

Etude par simulation numérique des caractéristiques d'une flamme de diffusion turbulente avec co-courant d'air d'un mélange de CH₄ - H₂

Fouzi Tabet-Helal*, Brahim Sarh et Iskender Gökalp

Institut pour la Combustion, l'Aérodynamique, la Réactivité et l'Environnement (ICARE),
Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS),
1C Avenue de la recherche scientifique, Orléans 45071, Cedex 2, France

(reçu le 20 Janvier 2007 – accepté le 25 Juin 2007)

Résumé - Ce travail est consacré à la mise en évidence par simulation numérique des caractéristiques d'une flamme de diffusion turbulente avec co-courant d'air de méthane enrichie avec de l'hydrogène. La configuration adoptée est constituée d'un mélange de méthane et d'hydrogène dilué dans de l'azote. Elle est caractérisée par des rapports de densité et de vitesses élevés à l'injection. Pour les calculs, la turbulence est modélisée avec l'approche RSM (Reynolds Stress Model) et l'interaction chimie turbulence est représentée par le modèle EDC (Eddy Dissipation Concept). Les caractéristiques de la flamme (longueur, épaisseur, maximum de température, quantités de CO et CO₂ produites) sont prédites avec une bonne précision. Dans la première section radiale de la zone proche de l'injection, les maximums de température et de la fraction massique de H₂O sont calculés correctement. Par ailleurs, du fait de la présence de forts gradients de densité et de vitesses à l'injection, l'entraînement est sous-estimé et l'épanouissement radial des profils de température et des espèces chimiques est surestimé. Dans les autres sections, les résultats sont en bon accord avec les mesures.

Abstract - This study reports the calculation results of methane turbulent nonpremixed flame enriched by hydrogen. The near field region of this flame is characterized by a high density ratio between the air co flow and the fuel jet with the high injection velocity. The model uses the Reynolds Stress Model (RSM) coupled with the Eddy Dissipation Concept (EDC). The results obtained demonstrate that the model is capable of predicting the feature of this flame (flame length, flame width, maximum temperature,...). Comparison with measurement indicates that the maximum of temperature and H₂O mass fraction at first location close to the nozzle exit are correctly predicted. However, due to strong velocity and density gradients in this region, it is found that air entrainment is not well estimated and the radial spreading of temperature and species profiles is over predicted. Downstream, the predictions are close to experimental data.

Mots clés: Flamme de diffusion – Turbulence - Enrichissement par de l'hydrogène.

1. INTRODUCTION

Il a été démontré que l'utilisation d'une certaine proportion d'hydrogène avec les hydrocarbures permet d'améliorer les performances de la combustion (amélioration de la stabilité, réduction de la pollution, etc.). Il est important de bien identifier les caractéristiques de combustion de ces combustibles composés dans différentes conditions opératoires afin de pouvoir les utiliser efficacement dans les systèmes pratiques de production d'énergie. L'approche expérimentale demeure limitée à certaines conditions de fonctionnement (température, pression, pourcentage de H₂ dans le mélange, etc.) du fait des coûts que peut engendrer sa mise œuvre. En revanche, la simulation numérique peut constituer une solution plus appropriée compte tenu des avancées réalisées en matière d'informatique et de modélisation. Cependant, il est nécessaire, au préalable, de s'assurer du bon comportement de l'outil numérique dans plusieurs cas tests. C'est dans ce contexte que cette étude a été initiée.

La configuration retenue est celle investie expérimentalement par Bergman *et al.* [1]. Elle est caractérisée par des rapports de densité et de vitesses élevés à l'injection. De plus, les résultats

* tabet@cnrs-orleans.fr

expérimentaux ont mis en évidence la présence d'une chimie loin de l'équilibre ('Non-equilibrium effects') dans la zone comprise entre $5 \leq x/D \leq 10$ [2] où D est le diamètre de l'injecteur. Par ailleurs, cette flamme a l'avantage d'être attachée aux lèvres du brûleur et opère loin de l'extinction.

L'outil numérique est constitué de l'approche RSM (Reynolds Stress Model) pour la turbulence et du modèle de combustion EDC (Eddy Dissipation Concept) qui a l'avantage de considérer une chimie modérée.

La flamme en question a fait l'objet du TNF3 ('Third International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames') en 1998. Un récapitulatif des différents travaux se trouve sur le tableau 1.

Tableau 1: Récapitulatif des travaux antérieurs présentés au TNF3
(<http://www.ca.sandia.gov/TNF/>)

J.Y. Chen (Université de Berkeley)	
Modèle de turbulence	RSM
Modèle de combustion	PDF transportée avec le modèle de Curl pour le terme de mélange moléculaire
Mécanisme réactionnel chimique	Mécanisme réduit à 10 étapes dérivé de GRI 1-2
H. Pitsch (Université de San Diego)	
Modèle de turbulence	$k - \varepsilon$ avec le code Fluent
Modèle de combustion	Flammelettes stationnaires avec un nombre de Lewis égal à 1 pour toutes les espèces
Mécanisme réactionnel chimique	Mécanisme réduit à 14 étapes [3]
H. Sanders (Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs, CNRS Orléans)	
Modèle de turbulence	RSM [4]
Modèle de combustion	Flammelettes stationnaires avec un nombre de Lewis constant pour chaque espèce
Mécanisme réactionnel chimique	GRI 2-II

Récemment, le modèle de combustion CMC du premier ordre a été appliqué avec succès au calcul de cette flamme [5]. Ce travail avait pour but de déterminer l'influence de la complexité des mécanismes réactionnels chimiques sur la précision des résultats.

Par ailleurs, dans les différents travaux cités plus haut, des disparités entre calculs et mesures ont été observées dans la section $x/D = 5$.

2. PRESENTATION DE LA CONFIGURATION EXPERIMENTALE

La flamme est constituée d'un jet axisymétrique de fuel de diamètre $D = 8$ mm. Le co-courant est un écoulement d'air, de diamètre $D = 140$ mm, débouchant à $0,3 \text{ m.s}^{-1}$ (Fig. 1). Les différentes caractéristiques de cette flamme sont résumées dans le tableau 2.

Tableau 2: Caractéristiques de la flamme

P [atm]	1
T [K]	300
% CH ₄	22,1
% H ₂	33,2
% N ₂	44,7
U _i [m.s ⁻¹]	42,15
U _{co-courant} [m.s ⁻¹]	0,3
ρ_j [kg.m ⁻³]	0,678
Re	15200

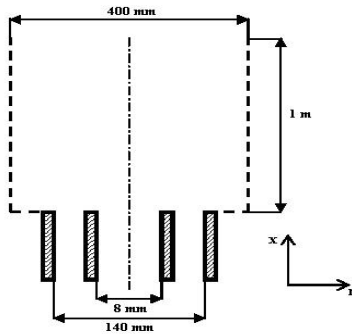


Fig. 1: Configuration de la flamme

Les mesures concernant la température et les fractions massiques des différentes espèces ont été réalisées par Bergmann *et al.* [1]. Hassel et Geib [6] ont établi les profils de vitesse à l'aide de la technique Laser à effet Doppler.

3. MODELISATION DE LA FLAMME

Les équations de Navier-Stokes sont résolues dans le cadre de la moyenne de Favre en configuration axisymétrique. Les simulations sont conduites avec le modèle de turbulence RSM (Reynolds Stress Model). L'interaction chimie turbulence est modélisée avec l'approche EDC (Eddy Dissipation Concept) [7]. Le mécanisme réactionnel chimique GRI 1-2 est adopté pour cet effet dont les caractéristiques sont résumées dans le tableau 3 suivant.

Tableau 3: Caractéristiques du mécanisme réactionnel GRI 1-2

Mécanisme	Application	Réactions	Espèces
GRI 1-2	Gaz naturel	177	30

Les transferts de chaleur par rayonnement sont comptabilisés dans l'équation de l'énergie. Ceux-ci sont modélisés selon l'hypothèse de flammes minces. Les espèces chimiques responsables du rayonnement sont respectivement H_2O , CO_2 , CO et CH_4 .

Le modèle mathématique est discrétisée avec la méthode des volumes finis avec un schéma centrée pour les termes de diffusion et un schéma amont d'ordre 1 pour les termes de convection. Le couplage vitesse-pression est réalisé avec l'algorithme SIMPLE [8]. Les simulations sont conduites avec le code Fluent.

4. DESCRIPTION DU MAILLAGE ET DES CONDITIONS AUX LIMITES

La zone de calcul comporte trois domaines (Fig. 2):

- Le domaine intérieur de l'injecteur, noté D_1 , et dont les dimensions sont (respectivement longueur et largeur): $L = 400 \text{ mm}$ et $l = 4 \text{ mm}$. Le profil de vitesse expérimental n'étant pas connu, une certaine longueur pour l'injecteur est considérée afin d'avoir un profil établi de vitesse à l'injection.
- Le domaine du co-courant, noté D_2 , et dont les dimensions sont: $L = 400 \text{ mm}$ et $l = 65 \text{ mm}$.
- Le domaine correspondant à la zone de mélange, noté D_3 , et dont les dimensions sont: $L = 1 \text{ m}$ et $l = 400 \text{ mm}$.

Le maillage est resserré dans les zones à gradients de vitesse élevés: près des parois de l'injecteur et dans la couche cisailée du jet. Les différentes caractéristiques du maillage sont résumées sur le tableau 4.

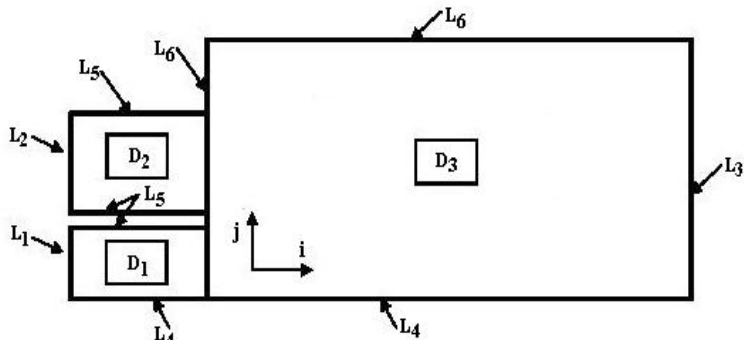


Fig. 2: Configuration du domaine de calcul

Tableau 4: Caractéristiques du maillage

Domaine	N_i	N_j	$N_i \times N_j$
D_1	30	10	300
D_2	30	30	900
D_3	150	83	12450

Dans la section du jet principal (L_1), une condition de vitesse est imposée. Au niveau du co-courant (L_2), une condition de vitesse est également appliquée. Une condition de type ‘outflow’ est considérée pour la section de sortie (L_3). Une condition de symétrie est utilisée pour l’Axe de l’injecteur et du jet (L_4). Les parois de l’injecteur (L_5) sont supposées adiabatiques. La condition de ‘pressure inlet’ est sollicitée pour les parois extérieures (L_6)

5. RESULTATS

Des calculs préalables dans lesquels les performances des modèles de turbulence RSM et $k-\epsilon$ ont été comparées, ont permis de noter que le modèle RSM est le plus approprié à représenter la zone proche de l’injection. En effet, sur la figure 3, on constate que l’utilisation du modèle RSM permet d’améliorer l’épanouissement radial. Pour cela, les résultats ci-après sont obtenus avec le modèle de turbulence RSM.

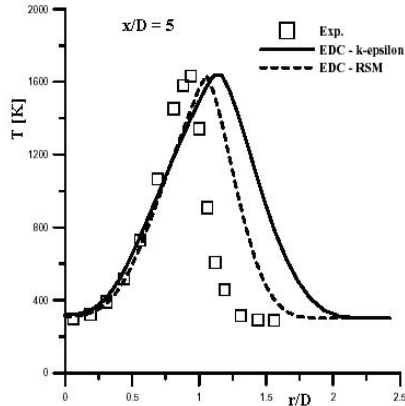


Fig. 3: Comparaison des prédictions obtenues avec les modèles $k-\epsilon$ et RSM à $x / D = 5$

La figure 4 qui représente les 'iso-contours' de la température dans la flamme nous indique que la température maximale calculée, ainsi que sa position sont compatibles avec les mesures. En effet, les calculs prédisent une température maximale de l'ordre de 1860 K à la position $x/D = 62$ et la température maximale mesurée est de l'ordre de 1842 K et est située à $x/D = 60$.

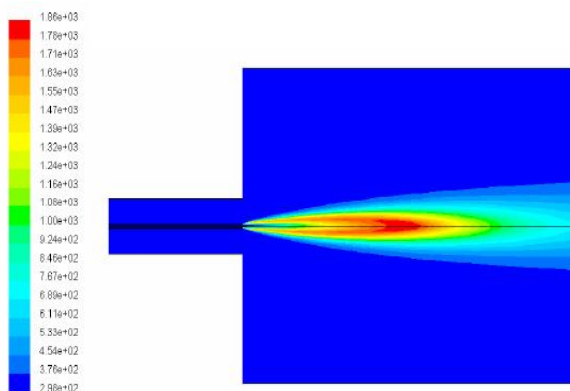


Fig. 4: Les 'iso-contours' de la température de la flamme

Dans ce qui suit, on s'intéresse, aux variations radiales, respectivement, de la température et des fractions massiques de CH_4 , H_2 , O_2 , N_2 , H_2O , CO_2 et CO . Afin de ne pas surcharger la présentation des résultats, les prédictions sont comparées aux mesures uniquement dans les deux sections suivantes : $x/D = 5$ et $x/D = 40$ qui représentent respectivement le champ proche et lointain.

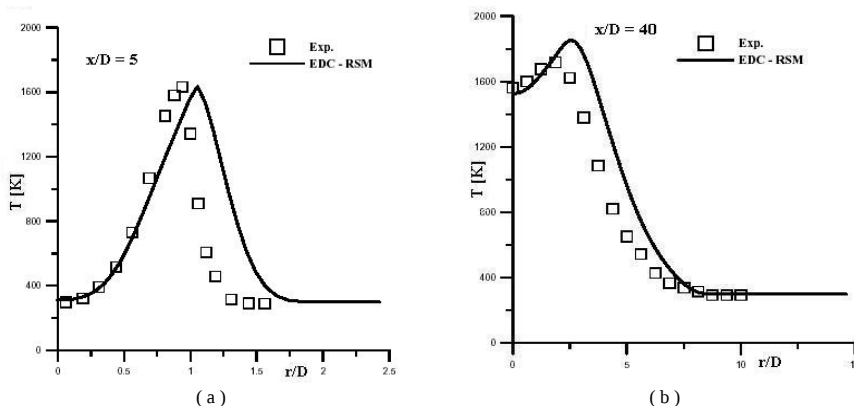


Fig. 5: Profils radiaux de la température

Les évolutions radiales de la température sont regroupées en figure 5. Dans la première section (Fig. 5a), les calculs donnent lieu à un épanouissement plus large du fait de la présence, dans cette zone, de forts gradients de densité et de vitesses. Par ailleurs, le maximum de température est calculé correctement, car le modèle de combustion adoptée considère une chimie modérée.

La précision des résultats s'améliore en direction de l'intérieur de la flamme du fait de l'atténuation des effets des gradients de densité et de vitesses (Fig. 5b).

Les distributions radiales des fractions massiques de CH_4 et de H_2 sont illustrées sur les figures 6 et 7. Une bonne concordance entre les calculs et les mesures est notée.

La figure 8 montre les profils radiaux de O_2 et de N_2 . Pour ce qui est des résultats de O_2 , les remarques constatées dans les cas des profils radiaux de température restent valables ici. En ce qui concerne N_2 , les calculs sous-estiment la fraction massique de N_2 dans la première section (Fig. 8a) dans la plage radiale se situant entre $0 \leq r/D \leq 0.7$, ce qui veut dire que l'entraînement est sous-estimé dans cette zone. Dans les autres sections (Fig. 8b), l'entraînement est correctement prédit.

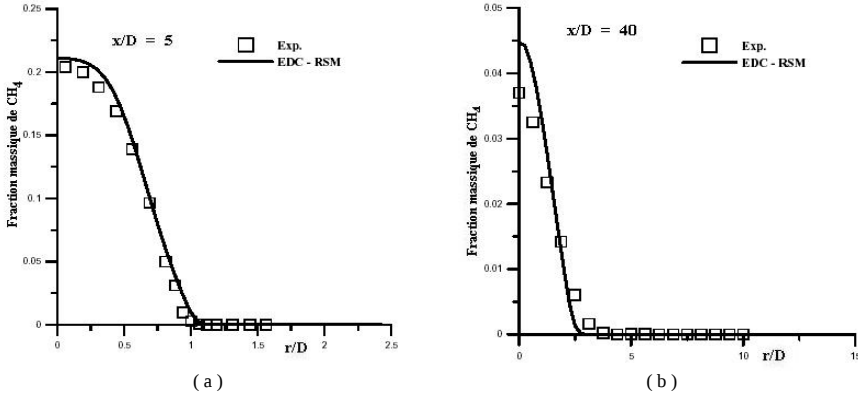


Fig. 6: Profils radiaux de la fraction massique de CH_4

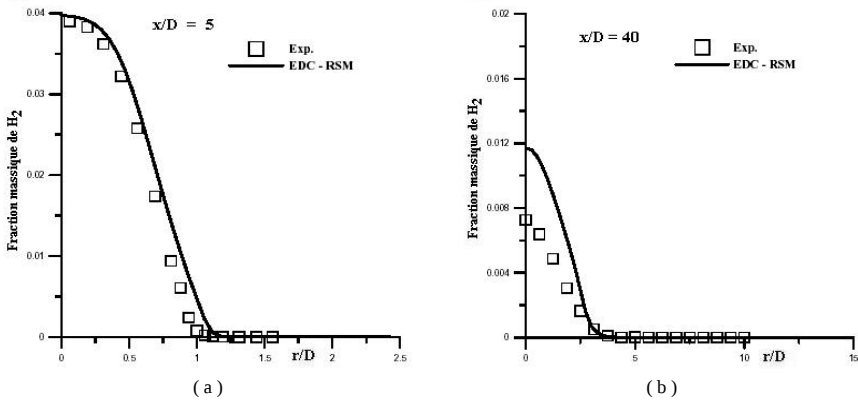


Fig. 7: Profils radiaux de la fraction massique de H_2

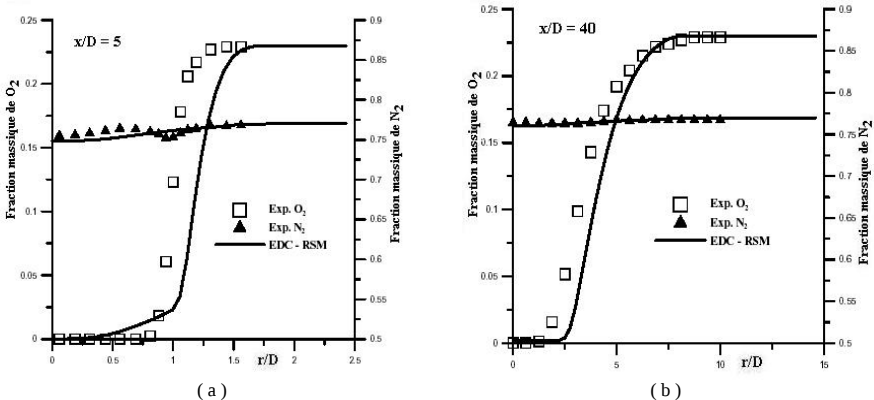
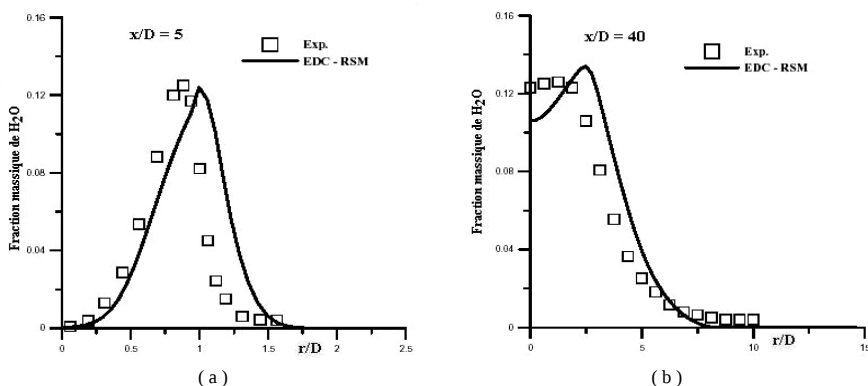
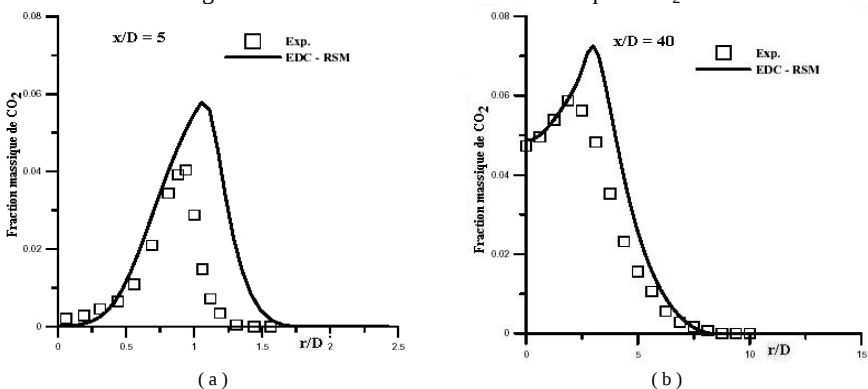
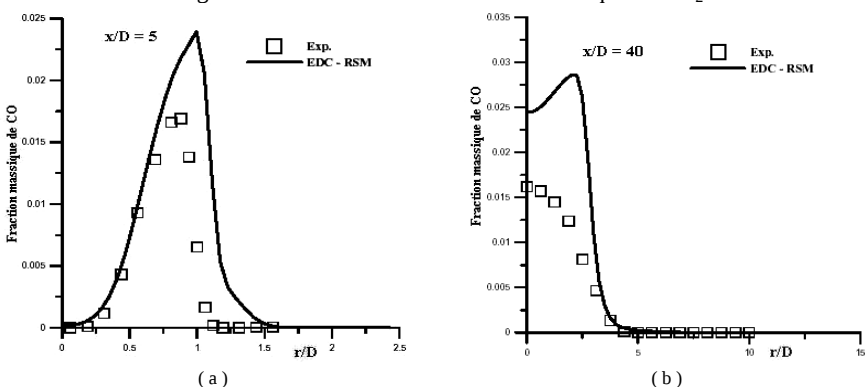


Fig. 8: Profils radiaux des fractions massiques de O_2 et de N_2

Les évolutions radiales de la fraction massique de H_2O sur la figure 9 sont comparables à celle de la température. Une bonne adéquation est obtenue entre les calculs et les résultats expérimentaux avec toutefois une légère surestimation de l'épanouissement radial à $x/D = 5$ (Fig. 9a). Sur la figure 10, le maximum de CO_2 ainsi que l'épanouissement radial sont surestimés dans la première section (Fig. 10a). Une amélioration des résultats est également constatée en direction de l'intérieur de la flamme (Fig. 10b). Sur la figure 11, en tenant compte des erreurs de mesure, on s'aperçoit que les profils radiaux de CO varient d'une manière analogue à ceux de CO_2 avec toutefois une certaine surestimation des mesures.

Fig. 9: Profils radiaux de la fraction massique de H_2O Fig. 10: Profils radiaux de la fraction massique de CO_2 Fig. 11: Profils radiaux de la fraction massique de CO

6. CONCLUSION

Les conclusions de cette étude sur la flamme de diffusion turbulente de $(\text{CH}_4 - \text{H}_2 - \text{N}_2) / \text{Air}$ à forts rapports de vitesse et de densité permettent de dresser un bilan de l'approche adoptée.

Les résultats nous indiquent que l'outil numérique est apte à reproduire les caractéristiques de la flamme (longueur, épaisseur et maximum de température).

Dans la première section, il a été trouvé que les maximums de température et de H_2O sont calculés correctement. De plus, il a été constaté que les valeurs sur l'axe des fractions massiques de CH_4 et de H_2 sont bien estimées et que l'épanouissement radial et l'entraînement ne sont pas prédits correctement à cause des effets de gradients de densité et de vitesses.

Une amélioration de la précision des résultats est notée en direction de l'intérieur de la flamme.

REFERENCES

- [1] V. Bergmann, W. Meir, D. Wolff and W. Stricker, '*Application of Spontaneous Raman and Rayleigh Scattering and 2D LIF for the Characterization of a Turbulent $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{N}_2$ Jet Diffusion Flame*', Appl. Phys. B : Laser and Optics, Vol. 66, N°4, pp. 489 – 502, 1998.
- [2] H. Pitsch, '*Unsteady Flamelet Modelling of Differential Diffusion in Turbulent Jet Diffusion Flames*', Combustion and Flame, Vol. 123, pp. 358 – 374, 2000.
- [3] N. Peters, '*In Reduced Kinetic Mechanisms for Application in Combustion Systems*', Springer Verlag, Berlin (Peters N. and Rogg, B., Eds.), 1993.
- [4] B.E. Launder, '*Second-Moment Closure and Its Use in Modelling Turbulent Industrial Flows*', International Journal for Numerical Methods in Fluids, vol. 9, pp. 963 – 985, 1989.
- [5] M. Fairweather, R. M. Woolley and Y. Yunardi, '*Analysis of Kinetic Mechanism Performance in Conditional Moment Closure Modelling of Turbulent, Non-premixed Methane Flames*', Combustion Theory and Modelling, Vol. 10, N°3, pp. 413 – 438, 2006.
- [6] E. Hassel and S. Geiss, <http://www.tu-darmstadt.de/fb/mb/ekt/flamebase.html>, 1998.
- [7] B.F. Magnussen and B.H. Hjertager, '*On Mathematical Modelling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion*', 16th Symposium (Int.) on Combustion, pp. 719 – 729, 1976.
- [8] S.V. Patankar, '*Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*', Hemisphere, Washington, D.C., 1980.