

Simulation aux grandes échelles de la flamme “Jet-in-Hot-Coflow”

Marie CORDIER^{1*}, Pierre BÉNARD², Paul LYBAERT¹, Laurent BRICTEUX¹

¹Université de Mons, Faculté Polytechnique, Institut énergie
56, rue de l'Épargne - B7000 Mons, Belgique

² Université de Normandie, INSA Rouen, UNIROUEN, CNRS, CORIA
Avenue de l'Université - 76801 Saint-Étienne-du-Rouvray

*(auteur correspondant : marie.cordier@umons.ac.be)

Résumé - La combustion diluée met en oeuvre de nombreux phénomènes, à savoir de la turbulence, de la chimie et du rayonnement ainsi que leurs interactions. La prise en compte de ces phénomènes dans une simulation numérique constitue une tâche particulièrement complexe. Cette étude propose d'éprouver les résultats fournis par la simulation aux grandes échelles dans le cas de la flamme “Jet-in-Hot-Coflow” (JHC). Cette simulation est réalisée en incluant un mécanisme chimique Air-CH₄ détaillé (DRM22) et en résolvant directement l'Interaction Chimie-Turbulence (ICT). Les résultats obtenus sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et permettent une analyse fine de la phénoménologie.

Nomenclature

C	concentration, mol/m ³	T	température, K
D	diamètre de l'orifice d'injecteur, m	u	vitesse, m/s
Da	nombre de Damköhler	Y	fraction massique de l'espèce considérée
h	taille caractéristique des mailles, m	<i>Symboles grecs</i>	
I	espèce chimique	ν	viscosité cinématique, m ² /s
k	énergie cinétique turbulente, m ² /s ²	$\dot{\omega}$	taux de production, kg/m ³ .s
M	masse molaire, g/mol	ρ	masse volumique, kg/m ³
N	nombre d'espèces du schéma cinétique	<i>Indices et exposants</i>	
N_r	nombre de réactions du schéma cinétique	k	espèce
q_m	débit massique, kg/s	r	réaction
R	constante des gaz parfaits, m ³ .Pa/mol.K		
Re	nombre de Reynolds		

1. Introduction

La combustion diluée est de plus en plus étudiée car elle constitue un mode de combustion menant à des hauts rendements et des basses émissions d'oxydes d'azote (NO_x) [1, 2]. Elle est obtenue en réalisant une importante recirculation des fumées. La dilution des réactifs avec les produits de combustion conduit à des concentrations locales en réactifs et, par conséquent, à des dégagements de chaleurs locaux plus faibles qu'en combustion classique. Ces dégagements sont également mieux répartis et le champ de température est plus uniforme. La production de NO_x, dont une des sources de production est liée à la température locale, est largement diminuée.

La simulation numérique de ce mode de combustion est complexe car la turbulence de l'écoulement a une influence d'une part, sur la chimie et d'autre part, sur le rayonnement, et réciproquement. La modélisation de ces interactions constitue ainsi un enjeu en simulation numérique de combustion diluée. Par ailleurs, comme la réaction est plus lente qu'en combustion classique (le nombre de Damköhler Da , comparant le temps caractéristique pour la chimie et celui du mélange, proche de l'unité), il est important de tenir compte de la cinétique chimique.

Pour étudier plus en détail ce type de combustion ainsi que la manière de modéliser les interactions qu'elle met en oeuvre, des différents brûleurs académiques ont été mis en place. Parmi ceux-ci, Dally et al. [3] ont développé le brûleur "Jet-in-Hot-Coflow" (JHC), simulé dans ce travail. Plusieurs études numériques ont été réalisées sur celui-ci (e.g. [4, 5, 6]). Les investigations utilisant une approche RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) de Christo et al. [4] ont montré que les modèles utilisés en combustion classique, comme les modèles "flamelet" ou "PDF-fraction de mélange", ne permettent pas de simuler correctement les flammes du brûleur JHC, car ils ne tiennent pas compte des extinctions et allumages locaux de la flamme et des effets de la dilution des espèces. Le modèle "Eddy Dissipation Concept" (EDC) [7] a ainsi été utilisé, mettant en évidence le fait que les mécanismes réactionnels globaux ne sont pas adaptés pour reproduire la cinétique chimique de la combustion diluée. En utilisant une approche de simulation aux grandes échelles (LES : Large Eddy Simulation), Ihme et al. [6] ont appliqué un modèle de "flamelet" amélioré, combiné à de la chimie tabulée. Cette démarche pour modéliser l'Interaction Chimie-Turbulence (ICT) a également été réalisée sur d'autres cas d'étude tels que ceux rapportés dans [8] et [9].

L'amélioration constante de l'efficacité des méthodes numériques combinée à l'augmentation des puissances de calcul permet de réaliser des simulations aux grandes échelles de mieux en mieux résolues en temps et en espace. Lorsqu'une combustion est caractérisée par $Da \approx 1$, la question de la pertinence d'un modèle de sous-maille pour la combustion turbulente se pose. Cette étude propose d'évaluer l'hypothèse de non modélisation de l'ICT via la simulation aux grandes échelles d'une des flammes JHC en utilisant un mécanisme cinétique Air/Méthane détaillé, le DRM22 [10].

2. Méthodologie

2.1. Description du brûleur JHC

Le système modélisé est constitué d'un brûleur principal avec l'injection de combustible (fractions massiques : CH_4 : 88% et H_2 : 12%) au centre (Fig. 1) [3]. Le diamètre intérieur du tube d'injection D est utilisé comme distance de référence et mesure 4.25 mm. Le comburant est constitué d'un mélange de réactifs et de produits de combustion, généré par un brûleur secondaire placé en amont. Pour la flamme étudiée, sa composition massique moyenne est la suivante : O_2 : 6%, CO_2 : 5.5%, H_2O : 6.5%, N_2 : 82%. Le comburant circule dans un anneau d'environ $20 D$, entourant l'injection de combustible. C'est la raison pour laquelle il sera nommé "coflow" par la suite. La température élevée ($T = 1300 \text{ K}$) et la concentration faible en oxygène dans le coflow remplissent les deux conditions pour obtenir une combustion diluée. En ce qui concerne l'air environnant, le brûleur a été placé dans une soufflerie pour imposer une vitesse d'air proche de celle du coflow.

Comme le conduit de coflow est en contact avec l'injection de combustible, des échanges de chaleur se produisent à travers la paroi de l'injection et le coflow présente donc une variation de température dans la direction radiale à la sortie de son conduit. Cette variation de température est prise en compte via l'imposition du profil de température expérimental dans le coflow.

Dally et al. [3] ont étudié l'influence de la concentration en oxygène dans le coflow. Des mesures ont été prises pour un coflow comprenant des fractions massiques moyennes d'oxygène de 3, 6, 9%. Les trois flammes sont obtenues à partir du même débit de combustible et ont donc un même nombre de Reynolds caractéristique $\text{Re}_D = 9500$. Des profils de température et de fractions massiques des espèces ont été mesurés à différentes distances du brûleur $z_0 \approx 1, 7, 14, 28 D$.

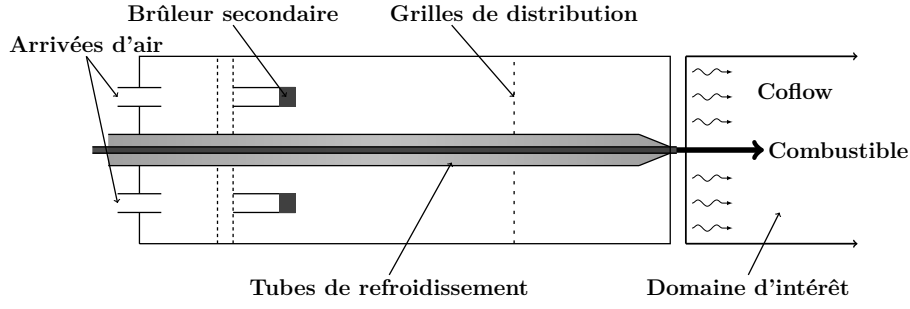


Figure 1 : Schéma du brûleur JHC.

2.2. Modélisation de la chimie

Comme mentionné dans l'introduction, la prise en compte de la cinétique chimique est indispensable en simulation numérique de combustion diluée. Dans cette étude, celle-ci a été réalisée en couplant le modèle FRC (Finite Rate Chemistry) à un schéma cinétique détaillé. Dans ce schéma, la réaction de combustion est décomposée en un ensemble de N_r équations faisant intervenir N espèces :

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kr} I_k \xrightleftharpoons[k_{br}]{k_{fr}} \sum_{k=1}^N \nu''_{kr} I_k, \quad (1)$$

avec ν'_{kr} et ν''_{kr} , les coefficients stoechiométriques de l'espèce k dans la réaction r . La constante d'avancement k_{fr} peut être calculée à partir de la loi d'Arrhénius :

$$k_{fr} = A_r T^{\beta_r} e^{-\frac{E_r}{RT}}, \quad (2)$$

où A_r et B_r sont les constantes d'Arrhénius et E_r , l'énergie d'activation de la réaction r . Le taux de production de chacune des espèces $\dot{\omega}_k$ est la somme des taux de production de l'espèce considérée sur toutes les réactions :

$$\dot{\omega}_k = M_k \sum_{r=1}^{N_r} (\nu''_{kr} - \nu'_{kr}) \left(k_{fr} \prod_{k=1}^N C_k^{\nu'_{fr}} - k_{br} \prod_{k=1}^N C_k^{\nu''_{fr}} \right), \quad (3)$$

avec C_k , la concentration de l'espèce k .

Pour ce modèle de chimie, le choix du mécanisme réactionnel est un point critique. Une comparaison de différents mécanismes détaillés et réduits a donc été effectuée à l'aide de Cantera [11]. Une flamme de diffusion 1D contre-courant a été simulée, dans les conditions de température et concentrations de la flamme JHC étudiée, pour vérifier l'applicabilité de ces mécanismes dans l'application considérée. La température de cette flamme est représentée en fonction de la fraction de mélange Z à la Fig. 2. Pour les deux mécanismes les moins détaillés, la combustion n'a pas lieu dans les conditions précitées alors que les autres mécanismes produisent le même profil de température adiabatique. L'analyse d'autres grandeurs, telles que le dégagement de chaleur et les fractions massiques des espèces ont mené à la même conclusion. Par conséquent, le schéma cinétique DRM22 (22 espèces, 104 équations) présente un bon compromis entre prédiction correcte de la chimie et coût de calcul. Une comparaison (voir Fig. 3) du DRM22 avec le mécanisme détaillé GRI-3.0 [12] (53 espèces, 325 réactions) montre que le mécanisme DRM22 permet d'obtenir les mêmes résultats que GRI-3.0 à coût réduit.

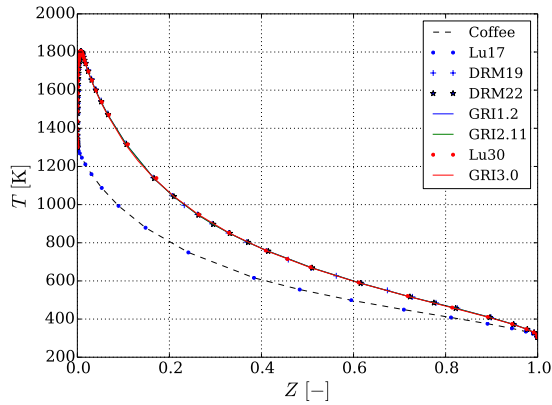


Figure 2 : Température adiabatique de flamme en fonction de la fraction de mélange pour la flamme 1D contre-courant.

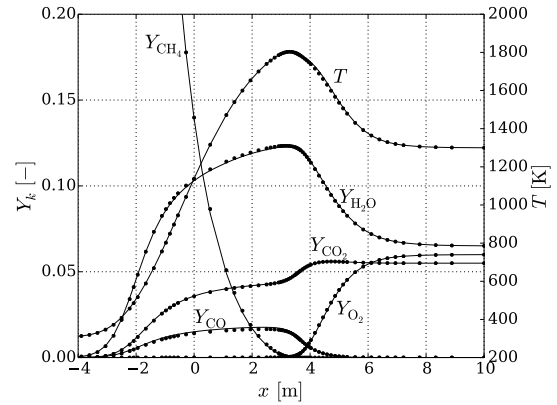


Figure 3 : Fractions massiques des espèces principales et température obtenues avec la flamme à contre-courant, GRI-3.0 (—), DRM22 (●)

2.3. Paramètres de la simulation numérique

Le domaine de calcul est cylindrique et une coupe de celui-ci est représentée à la Fig. 4. Pour avoir des conditions limites réalistes à l'entrée du domaine, les écoulements de combustible et de coflow sont aussi simulés sur une distance en amont du brûleur de respectivement $7D$ et $3.5D$. La séparation matérielle entre le combustible et le coflow a également été prise en compte dans la géométrie. Un convergent a été ajouté à la sortie du domaine pour accélérer l'écoulement et éviter les recirculations. Le maillage est constitué d'environ 17 millions de

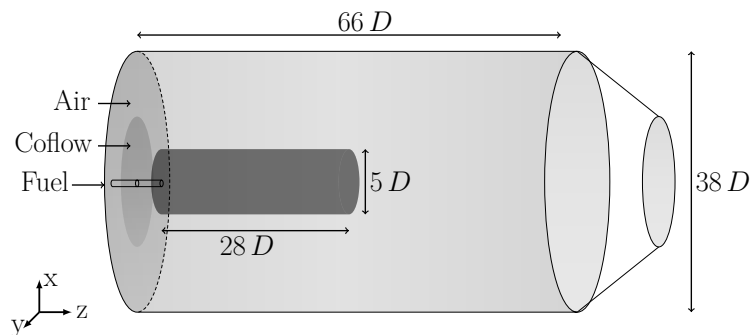


Figure 4 : Visualisation du domaine de calcul et de la zone de raffinement du maillage (gris foncé).

tétraèdres. La région de combustion, située en aval de l'injection de combustible est fortement raffinée localement et la taille des éléments ($\approx 400 \mu\text{m}$) a été choisie de manière à respecter les critères d'une LES bien résolue. Par ailleurs, cette taille est 15 fois plus faible que l'épaisseur thermique obtenue avec la flamme à contre-courant 1D : $\delta_f = \Delta T / \nabla T_{max} \approx 6 \text{ mm}$.

Les conditions imposées sur les trois entrées du domaine sont reprises dans le tableau 1. Par ailleurs, de la turbulence synthétique est générée à l'entrée de l'injection de combustible en utilisant la méthode de Pamiès [13]. Les parois de l'injecteur sont considérées comme adiabatiques. Les parois latérales du domaine ont été placées suffisamment loin de la flamme pour ne pas influencer sa dynamique.

Toutes les simulations ont été réalisées avec le solveur pour des écoulements à densité va-

	q_m	u	T	Y_k
	kg.s^{-1}	m.s^{-1}	K	-
Combustible	$3.1 \cdot 10^{-4}$		305	$\text{CH}_4 : 88\%, \text{H}_2 : 12\%$
Coflow	$4.7 \cdot 10^{-3}$		profil expérimental.	profil expérimental.
Air		3.3	294	$\text{O}_2 : 23\%, \text{N}_2 : 77\%$

Tableau 1 : Paramètres d'injection à l'entrée du domaine de calcul.

riable et à faible nombre de Mach du code YALES2 [14]. Celui-ci résout les équations régissant un écoulement réactif en appliquant l'approche FRC. Les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie ainsi qu'une équation de transport de fraction massique pour chaque espèce considérée [15] sont résolues avec des schémas précis en temps et en espace. La modélisation de la turbulence est réalisée grâce à un modèle de Smagorinsky dynamique. Aucun modèle d'ICT n'a été pris en compte, ce qui revient à faire l'hypothèse que les termes sources des espèces sont résolus sur la grille LES. La validité de cette hypothèse sera discutée dans la section 3.1. Pour assurer la stabilité et la précision de l'intégration temporelle, un pas de temps adaptatif garantit que $\text{CFL} \leq 0.5$ partout dans le domaine.

3. Résultats

3.1. Qualité de la solution

La Fig. 5 présente le critère de Pope [16], qui compare, dans chaque cellule, l'énergie cinétique turbulente résolue k_{res} et celle calculée par le modèle k_{sgs} de sous-maille. Selon ce critère, si 80% de l'énergie est résolue, les échelles les plus significatives de la turbulence seront correctement capturées.

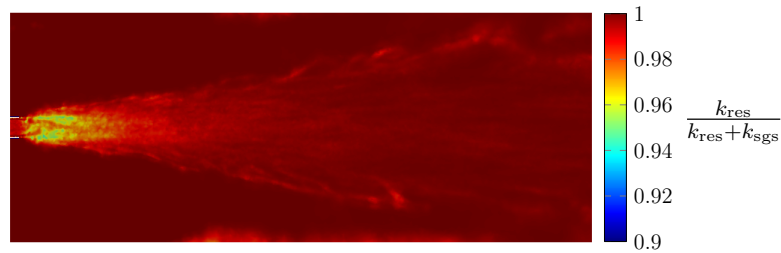


Figure 5 : Visualisation du critère de résolution dans la zone d'intérêt. Dans chacune des cellules, au moins 90% de l'énergie cinétique turbulente est résolue.

Une manière de vérifier l'hypothèse consistant à négliger la modélisation de l'ICT est de définir un nombre de Damköhler de sous-grille Da_{sgs} . Il s'agit du rapport entre le temps caractéristique des échelles de sous-maille τ_{sgs} et le temps caractéristique de la chimie τ_{chem} : $\text{Da}_{\text{sgs}} = \tau_{\text{sgs}} / \tau_{\text{chem}}$. Ces temps caractéristiques sont calculés de la manière suivante :

$$\tau_{\text{sgs}} = \frac{C_S^2 h^2}{\nu_{\text{sgs}}}, \quad (4)$$

$$\tau_{\text{chem}} = \min \left(\frac{\rho Y_{\text{CH}_4}}{\dot{\omega}_{\text{CH}_4}}, \frac{\rho Y_{\text{O}_2}}{\dot{\omega}_{\text{O}_2}} \right), \quad (5)$$

avec C_S , le coefficient du modèle dynamique de Smagorinsky, h , la taille caractéristique des cellules dans la zone de raffinement et ν_{sgs} , la viscosité cinématique de sous-grille. Si $Da_{sgs} < 1$, le mélange dû aux petites structures turbulentes a un effet négligeable sur la modélisation de la chimie [17]. La fine grille LES utilisée ici combinée au schéma cinétique DRM22, mène à $Da_{sgs} < 1$ dans la majeure partie du domaine. Néanmoins, 9% des cellules dans le front de flamme sont telles que $Da_{sgs} > 1$, ce qui nécessiterait d'étudier l'influence de l'ajout d'un modèle d'ICT. Ceci fait l'objet de travaux en cours.

3.2. Analyse de l'écoulement

Bien que l'étude expérimentale ne fournisse pas de mesures de vitesse, il est intéressant d'analyser la topologie de l'écoulement de manière qualitative. Les champs de vitesse moyenne axiale \bar{u} et de fluctuations axiales u_{rms} sont représentés à la figure 6. Ils permettent de visualiser l'ouverture du jet de combustible et les zones où l'intensité de turbulence est élevée. A proximité de la sortie de l'injection, cette intensité est maximale sur le pourtour du jet. En effet, les vitesses du combustible et du coflow sont très différentes, donnant naissance à une couche de cisaillement. Celle-ci est instable et s'agrandit en s'éloignant du brûleur, jusqu'à atteindre un écoulement totalement turbulent. C'est d'ailleurs dans cette zone que l'intensité de turbulence atteint son maximum ($\approx 30\%$).

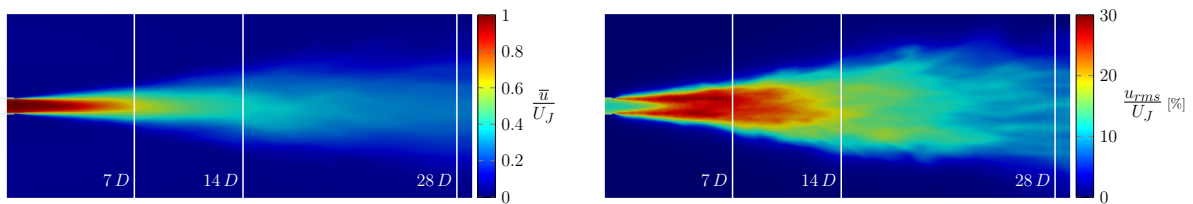


Figure 6 : Champs de vitesse moyenne axiale et de fluctuations axiales (U_J : vitesse au centre du jet de combustible).

3.3. Analyse de la combustion

Les températures et les fractions massiques de H_2O et CO obtenues numériquement sont comparées aux profils expérimentaux à la figure 7, et ce pour plusieurs plans perpendiculaires à la direction axiale du jet ($z/D = 7, 14, 28$, voir Fig. 6). L'allure globale des profils et les valeurs obtenues correspondent bien aux résultats expérimentaux. Les pics de température sont correctement positionnés mais leur valeur maximum est sous-estimée. Ceci semble être dû au fait que le niveau de température dans le coflow est lui aussi sous-estimé. Il a d'ailleurs été constaté qu'en imposant une température de 1300 K [3], ces pics de température étaient bien mieux capturés. Cependant, la température restait constante dans le coflow, signifiant qu'il aurait fallu modéliser l'injection de coflow sur une plus longue distance pour que l'influence de l'air froid se fasse ressentir. En outre, les profils pour les fractions massiques de H_2O et CO sont cohérents avec les observations faites sur la température. La quantité de CO présente dans le coflow n'apparaît pas dans les résultats de la simulation car cette espèce n'a pas été prise en compte dans le mélange constituant le coflow à l'entrée du domaine. Finalement, le dégagement de chaleur instantané $\dot{\omega}_T$ (Fig. 8) permet de mettre en évidence le front de flamme, séparant le combustible du comburant. Il est bien localisé où la température est la plus élevée. En outre, le maximum de température atteint reste bien inférieur au maximum obtenu ($T_{max} \approx 1800\text{ K}$).

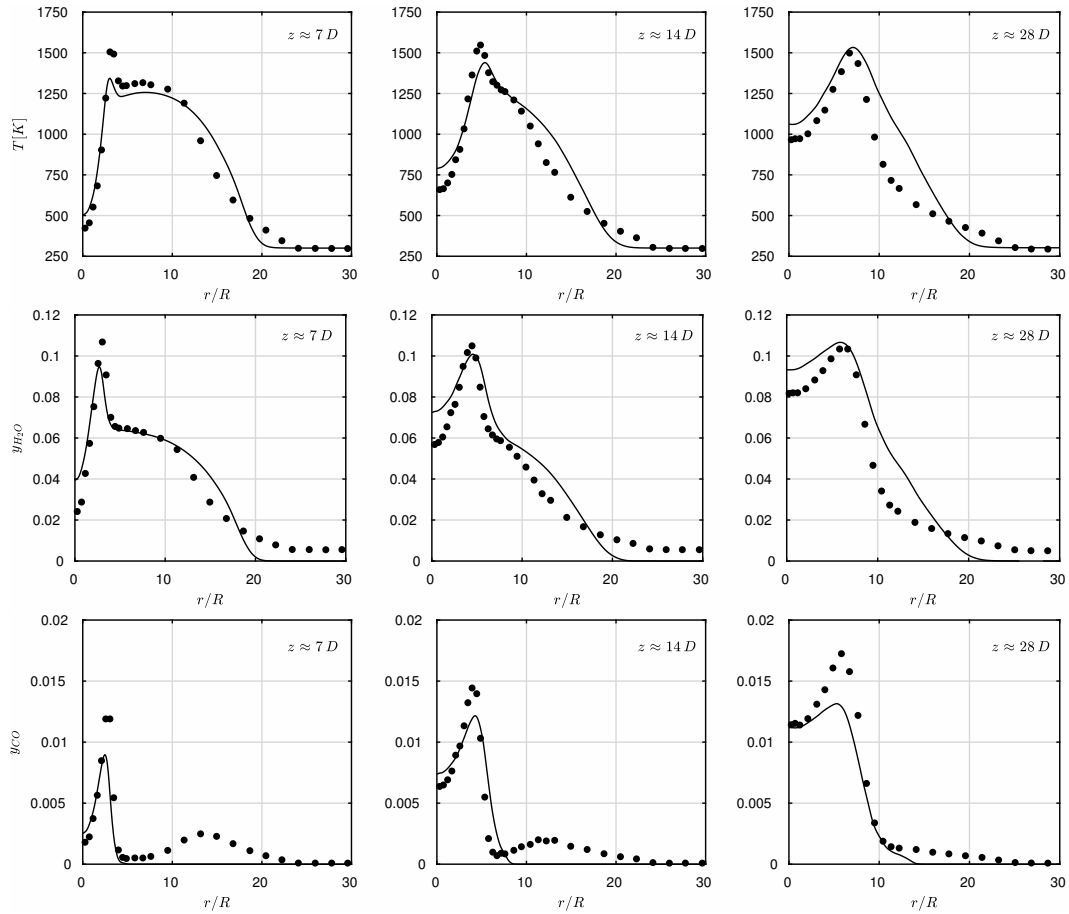


Figure 7 : Profils de température et de fractions massiques H_2O et CO , moyennés dans le temps, LES (—), Experimental (●).

avec la flamme contre-courant 1D (voir Fig. 3).

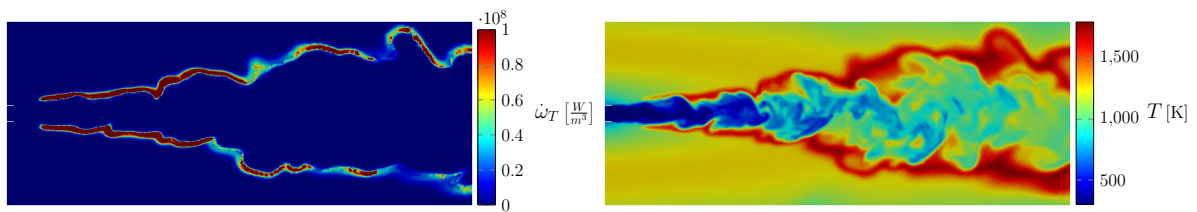


Figure 8 : Dégagement de chaleur et température instantanés dans le plan longitudinal passant par l'axe du jet.

4. Conclusion

La LES réalisée sur la flamme JHC a tout d'abord fourni des informations sur la topologie de l'écoulement et de la flamme. De plus, les résultats obtenus sans modèle ICT sont pertinents car ils sont cohérents avec les mesures expérimentales. Ils montrent que l'absence de modélisation ICT n'entraînent pas une surestimation des pics de température. Au contraire, la valeur maximale de ce pic semble sous-estimée, et nécessite d'améliorer l'introduction des conditions sur

les entrées du domaine.

L'analyse de la solution a prouvé que le maillage réalisé était suffisamment fin pour résoudre l'écoulement en introduisant un modèle de sous-grille. Néanmoins, la présence de cellules avec un $Da_{sgs} > 1$ remet partiellement en cause le fait de négliger le modèle d'interaction chimie-turbulence. Une perspective serait donc de réaliser la même simulation en ajoutant un modèle d'ICT tel que l'"Eddy Dissipation Concept" (EDC) ou le "Partially Stirred Reactor" (PaSR), modèles régulièrement utilisés en RANS de combustion diluée. Ceci permettrait de quantifier l'influence de l'utilisation d'un tel modèle en LES.

Références

- [1] J. A. Wüning, J. G. Wüning, Flameless oxidation to reduce thermal NO-formation, *Prog. Energy Combust. Sci.*, 23 (1997) 81-94.
- [2] A. Cavaliere, M. Joannon, Mild Combustion, *Prog. Energ. Combust.*, 30 (2004) 329-366.
- [3] B.B. Dally, A.N. Karpetis, R.S. Barlow, Structure of Turbulent Non-Premixed Jet Flames in a Diluted Hot Coflow, *Proc. Combust. Inst.* 29 (2002) 1147-1154.
- [4] F.C. Christo, B.B. Dally, R.S. Barlow, Modeling turbulent reacting jets issuing into a hot and diluted coflow, *Combust. Flame.* 142 (2005) 117-129.
- [5] S. H. Kim, K. Y. Huh, B. Dally, Conditional moment closure modeling of turbulent nonpremixed combustion in diluted hot coflow, *Proc. Combust. Inst.* 30 (2005) 751-757.
- [6] M. Ihme, Y. C. See, LES flamelet modeling of a three-stream MILD combustor : Analysis of flame sensitivity to scalar inflow conditions, *Proc. Combust. Inst.* 33 (2011) 1309-1317.
- [7] I.R. Gran, B.F. Magnussen, A Numerical Study of a Bluff-Body Stabilized Diffusion Flame. Part 2. Influence of Combustion Modeling and Finite-Rate Chemistry, *Combust. Sci. Technol.* 119 (1996) 191-217.
- [8] J.W. Labahn, C.B. Devaud, Large Eddy Simulations (LES) including Conditional Source-term Estimation (CSE) applied to two Delft-Jet-in-Hot-Coflow (DJHC) flames, *Combust. Flame.* 164 (2016) 68-84.
- [9] J. Lamouroux, M. Ihme, B. Fiorina, O. Gicquel, Tabulated chemistry approach for diluted combustion regimes with internal recirculation and heat losses, *Combust. Flame.* 161 (2014) 2120-2136.
- [10] A. Kazakov, M. Frenklach. DRM22 Mechanism, <http://www.me.berkeley.edu/drm/>.
- [11] D.G. Goodwin, H. K. Moffat, R. L. Speth, Cantera : An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes, *Journal of Thermodynamics.* (2015).
- [12] G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song, W. C. Gardiner Jr, et al. GRI 3.0 Mechanism, *Gas Research Institute* (http://www.me.berkeley.edu/gri_mech) (1999).
- [13] M. Pamiès, P-E. Weiss, E. Garnier, S. Deck, P. Sagaut, Generation of synthetic turbulent inflow data for large eddy simulation of spatially evolving wall-bounded flows, *Phys. Fluids* 21 (2009) 045103-045103-15.
- [14] V. Moureau, P. Domingo, L. Vervisch, Design of a massively parallel CFD code for complex geometries, *Comptes Rendus Mécanique.* 339 (2011) 141-148.
- [15] P. Bénard, V. Moureau, G. Lartigue, Y. D'Angelo, Large-Eddy Simulation of a hydrogen enriched methane/air meso-scale combustor, *Int. J. Hydrogen Energy.* 42 (2017) 2397-2410.
- [16] S.B. Pope, Turbulent flows, Cambridge University Press, Cambridge, UK (2000) 771.
- [17] C. Duwig, K.-J. Nogenmyr, C.-k. Chan, M. J. Dunn, Large eddy simulations of a piloted lean premix jet flame using finite-rate chemistry, *Combust. Theor. Model.* 15 (2011) 537-568.

Remerciements

Les auteurs souhaitent remercier le Prof. Dally pour les résultats détaillés des mesures prises sur le brûleur JHC. Les ressources de calcul ont été fournies par le Consortium des Équipements de Calcul Intensif en fédération Wallonie Bruxelles (CECI), financé par le Fond de la Recherche Scientifique de Belgique (FRS-FNRS) et la région Wallonne. Les auteurs remercient également G. Lartigue et V. Moureau du Coria pour l'accès au code YALES2.