

# Simulation numérique à trois dimensions d'une flamme de diffusion en utilisant un schéma réactionnel quasi-global et détaillé.

S. NECHAD, A. KHELIL, L. LOUKARFI ET M. BRAKIA

Université UH CHLEF, Faculté des sciences et science de l'ingénieur, BP 121, 2000, CHLEF, ALGERIE

## Résumé :

Dans le présent travail, on s'intéresse à la simulation numérique en trois dimensions (3D) des flammes de diffusion d'un écoulement turbulent et réactif dans une chambre de combustion "TECFLAM". Plusieurs facteurs qui influencent le processus de combustion sont examinés. Un des objectifs est d'étudier l'influence des modèles de turbulence et les mécanismes réactionnels sur la prédiction de l'écoulement du champ de température et la modélisation des émissions polluantes NOx. Le calcul numérique a été effectuée en utilisant le code commercial Fluent. Les modèles de turbulence k-ε standard et RSM (Reynolds stress model) sont utilisés pour décrire l'écoulement turbulent. Le modèle de fonction de densité de probabilité PDF (fonction β) (9 espèces et 8 réactions) avec un modèle d'équilibre chimique et le modèle des flammelles laminaires (17 espèces et 46 réactions) sont utilisés pour la modélisation de l'interaction turbulence- chimie. Le post-processeur NOx est utilisé pour prédire les émissions de NO. La concentration des radicaux OH et O sont obtenus en supposant l'hypothèse de l'équilibre partiel et en utilisant une PDF en termes de température. Les résultats numériques obtenus sont comparés aux résultats expérimentaux [3] et [13].

## Abstract:

In this work, we study the numerical simulation of three dimensional (3D) diffusion flames of a reactive turbulent flow in a combustion chamber "TECFLAM". Several factors which influence the combustion process are discussed. One objective is to study the influence of turbulence models and reaction mechanisms on the prediction of flow field and temperature modeling of NOx. The numerical calculation was performed using the commercial code Fluent. The turbulence models k-ε standard and RSM (Reynolds stress model) are used to describe the turbulent flow. The probability density function model PDF (β function) (9 species and 8 reactions) with a model of chemical equilibrium and laminar flamelet model (17 species and 46 reactions) are used for modeling turbulence – Chemistry interaction. The post-processor is used to predict NOx emissions of NO. The concentration of O and OH radicals are obtained assuming the partial-equilibrium assumption and using a PDF in terms of temperature. The numerical simulation of various factors influencing the combustion process are examined and compared favourably with experimental results [3] et [13].

**Mots clefs :** flamme de diffusion ; écoulement turbulent tourbillonnaire ; les modèles de la cinétique chimique ; NOx ; Fluent.

## 1. Introduction

L'énorme progrès obtenu grâce aux outils de simulation et aux derniers modèles de combustion turbulente rend l'association entre l'approche numérique et le travail expérimental de plus en plus indispensable [1]. L'application de la composante de la vitesse tangentielle (W), donne à l'écoulement une composante de rotation, présentée par un nombre adimensionnelle (S) qui est défini par le rapport du flux tangentiel sur le flux axial :

$$S = \int_0^{R_{in}} \rho U W r^2 dr / R_{in} \int_0^{R_{in}} \rho U^2 r dr \quad (1)$$

Avec,  $R_{in}$  présente le rayon intérieure. A. Khelil et al. [1] ont traité la prédiction numérique d'une flamme de diffusion du gaz naturel à fort tourbillonnement dans un milieu confiné. Le calcul numérique a été effectué par le code commercial *Fluent*. Le modèle de turbulence RSM est utilisé pour décrire l'écoulement turbulent. Le modèle de fonction de densité de probabilité PDF (fonction  $\beta$ ) (9 espèces et 8 réactions) avec un modèle d'équilibre chimique est utilisé pour modéliser l'interaction turbulence- chimie. Leurs objectif principal est de déterminer les émissions polluantes et d'étudier numériquement les facteurs qui influencent le processus de combustion en comparant les résultats avec les mesures expérimentales. Plusieurs chercheurs ont étudié la prédiction des champs d'écoulements et de températures par le code *Fluent* [2, 3, 4, 5, 6]. Le code commercial *Fluent* 6,0 a été utilisé par Frassoldati et al. [4] pour simuler une flamme de diffusion du gaz naturel confiné à fort tourbillonnement, en se référant aux travaux développés par Schmitt et al. [7]. Un modèle de turbulence k- $\epsilon$  avec une nouvelle procédure SFIRN développé par Faravelli et al. [8] sont utilisés pour la modélisation de l'interaction de la chimie- turbulence, dans le but de prédire la formation des émissions polluants NOx. Ces auteurs ont trouvé un accord satisfaisant avec les données expérimentales. German et al. [9] ont montré que l'accord global entre les mesures et les prédictions numériques obtenues à la fois avec le modèle de turbulence k- $\epsilon$  et le modèle de turbulence des contraintes de Reynolds (RSM) sont raisonnablement satisfaisants. Cependant, certaines caractéristiques des champs d'écoulement isotherme et de la combustion ainsi que des propriétés de la flamme sont mieux prédites par le modèle de turbulence des contraintes de Reynolds (RSM) [10]. M. Ravikanti et al. [11] ont développé une méthode pour améliorer le model des flamelettes laminaire dans sa forme adiabatique a la forme non adiabatique qui tien en compte l'échange de chaleur par radiation ainsi sont effet sur les émissions polluantes. Le schéma réactionnel détaillé GRI 2.11 avec deux modèles de turbulence k- $\epsilon$  modifier et RSM sont adoptés. Les résultats montrent que l'emploi du model k- $\epsilon$  modifier au lieu du model RSM donne une surestimation dans la prédiction des fractions massiques de NO dans la ligne centrale. B. MERCI et al. [12] Ont présenté les résultats de la simulation numérique pour un jet des flammes de diffusion mis à l'essai avec une interaction forte turbulence-chimie. Le modèle de premier ordre non-linéaire k- $\epsilon$  est appliqué en combinaison avec le model présumé  $\beta$ -PDF pour la modélisation de l'interaction turbulence-chimie. Deux modèles de chimie sont considérés: l'équilibre chimique et un modèle flamelettes laminaire stationnaire. Dans la deuxième partie du document, les résultats sont présentés par l'approche scalaire PDF transportés comme model d'interaction turbulence-chimie. Ils ont trouvé que la force de cisaillement influe beaucoup sur le champ d'écoulement et le taux de mélange dans la région de la sortie de la buse.

## 2. Géométrie et modèles mathématiques

Les données expérimentales du projet TECFLAM résultent d'un ensemble de tests sur une chambre de combustion cylindrique refroidie à l'eau, de diamètre intérieur  $D_i = 0.5$  m et de hauteur  $L = 1.2$  m (Fig.1). Le brûleur présente la partie importante dans la chambre de combustion TECFLAM. L'air est injecté à la pression atmosphérique et à la température ambiante par trois conduites de 35 mm de diamètre localisé au fond du brûleur [4, 1, 13]. L'air tourbillonnaire est généré par 16 vanes radiales. Le nombre de swirl peut être ajusté entre 0.0 et 2.0. Le brûleur est de diamètre  $D = 0.06$ m, avec un générateur de swirl entouré par un anneau de 3 mm de largeur pour l'injection du carburant et un autre pour l'injection d'air. La composante tangentielle de vitesse a été imposée par le générateur de tourbillonnement placé en amont du brûleur.

### 2.1. Modèle de turbulence

Les équations stationnaires moyennées de Navier-Stokes (RANS) sont appliquées. La turbulence est modélée par la model (RSM) [14,15].

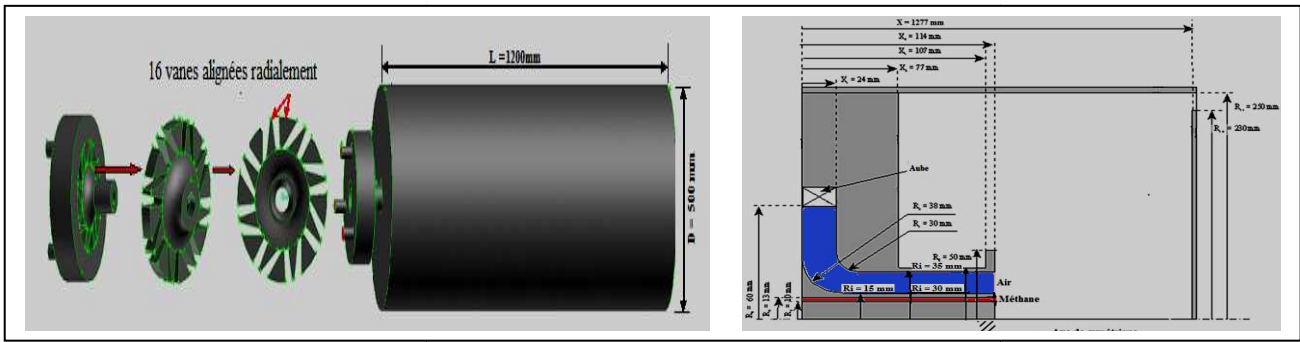


FIG. 1 - Géométrie du brûleur et de la chambre de combustion

## 2.2. Modèle de Combustion

### 2.2.1. Modèle PDF

Pour les cas où il y a deux jets avec des propriétés uniformes, il est convenable de définir une quantité scalaire fraction massique  $f$ , qui peut être utilisée pour définir le degré de mélange :

$$f = \frac{Y_i - Y_{i,ox}}{Y_{i,fuel} - Y_{i,ox}} \quad (2)$$

Avec  $Y_i$  la fraction massique d'élément  $i$ , l'indice « ox » et « fuel » dénote l'oxygène et gaz respectivement. L'équation d'espèce peut être réduite pour un seul variable  $f$ . Pour l'écoulement turbulent, l'équation de la fraction massique moyenne  $\bar{f}$  et sa variance  $\overline{f'^2}$  peut être exprimé par

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \bar{u}_j \bar{f})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_f} \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_j} \right) + S_f \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \bar{u}_j \overline{f'^2})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_f} \frac{\partial \overline{f'^2}}{\partial x_j} \right) + C_g \mu_t \left( \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_j} \right)^2 - C_d \rho \left( \frac{\varepsilon}{k} \overline{f'^2} \right) + S_{f'} \quad (4)$$

Avec  $\hat{f} = f - \bar{f}$  et les constants  $\sigma_f$ ,  $C_g$  et  $C_d$  prennent les valeurs 0.85, 2.86, est 2.0, respectivement.  $S_f$  est le terme source. La variance de la fraction massique est utilisée dans le modèle de fermeture pour décrire l'interaction turbulence chimie.

### 2.2.2. Modèle des flamelettes laminaires

La structure thermo-chimique des flamelettes laminaires est donnée par la fraction massique ( $f$ ) et le rapport de dissipation ( $\chi_{st}$ ) comme le montre l'équation (5)

$$\bar{\phi} = \iiint \phi(f, \chi_{st}, H) \bar{P}_f(f) \bar{P}_\chi(\chi_{st}) \bar{P}_H(H) df d\chi_{st} dH \quad (5)$$

En appliquant l'hypothèse que  $f$ ,  $\chi_{st}$  et  $H$  sont statistiquement indépendants, la forme  $\beta$ -PDF est présumée pour  $\bar{P}_f$ , et la forme delta pour ( $\bar{P}_{\chi_{st}}$  et  $\bar{P}_H$ ). Le rapport de dissipation moyenné est donné par  $\bar{\chi}_{st} = C_\chi \frac{\varepsilon}{k} \bar{f}^2$

## 2.4. NO<sub>x</sub> post-processeur

Un post-processeur de NO<sub>x</sub> a été utilisé pour prédire la formation de NO provenant de la combustion du gaz naturel. La formation de NO peut être attribuée à deux processus chimiques cinétiques, qui sont NO<sub>x</sub> thermique et NO<sub>x</sub> prompt. Les NO<sub>x</sub> thermiques sont formés par l'oxydation de l'azote atmosphérique à des températures élevées et rapides et NO<sub>x</sub> prompt sont formés par les réactions des espèces intermédiaires au front de flamme [16]. Les principales réactions qui régissent la formation de NO<sub>x</sub> thermique à partir de l'azote moléculaire sont proposées par le mécanisme de Zeldovich étendu [17].

### 3. CONDITIONS AUX LIMITES

Les conditions aux limites utilisées dans cette étude sont données dans le tableau 1

Conditions de fonctionnement	Air	Méthane (CH <sub>4</sub> )
Diamètre hydraulique $D_{hydr}$ (m)	0.03	0.006
Intensité de turbulence à l'entrée (%)	08	05
Nombre de Reynolds ( $Re$ )	42900	7900
Température à l'entrée (K)	300	300
Vitesse d'entrée (m/s)	23	21
Richesse globale [-]	0.808	
Pression de sortie (atm)	1	

Tableau 1 – Les conditions aux limites [2, 3, 4, 1, 13]

### 3.1 MAILLAGE

La définition de la géométrie et la génération du maillage ont été réalisées à l'aide d'un générateur de maillage « GAMBIT » [18], avec des mailles de forme tétraédrique à quatre (04) nœuds. Un raffinement des zones au voisinage de la sortie du brûleur (8383 cellules), a été pris en compte pour capter les différents phénomènes qui peuvent intervenir dans ces zones, notamment les gradients de vitesse et de température (figure 2). Enfin, le générateur de maillage construit lui-même les éléments et nous fournit leurs nombres de cellules ainsi que celui des nœuds (Tab. 2). Des calculs sur différents maillage (Figure 3), montre que la solution de la vitesse axiale ne change pas de manière significative ( $\leq 4\%$ ). On peut donc conclure que la solution est indépendante du maillage.

**Remarque :** le maillage considéré ne concerne que la zone de propagation de la flamme

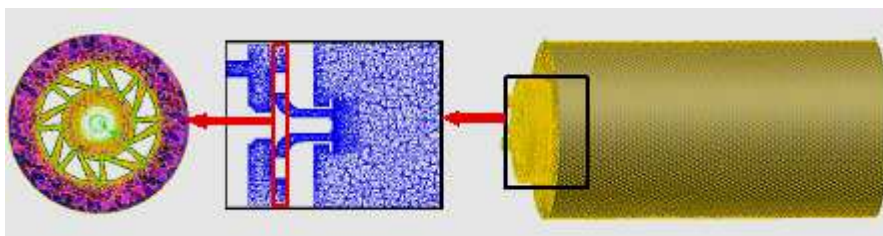


FIG. 2 – Maillage de la chambre de combustion TECFLAM

	Maillage 1	Maillage 2	Maillage 3
Nombre de Cellules	986653	1003688	1420461
Nombre de Nœuds	200497	203664	280284

Tableau 2 – Caractéristiques des différents maillage

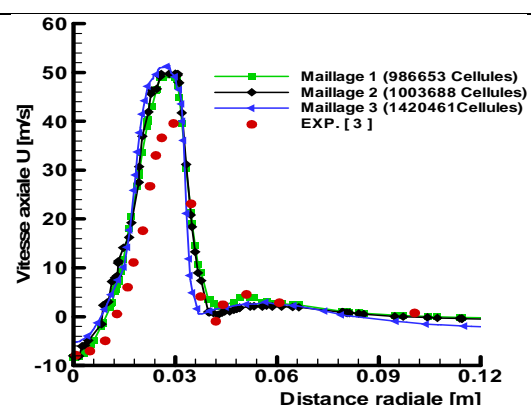
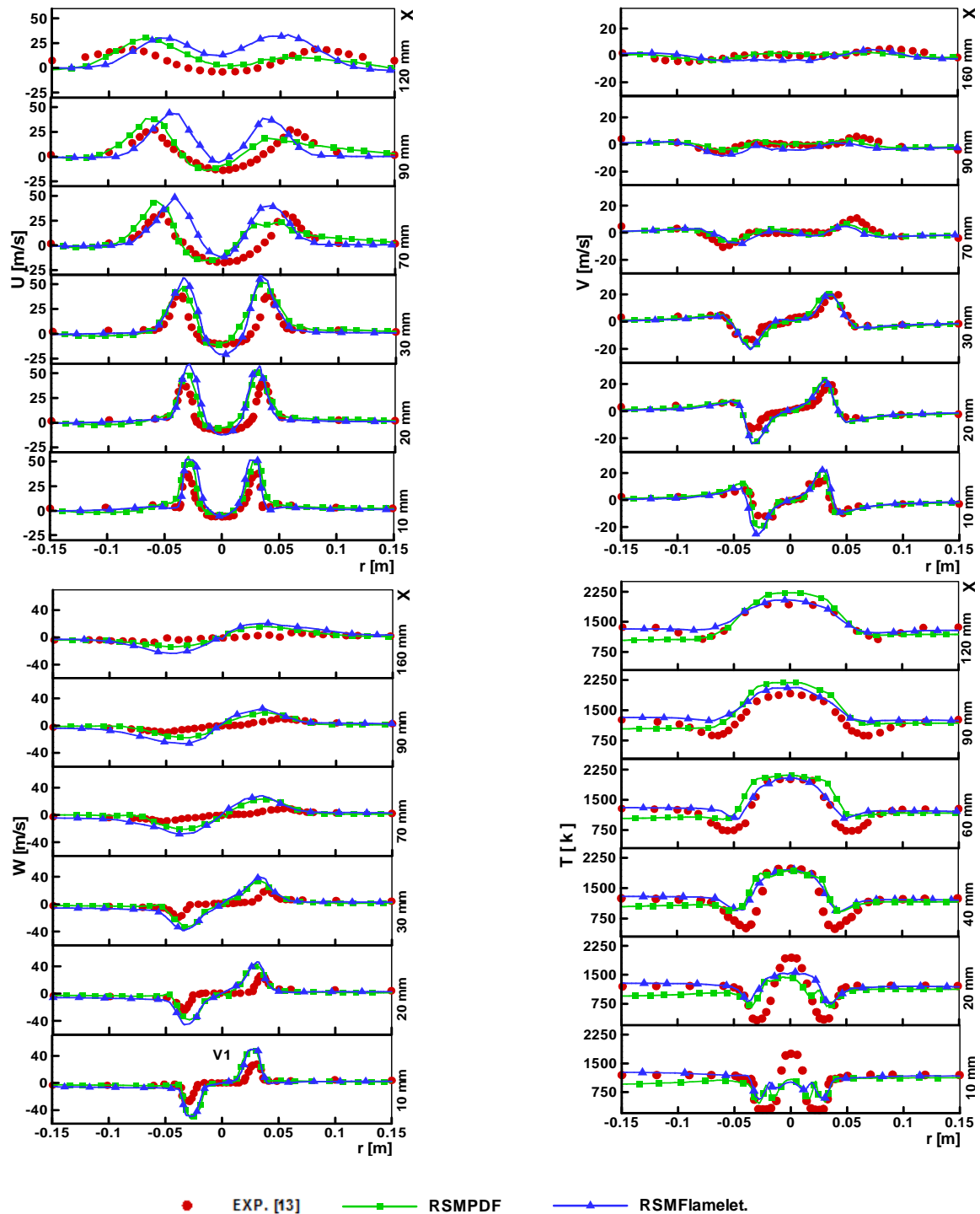


Fig. 3 – Indépendance de la solution du maillage.

Une amélioration sensible dans la prédiction des résultats numériques trouvés par le model de combustion des flammelets laminaires qui utilise le schéma réactionnel détaillé (17 espèces et 46 réactions) comme le montre la figure 4 spécialement dans les zones de grande perturbation. En générale, seul le modèle flammelette laminaire avec le schéma réactionnel détaillé (17 espèces et 46 réactions), donne un bon accord avec les résultats expérimentaux dans la zone de recirculation intérieure aux niveaux des stations loin du brûleur.



**FIG. 4** – Distribution radiale des profils de température moyenne et des vitesses moyennes axiale, radiale et tangentielle à des distances  $X = 10, 20, 40, 60, 90,$  et  $160$  mm à la sortie du brûleur.

## Conclusion

Ce travail consiste à étudier numériquement en trois dimensions (3D) le comportement de l'écoulement réactif dans une chambre de combustion « TECFLAME » d'une turbine à gaz et à comparer les résultats avec des travaux antérieurs [4, 1]. L'un des objectifs visés était d'étudier l'influence de deux modèles de combustion, la fonction de densité de probabilité PDF avec schéma réactionnel quasi-globale (8 réactions et 9 espèces) et flammelettes laminaire avec schéma réactionnel détaillé (46 réactions et 17 espèces) sur les résultats de la prédiction numérique. En plus, dans le but d'améliorer les résultats de la prédiction numérique nous avons pris en compte l'effet de la radiation par le modèle de rayonnement P1. Il s'est avéré que le modèle de combustion flammelettes laminaire associé au schéma réactionnel détaillé (17 espèces et 46 réactions) qui contient plus d'information relative à la chimie de la combustion et au nombre d'espèces en jeu (dissociations multiples) correspond mieux au comportement réel d'une flamme de diffusion comme le montre la figure 4.

## References

- [1] Khelil A., Naji H., Loukarfi L., Mompean G., Prediction of a high swirled natural gas diffusion flame using a PDF model, *Fuel*, 88, 374–381, 2009.
- [2] Meier W., Noll B., Bockhorn H., Leuckel W., Schulz C., Wolfrum J., Schneider C., Repp S., Sadiki A., Dreizler A., Janicka J., Confined TECFLAM swirl burner. Experimental investigations and numerical simulations, 142–173, 2000.
- [3] Meier W., Keck O., Noll B., Kunz O., Stricker W., Investigation in the TECFLAM swirling diffusion flame: laser Raman measurements and CFD calculations, *Applied Physics*, B 71:725–731, 2000.
- [4] Frassoldati A., Frigerio S., Colombo E., Inzoli F., Faravelli T., Determination of NO<sub>x</sub> emissions from strong swirling confined flames with an integrated CFD-based procedure, *Chemical Engineering Science*, 60, 2851–2869, 2005.
- [5] Belkacem A., Peter H., Wiebren J., Marco W., Klaus R., Hartmut S., Gas turbine combustor for biomass derived LCV gas, a first approach towards fuel-NO<sub>x</sub> modeling and experimental validation, *Applied Thermal Engineering*, 22, 959–970, 2002.
- [6] Gordon R., Masri A., Pope S., Graham M., G., Transport budgets in turbulent lifted flames of methane autoigniting in a vitiated co-flow, *Combustion and Flame*, 151, 495–511, 2007.
- [7] Schmittl P., Gunther B., Lenze B., Leuckel W., Bockhorn H., Turbulent swirling flames: experimental investigation of the flow field and formation of nitrogen oxide, *Proceedings of the Combustion Institute*, 28, 303–309, 2000.
- [8] Faravelli T., Bua L., Frassoldati A., Antifora A., Tognotti L., Ranzi E., A new procedure for predicting NO<sub>x</sub> emissions from furnaces, *Computers and Chemical Engineering*, 25, 613–618, 2001.
- [9] German A., Mahmud T., Modeling of non-premixed swirl burner flows using a Reynolds-stress turbulence closure, *Fuel*, 84, 583–594, 2005.
- [10] Jones W. P., Kakhi M., PDF Modeling of Finite-rate Chemistry Effects in Turbulent Non-premixed Jet Flames *Combustion and Flame*, 115, 210–229, 1998.
- [11] Ravikanti M., Malalasekera W., Hossain M., Mahmud T., Flamelet Based NO<sub>x</sub>-Radiation Integrated Modelling of Turbulent Non-premixed Flame using Reynolds-stress Closure, *Flow Turbulence Combust*, 81:301–319, 2008.
- [12] Bart M., Bertrand N., and Dirk R., Flow and Mixing Fields for Transported Scalar PDF Simulations of a Piloted Jet Diffusion Flame ('Delft Flame III'), *Flow, Turbulence and Combustion* 74, 239–272, 2005.
- [13] Guillaume A., Simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs non prémélangés, Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, Université de Toulouse, France, 2009.
- [14] Fairweather M., Woolley R., M., Conditional moment closure calculations of a swirl stabilized, turbulent non-premixed methane flame. *Combustion and Flame*, 151, 397–411, 2007.
- [15] Goldin G., Menon S., A., Comparison of scalar PDF turbulent combustion models, *Combustion and Flame*, 113, 442–453, 1998.
- [17] Heyl A., Bockhorn H., Flamelet modeling of NO formation in laminar and turbulent diffusion flames *Chemosphere*, 42, 449–462, 2001.
- [18] Gambit, A CFD preprocessor, Gambit 2.0 User's guide, Vol.2, Canterra, Lebanon, New Hampshire, USA, 2002.