

Effet du dopage par l'hydrogène sur la structure d'une flamme de diffusion laminaire de méthane-air sous différentes pressions

A. Mameri, A. Laiche et W. Zaouia

Département de Génie Mécanique, Faculté des Sciences et Sciences Appliquées,
Université Larbi Ben M'Hidi, Oum El Bouaghi, Algérie

(reçu le 21 Juillet 2013 - accepté le 30 Février 2014)

Résumé - Dans ce travail, on a calculé l'effet de l'ajout d'hydrogène sur la structure de la flamme laminaire de diffusion du méthane-air sous différentes pressions. On a caractérisé principalement l'évolution de la température, ainsi que les émissions nocives qui sont le CO_2 , CO , NO et NO_2 . Le programme Prepdf de Fluent est utilisé pour achever le calcul. On a pu prouver que la température de la flamme augmente sous l'effet de la pression et du dopage. Aussi l'ajout d'hydrogène diminue essentiellement le CO_2 qui augmente sous l'effet de la pression. Le CO diminue en fonction de la pression et reste indifférent au dopage. Le NO suit la même évolution que la température. Cependant le NO_2 augmente en fonction de la pression et diminue légèrement par le dopage. La limite d'extinction est nettement améliorée par l'enrichissement à l'hydrogène, la flamme devient plus résistante à l'éirement et supporte des vitesses plus importantes des jets.

Abstract - The aim of this work is to compute hydrogen and pressure effects on the methane-air laminar diffusion flame. We have essentially characterized the temperature and harmful emissions (CO_2 , CO , NO and NO_2) evolution. The Fluent Prepdf preprocessor was used to achieve computations. We have proved that temperature increases with pressure and hydrogen doping. Also, hydrogen addition diminishes essentially CO_2 which increases with pressure. The CO decreases with pressure but stays indifferent to hydrogen addition. The NO has the same evolution path like temperature, but NO_2 increases with pressure and decreases slightly with doping. The extinction limits of the flame are clearly improved by hydrogen enrichment, the flame exhibit more resistance to strain and allow higher jets velocities.

Mots clés: Combustion laminaire - Mécanisme réactionnel - Flamme de diffusion.

1. INTRODUCTION

Le mode de vie actuel est énergivore, l'énergie est utilisée en abondance dans les moindres détails de la vie quotidienne qu'ils soient importants ou futiles. L'homme moderne consomme différents types de combustibles pour assurer son confort maximal. Le pétrole est utilisé dans les transports, l'industrie, la production de l'énergie électrique, ... Le gaz naturel est utilisé dans différents domaines, on cite par exemple, le chauffage et les transports. Le coke et le charbon sont exploités dans les industries, tels que la sidérurgie.

La consommation d'énergie ne cesse d'augmenter avec l'explosion démographique, dès les années soixante-dix. On commence à s'inquiéter sur la disponibilité future des sources d'énergie qu'on est sur le point d'épuiser. Pour le pétrole, on parle des années 2050, le gaz tiendra un peu plus. Mais en règle générale, il viendra le jour où tout sera consommé. En parallèle à cette consommation irrationnelle, la quantité d'émissions nocives produites par la combustion est si énorme qu'elle ne peut être éliminée par les procédés naturels. Ces gaz toxiques ont des effets néfastes sur l'environnement et par

conséquent sur la santé de l'homme. Les principaux polluants primaires issus de la combustion sont: CO , CO_2 , NO_x , SO_2 , les hydrocarbures imbrulés et les particules de suie.

Plusieurs solutions au problème de la pollution sont envisageables. Dans cette étude, on explore l'effet de l'ajout d'hydrogène sur flammes non prémélangées (de diffusion). Ce travail s'inscrit alors dans une politique d'utilisation des mélanges combustibles moins polluants, tel que méthane-hydrogène/air ou gaz naturel-hydrogène/air [1, 2]. Cette volonté de réduction des polluants amène les spécialistes dans la conversion d'énergie, telle que moteur à combustion interne, turbine à gaz terrestres ou aéroportées à promouvoir leurs produits d'une façon à minimiser l'effet polluant [3, 4].

D'où le remplacement d'une partie d'un combustible par l'hydrogène est envisageable du fait que ce dernier est un combustible propre et peut être obtenu par voie renouvelable (Ex: biomasse ou craquage de l'eau par l'énergie solaire). Cet ajout contribue à la réduction des polluants, de la température de combustion et à la fois aux émissions de NO_x (production des NO thermiques) [5, 6]. Aussi le dopage par hydrogène est connu par son effet stabilisateur sur les flammes prémélangées pauvres [7].

2. MISE EN EQUATIONS DES FLAMMES LAMINAIRES NON-PREMELANGEES

Nous avons adopté une configuration à deux jets opposés. Cette géométrie est très importante surtout dans la modélisation de la combustion par le modèle des flammelettes laminaires. Le premier jet est constitué de combustible, le deuxième de comburant.

Cette géométrie facilite l'étude de la structure de flamme laminaire, car elle permet une simplification importante des équations de l'écoulement. Dans une telle configuration, les jets sont en impact l'un vers l'autre, ce qui rend l'écoulement stationnaire. Aussi l'effet de la direction perpendiculaire au jet (direction x , Fig. 1) est négligeable par rapport à celle parallèle (direction y).

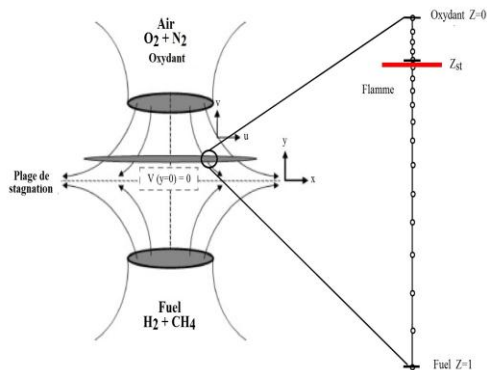


Fig. 1: Géométrie de la flamme et maillage de calcul

La structure des flammelettes laminaires peut être déterminée par la résolution des équations de conservation de la fraction de mélange, des fractions massiques (avec un mécanisme réactionnel donné) et de la température [8]. Les hypothèses suivantes permettent de simplifier l'écriture des équations:

- Le nombre de Lewis est constant, $Le = \lambda / (\rho \times C_p \times D) = 1$.
- Le nombre de Mach est faible, et la densité est constante.
- La combustion est adiabatique (sans perte de chaleur).
- Tous les coefficients de diffusion D_k des espèces chimiques sont égaux à D .
- La loi de Fick est un bon approximant de la vitesse de diffusion.

Sous ces hypothèses, l'équation de la fraction de mélange s'écrit:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \times Z + \nabla(\rho \times \mathbf{u} \times Z) = \nabla(\rho \times D \nabla Z) \quad (1)$$

Celles des fractions massiques:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \times Y_k + \nabla(\rho \times \mathbf{u} \times Y_k) = \nabla(\rho \times D \nabla Y_k) + \dot{\omega}_k \quad (2)$$

Et de l'énergie:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \times T + \nabla(\rho \times \mathbf{u} \times T) = \nabla(\rho \times D \nabla T) + \frac{\dot{\omega}_T}{C_p} \quad (3)$$

Pour introduire la fraction de mélange, on écrit les équations dans le nouveau système de coordonnées ($x_1 = Z$, x_2 , x_3) où le plan perpendiculaire à la surface de la flamme est celui de la fraction de mélange Z . On applique les transformations du type Crocco [9] suivantes:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial Z}{\partial t} \times \frac{\partial}{\partial Z} & \text{et} & & \frac{\partial}{\partial x_1} &= \frac{\partial Z}{\partial x_1} \times \frac{\partial}{\partial Z} \\ \frac{\partial}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial \xi_i} + \frac{\partial Z}{\partial x_i} \times \frac{\partial}{\partial Z} & \text{avec } i=2,3 & & \xi_2 &= x_2 \quad \text{et} \quad \xi_3 = x_3 \end{aligned}$$

L'équation de conservation des espèces donne après application du changement de repère:

$$\begin{aligned} &\rho \times \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} + Y_k \times \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] \\ &+ \frac{\partial Y_k}{\partial Z} \left[\rho \times \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho \times u_i \times \frac{\partial Z}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \times D \times \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right) \right] - \rho \times D \times \left(\frac{\partial Z}{\partial x_i} \right)^2 \times \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} = \dot{\omega}_k \end{aligned} \quad (4)$$

Les termes entre crochets sont nuls par continuité et par conservation de Z . Pour plus de simplifications, on peut supposer que:

- Le gradient normal à la surface de la flamme est plus important que ceux dans la direction tangentielle,
- La flammelette est relativement mince dans le sens perpendiculaire à la surface de la flamme.

Cela veut dire que:

$$\frac{\partial^2}{\partial Z^2} \gg \frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} \quad (i = 2, 3)$$

Finalement, on obtient:

$$\left(\frac{\partial Y_k}{\partial \tau} - \frac{\chi}{2} \times \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} \right) = \frac{\dot{\omega}_k}{\rho \times C_p} \quad (5)$$

avec $\chi = 2D \times \left(\frac{\partial Z}{\partial x_1} \right)^2$ est le taux de dissipation scalaire en (1/sec)

Pour l'équation de l'énergie, on applique le même changement avec les mêmes hypothèses, on aura:

$$\rho \times \frac{\partial T}{\partial t} = \rho \times \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{1}{C_p} \times \sum_k \dot{\omega}_k \times H_k + \frac{1}{2C_p} \times \rho \times \chi \times \left(\frac{\partial C_p}{\partial Z} + \sum_k C_{p_k} \times \frac{\partial Y_k}{\partial Z} \right) \frac{\partial T}{\partial Z} \quad (6)$$

Où H_k est l'enthalpie spécifique de l'espèce k .

Le taux de dissipation scalaire est donné en fonction de Z pour une flamme à jets opposé par [10] :

$$\chi(Z) = \frac{3a_s}{4\pi} \times \frac{\sqrt{\rho_\infty / \rho + 1}}{2\sqrt{\rho_\infty / \rho + 1}} \times \exp \left[-2 \times (\operatorname{erfc}^{-1}(2Z))^2 \right] \quad (7)$$

ρ_∞ est la densité du flux de l'oxydant et a_s est le taux d'étirement. Dans la direction x par exemple, $a_s = \partial u / \partial x \equiv (1/\text{sec})$.

La résolution de ces équations pour un mécanisme réactionnel donne la structure de la flamme laminaire de diffusion dite aussi flammelette.

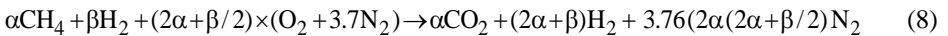
3. CALCUL NUMERIQUE ET RESULTATS

Les équations (5) et (6) sont à résoudre. La variable indépendante est la fraction du mélange Z qui varie de 0 dans l'oxydant à 1 dans le fuel. Le taux de dissipation scalaire χ est un paramètre qui varie de 0 à l'état d'équilibre à χ_q correspondant à l'extinction de la flamme. Reste à prescrire les fractions molaires ou massiques des espèces à l'entrée, la température des jets et la pression.

Dans ce travail, on a considéré l'effet de l'ajout d'hydrogène sur la flamme de diffusion du méthane sous différentes pressions.

Pour la cinétique chimique, on a adopté le mécanisme réactionnel Grimech 3.0 qui est formé par 53 espèces et 325 réactions élémentaires. Ce dernier n'est validé que pour des pressions allant jusqu'à 10 atm. On a fait le calcul pour les pressions 1, 3, 5, 8 et 10 atm.

Pour calculer les différentes fractions massiques à l'entrée, il est indispensable d'écrire la réaction globale suivante:



Les nombres de moles, les fractions massiques, le rapport stoechiométrique s , Z_{st} , ainsi que les températures adiabatiques sont données par le **Tableau** ci-dessous:

N_{CH_4} $=\alpha$	1.000	0.950	0.900	0.850	0.800	0.750	0.700	0.650	0.600	0.550	0.500
N_{H_2} $=\beta$	0.000	0.050	0.100	0.150	0.200	0.250	0.300	0.350	0.400	0.450	0.500
N_{O_2} $=2\alpha+\beta/2$	2.000	1.925	1.850	1.775	1.700	1.625	1.550	1.475	1.400	1.325	1.250
Y_{CH_4}	1.000	0.993	0.986	0.978	0.970	0.960	0.949	0.937	0.923	0.907	0.889
Y_{H_2}	0.000	0.007	0.014	0.022	0.030	0.040	0.051	0.063	0.077	0.093	0.111
Y_{O_2}	0.233	0.233	0.233	0.233	0.233	0.233	0.233	0.233	0.233	0.233	0.233
S	4.000	4.026	4.055	4.086	4.121	4.160	4.203	4.252	4.308	4.371	4.400
Z_{st}	0.55	0.55	0.054	0.54	0.54	0.053	0.53	0.052	0.051	0.051	0.050
T_{ad} (1atm)	2225	2228	2230	2233	2235	2239	2242	2245	2249	2254	2258
T_{ad} (10atm)	2268	2271	2273	2276	2279	2283	2286	2290	2295	2300	2305

On a représenté deux séries de courbes. La première série concerne la variation des fractions massiques et de la température en fonction des différents paramètres. La seconde série représente la variation des maximums des fractions massiques et températures.

3.1 Variation des fractions massiques et de la température

La première série de courbes montrent l'évolution de la température et quelques espèces en fonction de :

1. La fraction de mélange Z qui varie de 0 dans le fuel à 1 dans le comburant.
2. Pour le taux de dissipation scalaire χ , on a pris quatre valeurs, la première $\chi = 0.1$ représente un état très proche de l'équilibre chimique ($\chi_{eq} = 0$), les deux autres sont des valeurs intermédiaires et la dernière χ_q correspond à l'extinction de la flamme.
3. La fraction du méthane remplacée par l'hydrogène, elle varie de 0% à 20% en volume.
4. La pression, on a pris les valeurs 1 et 10 atm.

Les courbes montrées sur la figure 2 donnent l'évolution de la température, on voit que les variations les plus importantes se passent autour du point Z_{st} qui représente le front de la flamme laminaire. La température atteint son maximum permis par la thermodynamique en ce point puis chute de part et d'autre vers la température du fuel et de l'oxydant.

Si on compare les températures pour différentes pressions, on remarque qu'elles varient de façon proportionnelle. Ceci est dû à l'effet de compression qui ne fait qu'augmenter la température.

Par contre, la variation de la température est inversement proportionnelle à celle du taux de dissipation scalaire (ou bien de la vitesse du jet). En augmentant la vitesse, le temps de la diffusion thermique diminue, cela provoque la chute de la température jusqu'aux valeurs d'extinction.

Le remplacement d'une fraction de méthane par l'hydrogène dans notre cas fait augmenter la température car le pouvoir calorifique de ce dernier est nettement plus important que celui du méthane.

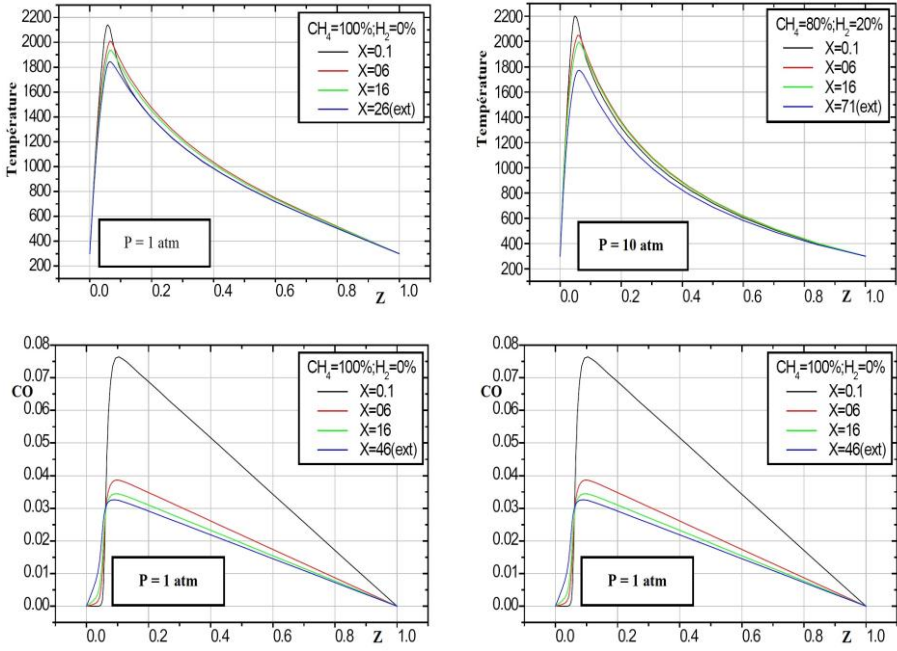


Fig. 2: Evolution de la température

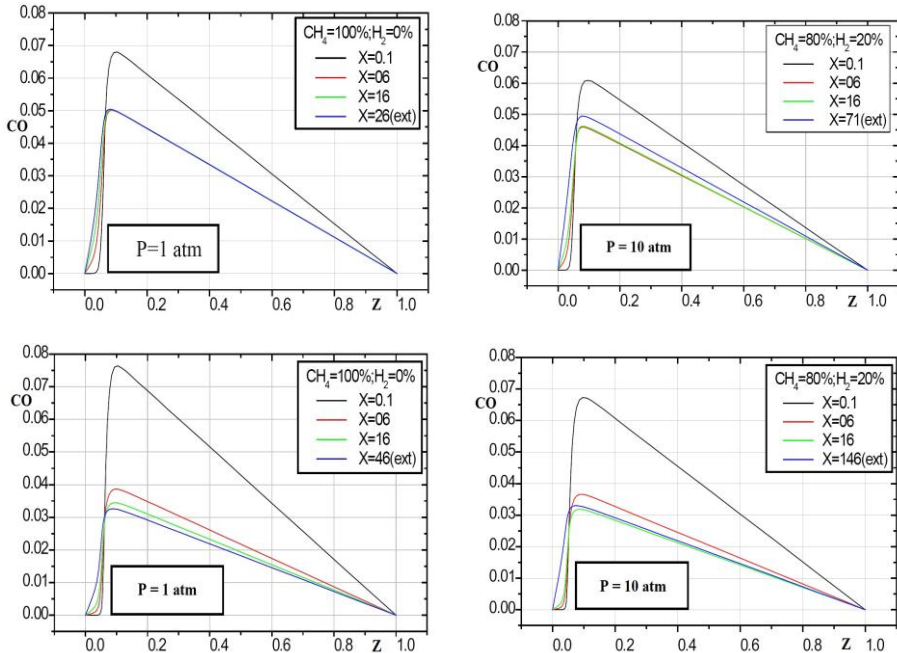


Fig. 3: Evolution de la fraction massique de CO

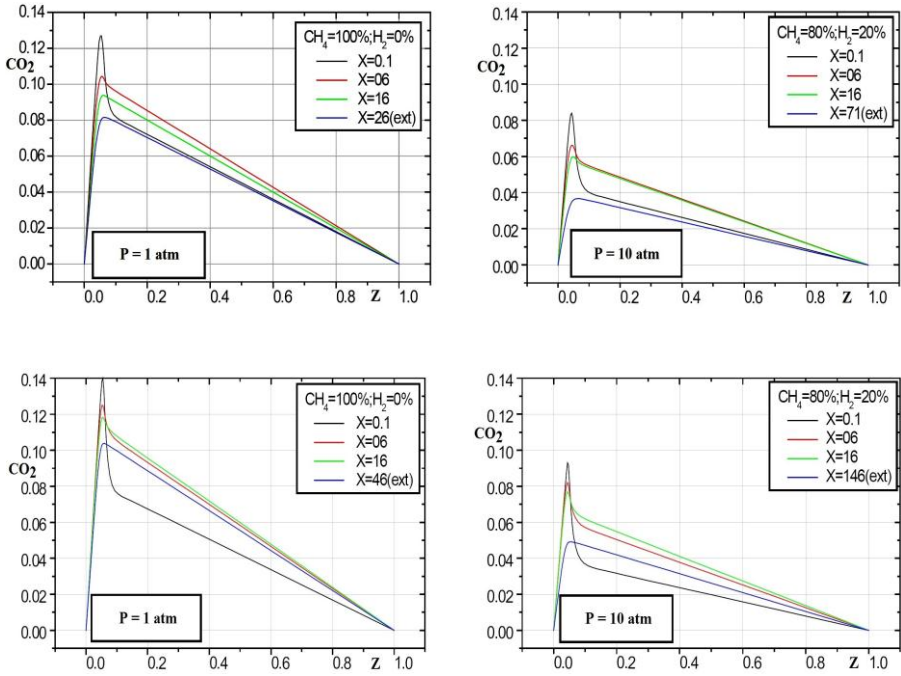
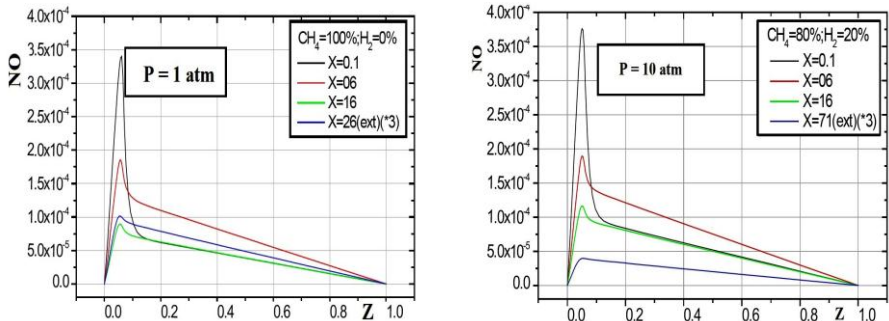


Fig. 4: Evolution de la fraction massique de CO₂

La figure 3 montre que la variation du CO n'est pas significative par rapport au dopage et à la vitesse du jet, cependant elle montre une légère diminution en fonction de la pression.

Inversement au CO, le CO₂ (Fig. 4) diminue, lorsqu'on dope le mélange par l'hydrogène ou on augmente le taux de dissipation scalaire (vitesse du jet). Le CO₂ reste constant par rapport à la variation de la pression.

Finalement, le NO thermique est produit car la température est supérieure à 1750 K (limite de température où commence la production du NO). La production est maximale à Z_{st} où la température est maximale (Fig. 5).



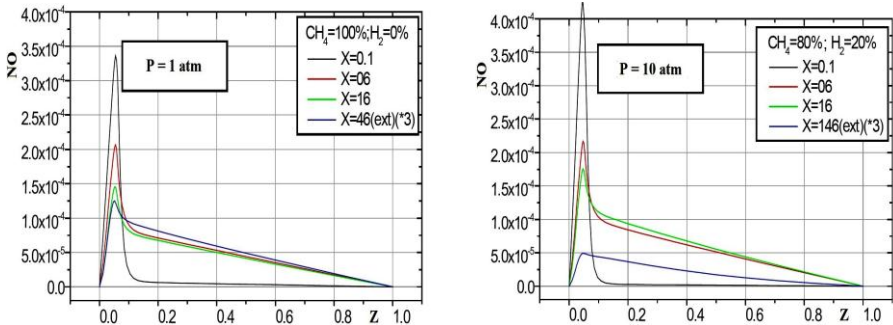


Fig. 5: Evolution de la fraction massique de NO

3.2 Variation des maximums des fractions massiques et la température

On a remarqué que les variations les plus importantes se font autour de Z_{st} , c'est-à-dire aux maximums des variables. Nous avons tracé les courbes suivantes pour élucider le phénomène dans ces régions.

La variation de la température maximale en fonction de la pression pour divers taux de dopage par l'hydrogène et pour un taux de dissipation scalaire fixe $\chi = 16(1/s)$ est montrée par la figure 6.

On note que la température maximale (adiabatique dans ce cas) augmente en fonction de la pression et du dopage entre 1935 K et 2200 K. Cette variation est importante, elle montre que l'effet de la pression dans ce cas est plus important que l'ajout de l'hydrogène.

L'augmentation due à la pression est de l'ordre de 200 K par contre, elle est de l'ordre de 100 K pour un taux de dopage maximal.

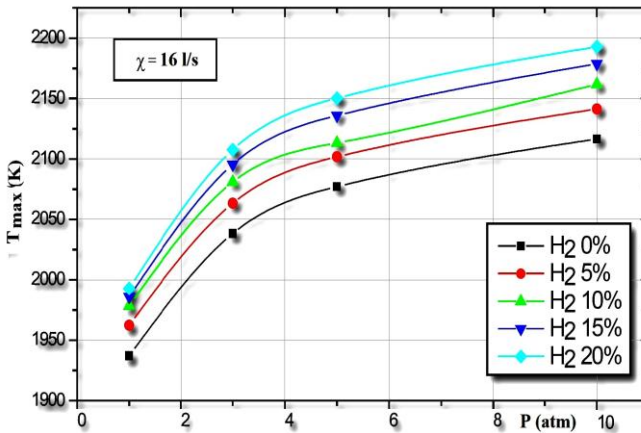


Fig. 6: Evolution de la température maximale

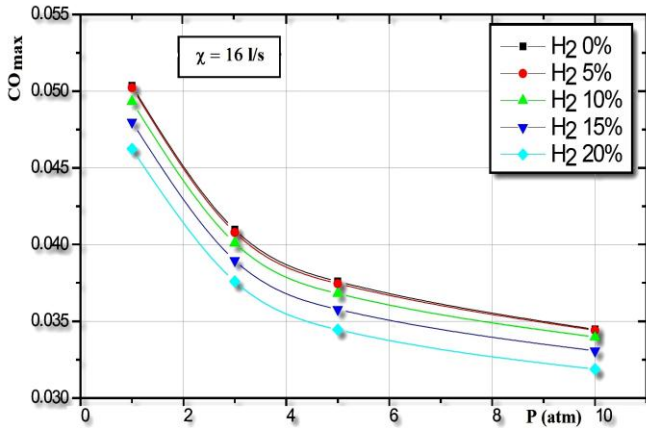


Fig. 7: Evolution de la fraction maximale du CO

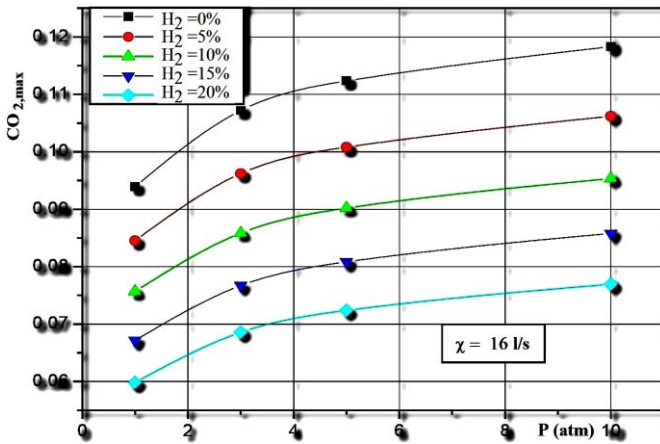


Fig. 8: Evolution de la fraction maximale du CO_2

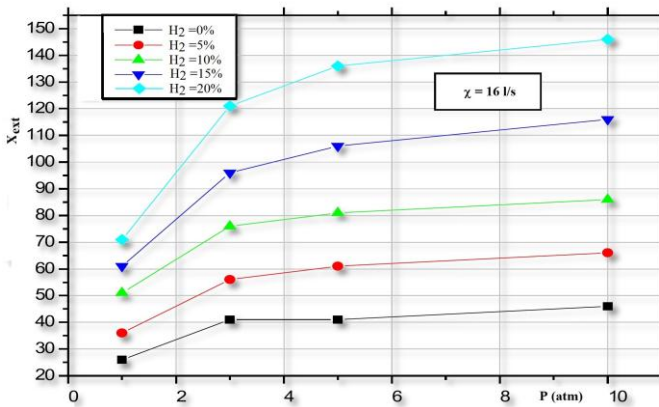


Fig. 9: Evolution de la limite d'extinction de la flamme

Pour un taux de dissipation moyen de $\chi = 16(1/s)$, les courbes sur la figure 7 montrent une chute importante du CO en fonction de la pression et du taux de dopage, cependant la diminution due à la pression est plus importante (0.015) que celle du au dopage (0.005). Le facteur essentiel qui diminue la production du CO dans ce cas est l'augmentation de la pression.

La variation de la fraction massique maximale du CO₂ augmente en fonction de la pression et diminue pour l'augmentation du dopage. Pour $\chi = 16(1/s)$, l'écart en chute est de 0.035 pour un dopage de 20 % (Fig. 8).

Aussi on a trouvé que la variation de la fraction massique maximale du NO suit la même allure que celle des températures adiabatique. Ceci est logique, car les NO ne sont produit que pour les hautes températures.

L'augmentation de la pression et du taux de dopage augmentent les NO par contre l'augmentation de la vitesse des jets les diminuent. Pour le NO₂, il augmente avec la pression et diminue légèrement en fonction du dopage.

La courbe montrée sur la figure 9 est très intéressante. Elle montre l'effet du dopage et de la pression sur le taux de dissipation d'extinction de la flamme χ_q . Il est bien clair que χ_q augmente avec la pression et le dopage, cependant l'augmentation de ce dernier est plus importante lorsque on ajoute l'hydrogène. La valeur de χ_q passe de 25 à 150 (1/s) pour un dopage de 20 %. L'effet de la pression devient plus significatif en augmentant la quantité d'hydrogène.

4. CONCLUSION

En résumé, les résultats trouvés montrent que:

1. Le dopage avec l'hydrogène augmente la température adiabatique de la flamme au-dessus de 1750 K, ceci produit les NO_x et surtout ceux thermique. Aussi l'augmentation du taux de dissipation scalaire, et par conséquent la vitesse des jets, diminue la température car le temps de la diffusion diminue. Cela provoque la diminution des NO_x et a une certaine limite l'extinction de la flamme.

2. L'effet du dopage sur le CO n'est pas significatif par rapport à celui de la pression, on a vu que la fraction massique diminue remarquablement avec l'augmentation de la pression. Pour le CO₂, sa fraction massique augmente avec la pression et diminue par l'ajout de l'hydrogène.

3. Finalement on a pu monter, comme dans les flammes de prémélange [11], que l'ajout de l'hydrogène permet d'augmenter la résistance de la flamme à l'extinction. En effet l'hydrogène est un gaz très réactif, une fois mélangé avec le méthane, la réactivité du mélange augmente et par conséquent la résistance de la flamme à l'étirement et à l'extinction. De cette façon, on peut augmenter la vitesse des jets pour diminuer la température de la flamme et peut être éliminé les NO_x.

REFERENCES

- [1] T. Leung and I. Wierzb, 'The Effect of Hydrogen Addition on Biogas Non-Premixed Jet Flame Stability in a Co-Flowing Air Stream', International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 33, N°14, pp. 3856 – 3862, 2008.

- [2] G. Yu, C.K. Law and C.K. Wu, '*Laminar Flame Speeds of Hydrogen Addition*', *Combustion and Flames*, Vol. 63, N°3, pp. 339 – 347, 1986.
- [3] F. Halter, '*Caractérisation des Effets de l' Ajout d'Hydrogène et de la Haute Pression dans les Flamme Turbulentes de Prémélange Méthane/Air*', Thèse de doctorat, Université d'Orléans, France, 2005.
- [4] E.R. Hawkes and J.H. Chen, '*Direct Numerical Simulation of Hydrogen-Enriched Lean Premixed Methane-Air Flames*', *Combustion and Flame*, Vol. 138, N°3, pp. 242 – 258, 2004.
- [5] S. Jahangirian, C.S. McEnally and A. Gomez, '*Experimental Study of Ethylene Counter flow Diffusion Flames Perturbed by Trace Amounts of Jet Fuel and Jet Fuel Surrogates Under Incipiently Soothing Conditions*', *Combustion and Flame*, Vol. 156, N°9, pp. 1799 – 1809, 2009.
- [6] J.L. Gauducheau, B. Denet and G. Searby, '*A Numerical Study of Lean CH₄/H₂/Air Premixed Flames at High Pressure*', *Combustion Science and Technology*, Vol. 137, N°1-6, pp. 81 – 99, 1998.
- [7] A. Mameri, '*Etude Numérique de la Combustion Turbulente du Prémélange Pauvre Méthane/Air Enrichi à l'Hydrogène*', Thèse de Doctorat, université d'Orléans, France, 2009.
- [8] T. Poinso and D. Veynante, '*Theoretical and Numerical Combustion*', Edwards ed. 2001.
- [9] K.K. Kua, '*Principles of Combustion*', 2nd Ed. John Wiley & Sons, 810 p., 2005
- [10] N. Peters, '*Turbulent Combustion*', Cambridge University Press 2000
- [11] A. Mameri, I. Gökalp et D. Boukeffa, '*Simulation Numérique de la Stabilisation d'une Flamme Turbulente de Méthane en Régime Pauvre par Ajout d'Hydrogène*', *Revue des Energies Renouvelables*, Vol. 10, N°1, pp. 39 – 48, 2007.
- [12] Outil d'Aide, '*Gri-Mech 3*', www.me.berkeley.edu/gri_mech/