, distribución y aplicaciones industriales», Editores Técnicos Asociados, Barcelona, (1987).
- [71] F. Dewerdt, « Combustibles Gazeux, Gaz Naturel », Technique de l'Ingénieur, vol. 11, A 1755, (1984).
- [72] R. N. Penilla and M. O. Paez, *«The use of Natural Gas»*, 14th World Petroleum Congress, (1994).
- [73] S. BESSAM, «Étude des propriétés thermodynamiques, structurales et de transport du méthane liquide et des mélanges d'hydrocarbures par dynamique moléculaire de corps flexibles», Mémoire de Magister, Université d'Oran 1, (2008).
- [74] Extrait de documentation «Bp statistical review of world energy », (2021).
- [75] EPA. Environmental Protection Agency, *«Profile of the oil and gas extraction industry»*. EPA/310-R-99-006, 155 p, (2002)
- [76] A. Mekhelfi, « Evolution des exportations gazières de l'Algérie et son impact au sein de l'OPEC (1970 à 2012) », مجلة أداء المؤسسات الجزائرية, vol. 3, pp.13-26, (2014).
- [77] A. Rebah, « Sonatrach une entreprise pas comme les autres », Casbah Editions, Alger, pp. 160-172, (2006).
- [78] D. G. Victor, A. M. Jaffe, and M. H. Hayes, *«Natural Gas and geopolitics from 1970 to 2040»*, Cambridge University Press, p.51, (2006).
- [79] Extrait de documentation, «BP statistical review of world energy », (2020).
- [80] A. Segueni, « SONATRACH rapport annuel 2006 », SONATRACH, p 14, (2006).
- [81] C. F. Dinca, « Évaluation environnementale et technico-économique du cycle de vie de la combustion du Gaz Naturel et propositions d'améliorations techniques », Thèse de doctorat, École Doctorale de Chimie de Lyon, (2006).
- [82] A. Badea, T. Apostol, C. Dinca, «Analyse de l'inventaire de la filière de Gaz Naturel utilisé dans le secteur énergétique », Scientifique Bulletin, Université Politehnica de Bucarest, vol. 64, pp.39-50 (2002).
- [83] H. Berrekia, «Modélisation et comportement d'endommagement des tubes d'aciers utilisés pour l'exploitation pétrolier», thèse de doctorat, Université d'Oran, (2019)

- [84] I. S. Noba, « Modélisation et simulation numérique du comportement de chargement de Gaz Naturel Liquéfié dans une cuve de méthanier », Thèse de doctorat, Université de Lorraine, (2018).
- [85] I. E. Agency, « World Energy Statistics 2019 », (2019).
- [86] J. P. Barbosa Mota, « *Modélisation des transferts couplés en milieux poreux : étude du stockage de Gaz Naturel par adsorption et de la convection naturelle en espace poreux annulaire* », Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, (1995).
- [87] R.J. Remick, A.J. Tiller, *«Advanced methods for low-pressure storage of CNG»*, in *Proceeding of Symposium on Nonpetroleum Vehicular Fuels V*, pp. 105–119 CNG Fuel Arlington, (1985).
- [88] O. Talu, «*An overview of adsorptive storage of natural gas*», Studies in Surface Science and Catalysis, vol.80, pp. 655–662, (1993).
- [89] M. A. Mbacke, «Caractérisation et modélisation du comportement mécanique des composites tressés 3d : application à la conception de réservoirs GNV», Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, (2013).
- [90] M. I. Khan and T. Yasmin, «*Development of Natural Gas as a vehicular fuel in pakistan: issues and prospects* », Journal of Natural Gas Science and Engineering, vol. 17, pp. 99-109, (2014).
- [91] Extrait de documentation AFGNV Association Française du gaz naturel véhicules.
- [92] D. Lozano-Castelló, J. Alcañiz-Monge, M. A. de la Casa-Lillo, D. Cazorla-Amorós, and A. Linares-Solano, « Advances in the study of methane storage in porous carbonaceous materials », Fuel, vol. 81, pp.1777-1803, (2002).
- [93] International Standard, « ISO 11439-2013 Gas cylinders- high pressure cylinders for the on-board storage of Natural Gas as a fuel for automotive vehicles », ISO: Geneva, Switzerland, (2013).
- [94] A. Saferna, P. Saferna, S. Kuczyński, MariuszLaciak, A. Szurlej, T. Wlodek, *« Thermodynamic analysis of CNG fast filling process of composite cylinder type IV »*, Energies, vol. 14, pp. 1-19, (2021).
- [95] International Energy Agency, «World energy outlook », (2017).
- [96] S. Kuczyński, K. Liszka, M. Laciak, K. Kyć, A. Oliinyk, and A. Szurlej, «*The impact of the use of alternative fuels in transport, with a particular emphasis on CNG, to reduce the emissions of air pollutants* », Energy Policy Journal, vol. 19, pp. 91-104, (2016).
- [97] M. I. Khan, T. Yasmin, and A. Shakoor, *« Technical overview of compressed Natural Gas (CNG) as a transportation fuel »*, Renewable and Sustainable Energy Reviews, vol. 51, pp. 785-797, (2015).
- [98] D. Burchart-Korol, M. Gazda-Grzywacz, and K. Zarębska, «*Research and prospects for the development of alternative fuels in the transport sector in poland: a review* », Energies, vol.13, pp. 2988-2020, (2020).
- [99] M. Nijboer, « the contribution of Natural Gas vehicles to sustainable transport », IEA, Paris, (2010).
- [100] H. Engerer and M. Horn, «*Natural Gas vehicles: an option for europe*», Energy Policy, vol. 38, pp.1017-1029, (2010).
- [101] «Le gaz naturel pour la filière des véhicules industriels», livre blanc, FFC & AFGNV, (2017).
- [102] A. Prieur and R. Tilagone, «*Le Gaz Naturel pour véhicules (GNV): quel potentiel ?* », Institut Français du Pétrole, (2006).
- [103] NGV Global, « *Statistics on Natural Gas vehicles* », (2021). www.ngvglobal.org/ngv-statistics/
- [104] A. Sameur and A. Raoueche, «Les perspectives de l'utilisation de l'hydrogène dans le transport en Algérie », NAFTAL-DCRD, ALGER, (2007).

- [105] «Transition Energétique en Algérie «Leçons, état des lieux et perspectives pour un développement accéléré des énergies renouvelables », Commissariat aux Energies Renouvelables et à l'Efficacité Energétique (2020).
- [106] L. Ziani, « *Etude paramétrique de la combustion du méthane enrichi à l'hydrogène* », Université Des Frères Mentouri Constantine 1, Thèse De Doctorat, (2017)
- [107] R. Maamri, « Modélisation et expérimentation des moteurs à combustion fonctionnant avec différents carburants de substitution et mélanges », Thèse de doctorat, Université du Québec à Trois-Rivières, (2014).
- [108] F. Harouadi, «Les moteurs à combustion interne à carburant mixte (Gaz Naturel-Hydrogène) », Bulletin Des Energies Renouvelables, N°. 8, pp. 10-11 (2005).
- [109] F. Amrouche, « Transition douce vers l'application de l'Hydrogène dans Le transport : Gaz Naturel enrichi par de l'Hydrogène « HGNC » », Bulletin Des Energies Renouvelables, N°. 15, pp. 10-11, (2009).
- [110] M. Farzaneh-Gord, S. Hashemi, and A. Farzaneh-Kord, *«Thermodynamics analysis of cascade reserviors filling process of natural gas vehicle cylinders»*, World Applied Science Journal, vol. 5, pp.143–149, (2008).
- [111] K. Kountz, J. Kenneth, Blazek, F. Christopher, «NGV fuelling station and dispenser control systems», Report GRI-97/0398. Gas Research Institute, Chicago, Illinois, (1997).
- [112] M. Farzaneh-Gord, et al, *«Effects of natural gas compositions on CNG fast filling process for buffer storage system»*. Oil & Gas Science and Technology Rev. IFP Energiesnouvelles, vol. 69, pp. 319-330, (2014)
- [113] C. J. B. Dicken and W. Mérida, *«Modeling the transient temperature distribution within a hydrogen cylinder during refueling»*, Numerical Heat Transfer, Part A: Applications, vol. 53, pp. 685-708, (2007).
- [114] B. Jeary, «Fast filling of compressed hydrogen fuel storage cylinders», Proceedings of the 11th Canadian Hydrogen Conference, Anonymous Canadian Hydrogen Association, Victoria, B.C, (2001).
- [115] S. Charton, V. Blet, and J. P. Corriou, «A simplified model for real gas expansion between two reservoirs connected by a thin tube», Chemical Engineering Science, vol. 51, pp. 295-308, (1996).
- [116] Y. Zhao, G. Liu, Y. Liu, J. Zheng, Y. Chen, L. Zhao, J. Guo, and Y. He, *«Numerical study on fast filling of 70 MPa type iii cylinder for hydrogen vehicle»*, International Journal of Hydrogen Energy, vol. 37, pp. 17517-17522, (2012).
- [117] M. M. A. Alam, T. Setoguchi, and S. Matsuo, *«An attempt of simulating the real time filling of h₂ cylinder at 70 MPa»*, in OTEC, vol.19, pp. 27-32, (2014).
- [118] A. Suryan, H. D. Kim, and T. Setoguchi, «Numerical analysis on thermo-fluid dynamic behavior of hydrogen gas during fast high pressure filling», Journal of Mechanical Science and Technology, vol. 27, pp.567-573, (2013).
- [119] A. Suryan, H. D. Kim, and T. Setoguchi, *«Three dimensional numerical computations on the fast filling of a hydrogen tank under different conditions»*, International Journal of Hydrogen Energy, vol. 37, pp.7600-7611, (2012).
- [120] D.C.Wilcox, *«Turbulence modeling for CFD»*, 2nd Edition, DCW Industries, California, (1998).
- [121] N. Nahavandi, M. Farzaneh-Gord, «Numerical simulation of filling process of natural gas onboard vehicle cylinder», Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, vol. 35, pp. 247–256, (2013)
- [122] V. Iorga-Simăn, *«Etude par simulation numérique des écoulements dans le conduit d'admission d'un moteur à levée de soupape d'admission variable»*, thèse de doctorat, Université de Pitești, (2012).

- [123] S. Nemdili, «Investigation numérique de l'écoulement turbulent et du transfert de chaleur autour d'un élément cubique avec jet impactant», thèse de doctorat, Université d'Oran, (2015).
- [124] B. E. Launder and D. B. Spalding, *«The numerical computation of turbulent flows»*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vo. 13, pp. 269-289, (1974).
- [125] F. A. Payette, *«Simulation de l'écoulement turbulent dans les aspirateurs de turbines hydrauliques : Impact des paramètres de modélisation»*, l'obtention du grade de maître ès sciences, Université Laval Québec, (2008).
- [126] D. Choudhury, «Introduction to the renormalization group method and turbulence modeling», Fluent Inc. Technical Memorandum TM-107, (1993).
- [127] T. H. Shih, W. W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang, and J. Zhu, «A New k-ε Eddy Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows», Computers & Fluids, vol. 24, pp. 227-238, (1995).
- [128] F. R. Menter, *«Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications»*, AIAA Journal, vol. 32, pp. 1598-1605, (1994).
- [129] ANSYS Inc., Fluent user's guide, [USA].
- [130] O. Redlich and J. N. S. Kwong, *«On the thermodynamics of solutions. v. an equation of state. fugacities of gaseous solutions»*, Chemical Reviews, vol. 44, pp. 233-244, (1949).
- [131] G. Soave, *«Equilibrium constants from a modified redlich-kwong equation of state»*, Chemical Engineering Science, vol. 27, pp. 1197-1203, (1972).
- [132] K. S. Pitzer, D. Z. Lippmann, R. F. Curl, C. M. Huggins, and D. E. Petersen, *«The volumetric and thermodynamic properties of fluids .ii. compressibility factor, vapor pressure and entropy of vaporization»*, Journal of the American Chemical Society, vol. 77, pp. 3433-3440, (1955).
- [133] R. H. Aungier, *«A fast, accurate real gas equation of state for fluid dynamic analysis applications»*, Journal of Fluids Engineering, vol. 117, pp. 277-281, (1995).
- [134] D.Y. Peng and D. B. Robinson, *«A new two-constant equation of state»*, Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, vol. 15, pp. 59-64, (1976).
- [135] S. V. Patankar, *«Numerical heat transfer and fluid flow»* Hemisphere, New York, (1980).
- [136] A. Suryan, H. D. Kim, and T. Setoguchi, *«Numerical simulation of the filling-up process of a hydrogen fuel tank for vehicular applications»*, Proceedings of AJK Joint Fluids Engineering Conference, Japan, (2011).
- [137] W. Jaafar, *«Etude de champs de vitesse dans les effluents des réseaux d'assainissement»*, Thèse de doctorat, Université de Louis Pasteur-Strasbourg, (2006).
- [138] K. Kountz, W. Liss, and C. Blazek, *«A new natural gas dispenser control system»*, Proceedings International Gas Research Conference, pp.135-145 (1998).
- [139] E. Shipley, *«Study of natural gas vehicles (NGV) during the fast fill process»*, Thesis for the degree of Master of Science, West Virginia University, (2002).
- [140] R. Hirotani, T. Terada, Y. Tamura, H. Mitsuishi, and S. Watanabe, *«Thermal behavior in hydrogen storage tank for fuel cell vehicle on fast filling»*, in Proc. 16th World Hydrogen Energy Conf, (2006)
- [141] ANSYS Inc., A. Fluent. 12.0 theory guide, (2009).
- [142] D. M. Farzaneh-Gord, *«Compressed natural gas Single reservoir filling process»*, International Gas Engineering and Management, vol. 48, pp. 16–18, (2008).
- [143] M. Farzaneh-Gord, H. Eftekhari, S. Hashemi, M. Magrebi, M. Dorafshan, *«The effect of initial conditions on filling process of cng cylinders»*, Second International Conferenceon Modelling, Simulation and Applied Optimization, Abu Dhabi, UAE (2007).
- [144] M. Farzaneh-Gord, M. Deymi-Dashtebayaz, and H. R. Rahbari, «Effects of gas types

and models on optimized gas fuelling station reservoir's pressure», Brazilian Journal of Chemical Engineering, vol. 30, pp. 399-411, (2013).

- [145] M. Monde, Y. Mitsutake, P. L. Woodfield, and S. Maruyama, *«Characteristics of heat transfer and temperature rise of hydrogen during rapid hydrogen filling at high pressure»*, Heat Transfer—Asian Research, vol. 36, pp.13-27, (2006).
- [146] H. Khab, A. Chaker, L. Ziani, *«Effects of pressure and hydrogen addition to methane on the temperatures within a pressurized cylinder during the vehicle refueling of HCNG»*, International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 44, pp. 22437-22444, (2019).
- [147] J. Zheng, X. Liu, P. Xu, P. Liu, Y. Zhao, and J. Yang, *«Development of high pressure gaseous hydrogen storage technologies»*, International Journal of Hydrogen Energy, vol. 37, pp. 1048-1057, (2012).
- [148] M. C.Galassi, D.Baraldi, B. A.Iborra, P.Moretto, *«CFD analysis of fast filling scenarios for 70 MPa hydrogen type IV tanks»*, International Journal of Hydrogen Energy, vol. 37, pp. 6886-6892, (2012).
- [149] C. J. B. Dicken, W. Mérida, *«Temperature distribution within a compressed gas cylinder during fast filling»*, Advanced Materials Research, vol. 15, pp. 281-286, (2006).
- [150] B. Zhao, H. Wei, X. Peng, J. Feng, X. Jia, *«Experimental and numerical research on temperature evolution during the fast-filling process of a type iii hydrogen tank»*, Energies, vol.15, pp.1-17, (2022).
- [151] J. Xiao, P.Benard, R.Chahine, *«Estimation of final hydrogen temperature from refueling parameters»*, International Journal of Hydrogen Energy, vol. 42, pp7521-7528, (2017).
- [152] T. F. Y. Tanaka, Y. Umeda, K. Katsurayama, M. Hishida, *«Effect of hydrogen filling time on refueling stations»*, 16th World Hydrogen Energy Conference (2006).
- [153] Y. Zhao, G. Liu, Y. Liu, J. Zheng, Y. Chen, L. Zhao, J. Guo, and Y. He, *«Numerical study on fast filling of 70 mpa type iii cylinder for hydrogen vehicle»*, International Journal of Hydrogen Energy, vol. 37, pp. 17517-17522, (2012).
- [154] H. Khab, A. Chaker, *«Technologie de l'Hydrogène»*, Edition Universitaires Européennes, (2018).

دراسة تصميم صهريج تخزين للخليط المسبق للغاز الطبيعي المضغوط بالهيدروجين

يعتبر الهيدروجين ناقل للطاقة في المستقبل، ويبدو أنه الحل المعجزة للتغلب على أزمة الطاقة والبيئة الحالية قد يكون هذا صحيحًا بشرط أن يتم حل جميع المشكلات الكامنة في دورة حياته (الإنتاج، التوزيع، التخزين والاستخدام).

تعتبر هذه الأطروحة جزءًا من موضوع تخزين الهيدروجين، وبشكل أكثر تحديدًا على متن المركبات، والذي يظل أحد أكثر المشكلات أهمية للانتقال إلى نظام النقل القائم على الهيدروجين. في الواقع، هناك العديد من العقبات التكنولوجية التي تحد من انتشار تسويق هذه الخزانات، وأهمها الزيادة في درجة حرارة غاز الهيدروجين المضغوط (CHG)، أثناء الملء السريع لخزان السيارة.

تتمثل مساهمتنا في هذا المجال الواسع من البحث في إمكانية إعداد نموذج لملء خزان الضغط العالي سينصب اهتمامنا بشكل خاص على الظواهر الحرارية التي تحدث أثناء هذه العملية.

تم إنشاء نموذج ديناميكيات السوائل الحسابية (CFD) ثنائي الأبعاد للتعبئة السريعة لأسطوانة سيارة (CHG) سعتها 150 لترًا وضغط 35 ميجا باسكال المحاكاة تستند إلى نموذج *k-e* المضطرب القياسي ومعادلة الحالة للغازات الحقيقية Redlich-Kwong، والتي تسمح بدراسة تطور درجة حرارة الغاز أثناء عملية الملء السريع للخزان.

قمنا بدراسة وقود جديد وهو عبارة عن خليط من الغاز الطبيعي المخدر بالهيدروجين (HCNG)، تم فحص توزيع درجة حرارة هذا الوقود الغازي أثناء مرحلة ملء الخزان الأسطواني. معدلات الهيدروجين المدروسة هي 0٪، 8٪، 15٪ و 20٪. تظهر النتائج التي تم الحصول عليها بشكل لا لبس فيه أن إضافة الهيدروجين إلى الميثان يؤدي إلى زيادة درجة حرارة الخليط أثناء عملية ملء الخزان. بالإضافة إلى ذلك، لوحظ أن الزيادة في درجة حرارة غاز الهيدروجين المضغوط (CHG) تكون اكبر مقارنة بالغاز الطبيعي المضغوط (CNG).

تم فحص تأثير العديد من المقادير، ضغط الغاز الأولي، معدل تدفق كتلة الملء ووقت الملء، على تطور درجة حرارة غاز الهيدروجين المضغوط (CHG) ،تظهر نتائج المحاكاة أن تقليل معدل تدفق كتلة الملء أو زيادة الضغط الأولي يمكن أن يقلل بدرجة كبيرة من درجة حرارة غاز الهيدروجين المضغوط (CHG) داخل الخزان. فيما يتعلق بوقت الملء، لوحظ أن الملء البطيء يؤدي إلى انخفاض درجة حرارة الغاز.

الكلمات المفتاحية :هيثان، خزان ، غ ه م، غ ط م، ملء، تسخين، خليط، تخزين ا

Design study of a storage tank for the hydrogen-compressed natural gas premix

Considered as the energy transporter of the future, hydrogen seems to be the miracle solution to overcome the current energy and environmental crisis. This may be true provided that all the problems underlying in its life cycle (production, distribution, storage and use) are resolved.

The work of this thesis is part of the theme of hydrogen storage more specifically that on board vehicles, which remains one of the most critical problems for the transition to a hydrogen-based transport system. In fact, many technological obstacles continue to slow down the deployment of its commercialization, the most important of which remains the increase in the temperature of compressed hydrogen gas (CHG), during the rapid filling of the storage tank of a vehicle.

Our contribution in this vast line of research will be the examination of the possibility of setting up a model of filling a hyperbaric tank. Our attention will focus especially on the thermal phenomena that occur during this process.

A two-dimensional axisymmetric computational fluid dynamics (CFD) model for the fast filling of a vehicle cylinder at 150 liter CHG and 35 MPa pressure is established. The simulation based on the standard k- ε turbulence model and the Redlich-Kwong equation of state will make it possible to study the evolution of the gas temperature during the fast filling process of the reservoir.

A new fuel consisting of a mixture of Natural Gas doped with Hydrogen (HCNG) is studied. The temperature distribution of this gaseous fuel during the filling phase of a cylindrical tank is examined. Rates of 0%, 8%, 15% and 20% hydrogen were considered. The results obtained show unambiguously that the addition of hydrogen to methane leads to an increase in the temperature of the mixture during the filling process of the tank, all the more important as the rate of hydrogen is greater. In addition, it has been noted that this increase in temperature is more accentuated in the case of compressed hydrogen gas (CHG) than in that of compressed natural gas (CNG).

The effect of several parameters, initial pressure, mass filling rate and filling time, on the temperature evolution of CHG was examined. Simulation results show that reducing the mass filling rate or increasing the initial pressure can significantly reduce the temperature of the compressed hydrogen (CHG) in the storage tank. Regarding the filling time, it was noted that the slower filling results in a lower gas temperature rise.

Keywords: Hythane, tank, CHG, CNG, filling, warming up, mixing, storage

Considéré comme le vecteur énergétique du futur, l'hydrogène semble être la solution miracle pour sortir de la crise énergétique et environnementale actuelle. Ceci peut être vrai à condition de résoudre tous les problèmes inhérents à son cycle de vie (production, distribution, stockage et utilisation).

Les travaux de cette thèse s'inscrivent dans la thématique du stockage de l'hydrogène, plus précisément celui à bord des véhicules, qui demeure l'un des problèmes les plus critiques pour la transition vers un système de transport à base d'hydrogène. En effet, de nombreux verrous technologiques continuent de freiner le déploiement de sa commercialisation, dont le plus important reste l'augmentation de la température du gaz hydrogène comprimé (CHG), lors du remplissage rapide du réservoir de stockage d'un véhicule.

Notre contribution dans ce vaste axe de recherche, sera l'examen de la possibilité de la mise en place d'un modèle de remplissage d'un réservoir hyperbare. Notre attention portera spécialement sur les phénomènes thermiques qui se produisent lors de ce processus.

Un modèle de dynamique des fluides computationnels (CFD) axisymétrique bidimensionnel pour le remplissage rapide d'un cylindre de véhicule à CHG de 150 litres et à une pression de 35 MPa, est établi. La simulation basée sur le modèle de turbulence k-ɛ standard et l'équation d'état de Redlich-Kwong permettra d'étudier l'évolution de la température des gaz pendant le processus de remplissage rapide du réservoir.

Un nouveau carburant constitué du mélange Gaz Naturel dopé par de l'Hydrogène, (HCNG) est étudié. La distribution de température de ce combustible gazeux lors de la phase de remplissage d'un réservoir cylindrique est examinée. Des taux de 0%, 8%, 15% et 20% d'hydrogène ont été considérés. Les résultats obtenus montrent sans ambiguïté, que l'addition d'hydrogène dans le méthane conduit à une augmentation de la température du mélange pendant le processus de remplissage du réservoir, d'autant plus importante que le taux d'hydrogène est plus grand. En outre il a été noté que cet accroissement de température est plus accentué dans le cas du gaz d'hydrogène comprimé (CHG) que dans celui du gaz naturel comprimé (CNG).

L'effet de plusieurs paramètres, pression initiale du gaz, débit massique de remplissage et le temps de remplissage, sur l'évolution de la température du CHG a été examiné. Les résultats de simulation montrent que la réduction du débit massique de remplissage ou l'augmentation de la pression initiale peuvent réduire significativement la température de l'hydrogène comprimé (CHG) dans le réservoir de stockage. Concernant le temps de remplissage, il a été noté qu'un remplissage plus lent conduit à une élévation de température du gaz, plus faible.

Mots clés: Hythane, réservoir, CHG, CNG, remplissage, échauffement, mélange, stockage.