

Impact de l'étirement sur la structure thermochimique d'une flamme de diffusion d'un biogaz hydrogéné en régime sans flamme

A. Hadeif¹, A. Mameri¹, F. Tabet² and Z. Aouachria³

1 Faculté des Sciences et Sciences Appliquées, Université d'Oum El Bouaghi, 04000 Algérie

2 DBFZ, Torgauer Straße 116, D-04347 Leipzig, Germany

3 Laboratoire de Physique Énergétique Appliquée, Université de Batna 1, 05000 Algérie

(reçu le 10 Juillet 2016 – acceptée le 29 Septembre 2016)

Résumé - Le présent papier consiste à une analyse numérique de la production des émissions polluantes d'une flamme de diffusion laminaire à contre courant d'un mélange biogaz/Hydrogène-air dans un régime de combustion sans flammes. Une attention particulière est portée à l'impact du taux d'étirement sur la structure thermochimique de la flamme, de l'allumage à l'extinction. Il est aussi montré, que le CO₂ contenu dans le biogaz joue un rôle important sur la température et les espèces majoritaires, par le biais de l'insertion d'une espèce inerte F-CO₂ dans le mécanisme réactionnel, qui a les mêmes propriétés thermodynamiques que le CO₂ mais ne participe pas aux réactions chimiques.

Abstract - The present paper consists in a numerical analysis of the production of polluting emissions by a laminar diffusion flame with a counter current made up of a mixture of biogas/hydrogen-air in a flameless combustion regime. A particular attention was given to the impact of the stretching rate on the thermo chemical structure of the flame, and on ignition and extinction. It was also shown that the CO₂ present in the biogas played an important role on temperature and the main components by inserting an inert species F-CO₂ in the reaction mechanism. It has the same thermodynamic properties as CO₂ but isn't involved in any chemical reaction.

Mots clés: Jet opposé - Combustion sans flamme - Taux d'étirement et effet chimique.

1. INTRODUCTION

Dans le but d'améliorer le rendement énergétique des installations, il est courant de transférer la chaleur des gaz brûlés aux gaz frais, c'est le principe d'un brûleur dit régénératif. Cependant, l'augmentation de la température des réactifs a un effet majeur sur la formation des oxydes d'azote. Pour pallier cet inconvénient avec succès, de nouvelles technologies ont été élaborées. Parmi ces technologies, on peut notamment citer la méthode, qui vise à réduire les émissions de NO_x en limitant les temps de séjour aux températures maximales ou en favorisant une recombinaison des oxydes d'azote par des radicaux hydrocarburés dite d'étagement de combustion.

D'autres méthodes se basent sur l'injection d'espèces chimiques particulières dans les produits de combustion pour entraîner des réactions de réduction des oxydes d'azote, comme la Réduction Sélective Non Catalytique (SNCR).

Malgré la large palette de technologie à disposition de l'industrie pour réduire les émissions polluantes, la plupart de ces méthodes entraînent des coûts d'utilisation de mise en place non négligeables ou peut aussi se faire au détriment du rendement global des configurations. Un nouveau régime de combustion est apparu en Allemagne et breveté en 1989 sous l'acronyme FLOX (Flameless Oxydation) [1]. Il est défini comme un régime de combustion pour lequel aucune flamme n'est visible à l'œil nu, stable, à gradients de température très faibles et émettant très peu de polluants (CO et NO).

La condition fondamentale pour l'obtention du régime FLOX est de diluer les jets de combustible et/ou de comburant avec une forte recirculation de gaz brûlés avant réaction avec un apport du taux d'oxygène très faible [2]. La combustion sans flammes

est maintenant reconnue comme l'une des techniques de combustion parmi les plus avancées pour la réduction de la formation des polluants, tels que le monoxyde de carbone, les oxydes d'azote NO_x, le dioxyde de carbone, les particules non brûlés et la suie qui sont des polluants primaires [3]. Lors de la combustion, le carbone du combustible est transformé par une succession de réactions chimiques en CO₂ et en CO; par contre les NO_x sont produit lorsque la température de combustion dépasse 1400 °C.

Dans ce travail, nous avons considéré une flamme de diffusion en jets opposés de biogaz dopé à l'hydrogène dans le régime de combustion sans flammes, avec un taux d'étirement variable, de l'allumage à l'extinction et son impact sur la température et les espèces polluantes [5], ainsi que l'effet chimique du CO₂, tout en introduisant une espèce inerte F_CO₂ dans le mécanisme réactionnel, qui a les mêmes propriétés thermodynamiques du CO₂, mais qui ne participe pas aux réactions chimiques [6].

2. CONFIGURATION ET STRATEGIE DE CALCUL

La configuration à deux jets opposés est adoptée, le premier jet est constitué de combustible, le deuxième de comburant. Cette géométrie facilite l'étude de la structure de flamme laminaire, puisqu'elle permet une simplification importante des équations de l'écoulement. Dans une telle configuration, les deux jets sont en impact l'un vers l'autre ce qui rend l'écoulement stationnaire et où l'effet de la direction perpendiculaire au jet (direction x, figure 1) peut être négligeable par rapport à celui de la direction qui lui est parallèle (direction r).

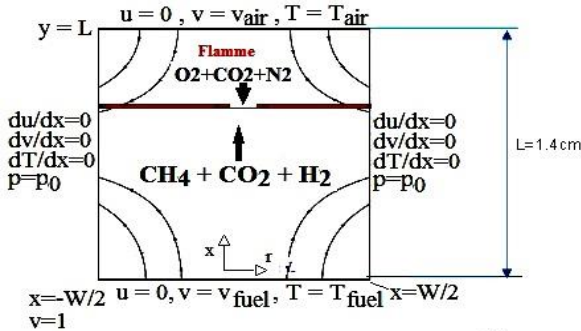


Fig. 1: Géométrie et conditions aux limites en jets-opposés

Le programme Chemkin [7] est utilisé pour la résolution des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, d'énergie et d'espèce {(Eqs. 1-3)}.

$$H - 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{FG}{\rho} \right) + \frac{3G^2}{\rho} + \frac{d}{dx} \left(\mu \frac{d}{dx} \left(\frac{G}{\rho} \right) \right) = 0 \quad (1)$$

$$\rho u \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} (\rho Y_k V_k) - \dot{\omega}_k W_k \quad k = 1, \dots, K \quad (2)$$

$$\rho u \frac{dT}{dx} - \frac{1}{C_p} \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) + \frac{\rho}{C_p} \sum_k C_p V_k Y_k \frac{dT}{dx} + \frac{1}{C_p} \sum_k h_k \dot{\omega}_k - \frac{\dot{q}_r}{C_p} = 0 \quad (3)$$

Pour un écoulement axisymétrique en jets-opposés

$$H = \frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial r} = \text{Cte}, \quad F(x) = \frac{\rho u}{2}, \quad G(x) = \frac{dF(x)}{dx} \quad (4)$$

Les conditions aux limites pour le fuel (F) et l'oxydant (O) sont:

$$x = 0: F = \frac{\rho_F u_F}{2}, G=0, T = T_F, \rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_F \quad (5)$$

$$x = +L: F = \frac{\rho_0 u_0}{2}, G=0, T = T_0, \rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_0 \quad (5bis)$$

Au cours de la résolution du système d'équations linéaires, les hypothèses suivantes sont imposées:

La diffusion totale des espèces sera adoptée, chaque espèce aura sa propre vitesse de diffusion, ce qui implique que le nombre de Lewis sera différent de l'unité et variable [8].

$$L_e = \frac{\lambda}{\rho l C_p D} \neq 1 \quad (6)$$

Les pertes par rayonnement thermique des espèces CO_2 , H_2O , CO , et CH_4 , modélisés par un corps optique mince, sont pris en compte (figure 2) [9]

$$\dot{q} = -4\sigma K_P (T^4 - T_\infty^4) \quad (7)$$

$$K_P = \sum_{i=1}^4 P_i K_i \quad i = CO_2, H_2O, CO, CH_4 \quad (8)$$

Où $\sigma = 5.669 \times 10^8 \text{ W/m}^2\text{K}^4$, constante de Stefan-Boltzmann, T et T_∞ sont respectivement la température de la substance rayonnante et celle milieu ambiant, P_i pression partielle, K_i coefficient moyen d'absorption de l'espèce i .

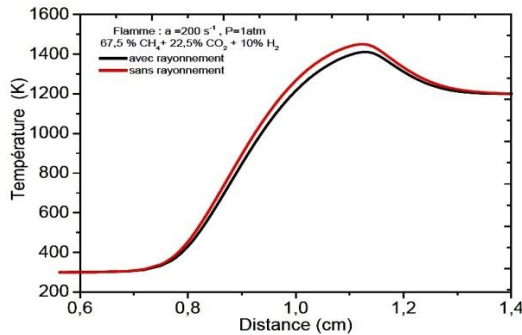


Fig. 2: Profil axial de température avec et sans rayonnement

Dans ce travail, on a considéré l'effet du taux d'étirement sur la température de la flamme et la formation des espèces polluantes lors d'une flamme de diffusion laminaire d'un biogaz (BG 75) hydrogéné, dans une configuration à jets opposés, sous la pression atmosphérique avec une distance entre les deux jets $L=1.3 \text{ cm}$ et un taux d'étirement variable de l'allumage ($a = 100 \text{ s}^{-1}$) à l'extinction ($a = 1710 \text{ s}^{-1}$) {(Eq. 8)} [10].

$$a = \frac{2(-v_0)}{L} \left(1 + \frac{v_F \rho_F}{-v_0 \rho_0} \right) \quad (9)$$

Avec $v_0=v_F$, v_0 , v_F , ρ_0 et ρ_F , sont respectivement la vitesse de l'oxydant, du fuel, la masse volumique de l'oxydant et du fuel (**Table 1**). Pour assurer le régime de combustion sans flammes, il faut que le combustible et le carburant coexistent ensemble avant le processus de combustion [11] avec une température d'oxydant de 1200 K

(Table 2) et la concentration de l'oxygène dans le comburant est de 4 % et 8 % en volume (figure 3). Pour la cinétique chimique, le mécanisme réactionnel Grimech 3.0 [12] qui est formé par 53 espèces et 325 réactions élémentaires est adopté.

Table 1: Composition du combustible

Désignation	Valeur
CH ₄	0.675 %
CO ₂	0.225 %
H ₂	0.10 %
T _F	300 K
P	1 atm
ρ _F	0.85 kg/m ³

Table 2: Composition de l'air

Désignation	Valeur
O ₂	0.04 %
N ₂	0.79 %
CO ₂	0.17 %
T _O	1200 K
P	1 atm
ρ _O	0.31 kg/m ³

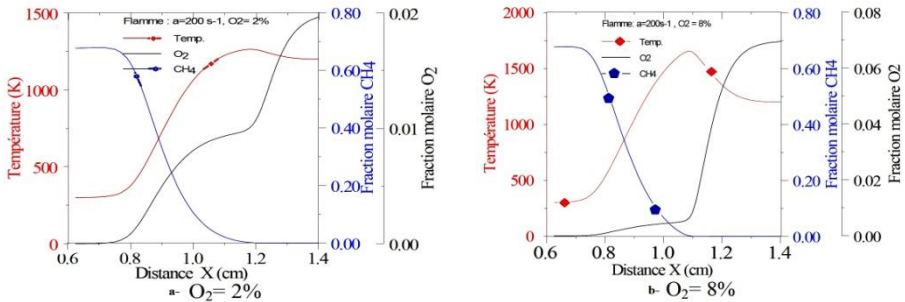


Fig. 3: Distributions axiales de température et fractions molaires de CH₄ et O₂

3. RESULTATS ET DISCUSSION

3.1 Validation de la procédure de calcul

La configuration en jets opposés a été employée dans plusieurs études impliquant différents carburants et oxydants [6, 13, 14] où il a été mentionné que cette configuration simplifie les équations qui caractérisent la structure de la flamme. Puisque les mesures n'existent pas actuellement pour le biogaz dans la combustion sans flammes dans cette configuration, on se base sur la configuration investie par Sung *et al.* [15] qui utilise le méthane comme carburant avec une combustion conventionnelle. Le dispositif expérimental est constitué par deux brûleurs convergents à bec de diamètre de sortie de 14 mm; distant de 14 mm. Les brûleurs sont alimentés avec de l'oxydant qui contient 23 % d'oxygène et 77 % d'azote et de combustible qui est composé par un volume de méthane de 23 % et 77 % d'azote. La pression ambiante est de un atmosphère et la vitesse moyenne aux becs est constante et égale $v = 25.5 \text{ cm/s}$, correspondant à un taux d'éirement de $a = 42 \text{ s}^{-1}$. La figure 4 présente une comparaison entre un calcul par Chemkin et les expériences de la température et des espèces importantes (CH₄, O₂,

H₂O, CO₂ et CO). La bonne concordance est montrée pour la structure de cette flamme, en outre, la température maximale de flamme est calculée avec précision qui montre que les pertes de chaleur par rayonnement sont prises en considération et sont bien modélisées.

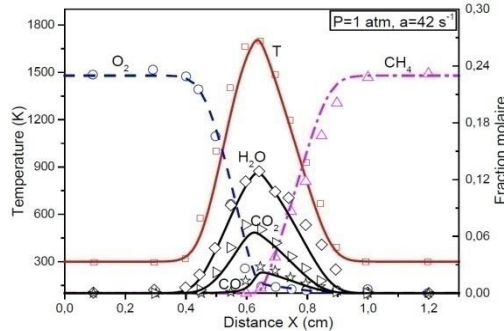


Fig. 4: Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées: la température et les profils importants d'espèces; (les symboles représentent des résultats expérimentaux)

3.2 Profil de température et des espèces suivant différent pourcentage d'oxygène

La structure de la flamme est présentée par les distributions de la température de combustion (figure 5-a-), les fractions molaires des espèces majoritaires (figures 5-b-, 6-c- et 6-d-) où la pression est maintenue constante et égale à un atmosphère, selon les résultats, le maximum de température et des espèces majoritaires sont centrés à proximité de $x = 1.18$ cm, c'est la position du front de flamme. La position de ce front de flamme se déplace de 1.18 cm à 1.08 cm et la température passe de 1270 °C à 1730 °C avec l'augmentation du dosage en O₂ de 2 % à 8 %.

Il est clair que la réduction de l'oxygène dans l'oxydant réduit la température de la combustion et les maximums des profils de température s'éloignent de moins en moins de l'oxydant, pour optimiser son efficacité énergétique et sa cinétique. Cette diminution engendre une réduction significative des autres espèces comme le OH, le CO et le NO ayant le comportement similaire de celui de la température de la flamme (Figures 5-b-, 5-c-, 5-d-).

3.3 Effet du taux d'étirement sur le profil de température dans un régime sans flamme

Le profil de température, pour différents taux d'étirement, est représenté sur la figure 6. Le maximum de température augmente d'une valeur $T = 1327$ K de l'allumage d'un taux d'étirement $a = 100$ s⁻¹ à une valeur maximale $T = 1410$ K correspond à $a = 200$ s⁻¹; à partir de cette valeur, la surface de la flamme augmente pour engendrer une baisse température jusqu'à l'extinction avec une température $T = 1219$ K, avec un rétrécissement considérable de la zone de variation de température.

Si l'étirement est très grand, la flamme peut être soufflée et s'éteindre, donc le rayonnement peut modifier significativement la limite d'extinction [16]. A l'opposé, pour un faible étirement, la flamme s'épaissit, et les pertes d'énergie par transfert radiatif augmentent par rapport aux pertes par conduction et convection; c'est une extinction radiative.

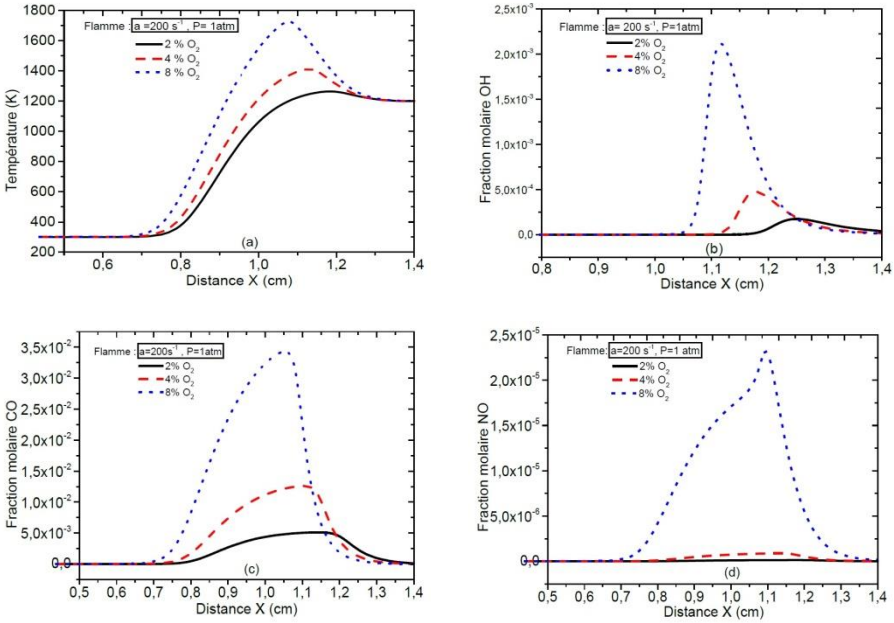


Fig. 5: Profils de température, major et mineur espèces

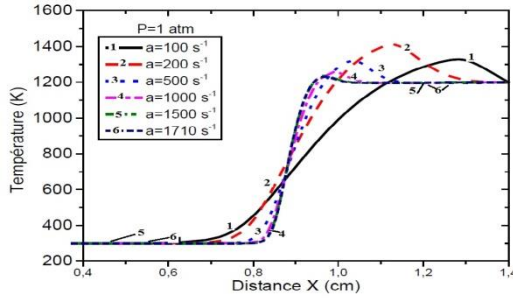


Fig. 6: Profils de température pour différents taux d'étirement

3.4 Effet du taux d'étirement sur le profil des espèces dans un régime sans flamme

La figure 7 représente la variation brusque de la fraction molaire du méthane, qui est due à la diffusion moléculaire, où l'augmentation de l'étirement rétrécit considérablement la zone de variation de la fraction molaire de CH₄.

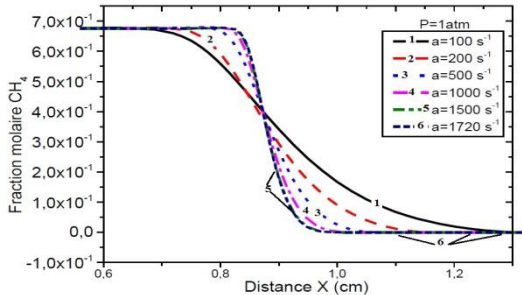


Fig. 7: Fraction molaire du méthane pour différents taux d'étirement

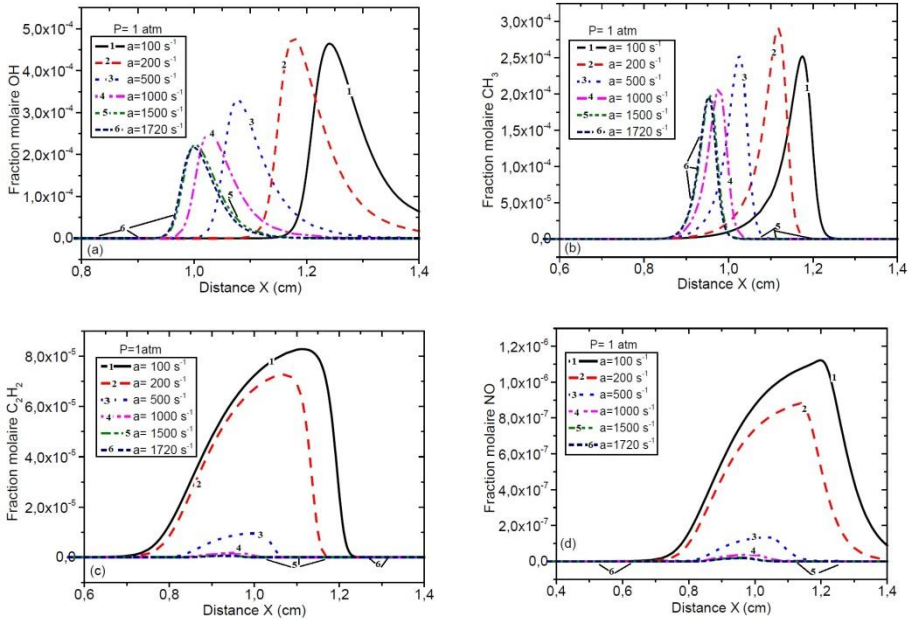


Fig. 8: Fraction molaire des espèces pour différents taux d'étiement

Les figures 8-a-, 8-b-, 8-c- et 8-d- présentent la fraction molaire des espèces minoritaires: OH, CH₃, C₂H₂ et NO. Elles apparaissent dans la zone de réaction à l'exception de C₂H₂ qui se forme loin de la zone de réaction. Elles se déplacent de moins en moins vers le carburant qui est évident, elles sont considérées comme des espèces intermédiaires. Leurs maximums augmentent d'une valeur de l'allumage d'un taux d'étiement $a = 100 \text{ s}^{-1}$ à une valeur maximale correspond à $a = 200 \text{ s}^{-1}$, puis se décroissent jusqu'à la limite d'extinction, avec un rétrécissement de la zone de variation des fractions de 0.25 cm à 0.12 cm.

3.5 Impact du taux d'étiement sur l'effet chimique du CO₂

L'effet chimique du CO₂ est étudié dans les figures 9, 10-a- et 10-b- à la pression atmosphérique à différents taux d'étiement, tout en introduisant une espèce inerte artificielle F, qui a des propriétés semblables (transport, rayonnement et thermo-chimique) que du CO₂.

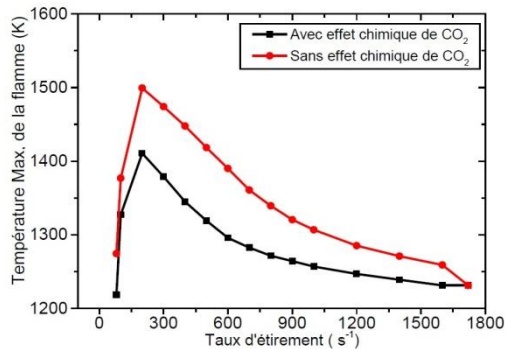


Fig. 9: Effet chimique du CO₂ sur la température pour différents taux d'étiement

L'effet chimique du CO_2 est proportionnel à la variation de température (figure 9). Il croît d'une manière progressive pour atteindre son maximum au taux d'étirement $a = 100 \text{ s}^{-1}$, et garde une valeur constante jusqu'à $a = 600 \text{ s}^{-1}$. Puis il continue à diminuer jusqu'à l'extinction où il devient nul, puisque les effets chimiques du CO_2 se propagent dans les voies de réaction par la réaction d'initiation: $\text{CO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{OH}$ [6] pour produire les précurseur de la combustion OH et CO qui ont un rôle important dans la combustion.

La figure 10-a- représente l'espèce C_2H_2 qui est le précurseur de production de suies. En outre, les radicaux OH et CO peuvent favoriser l'oxydation des suies et de réduire la formation de ces dernières [17, 20] suivant les réactions élémentaires, $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{H} + \text{HCCO}$ et $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{CH}_2$. L'espèce C_2H_2 est très affectée par l'effet chimique de CO_2 , sa réduction est de 80 % dans taux d'étirement de $a=200 \text{ s}^{-1}$. La voie de production de NO est thermique, donc une réduction importante de température favorise automatiquement sa réduction la réduction du NO de 80% pour $a = 200 \text{ s}^{-1}$ (figure 10-b-).

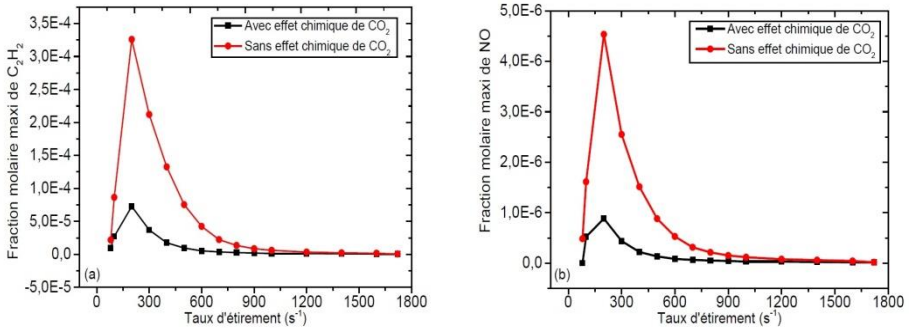


Fig. 10: Effet chimique du CO_2 sur les espèces pour différents taux d'étirement

4. CONCLUSION

Le taux d'étirement joue un rôle important dans les flammes de diffusion à contre courant, son augmentation engendre une élévation de température, jusqu'à une valeur maximale, pour notre cas $a = 100 \text{ s}^{-1}$, puis cette dernière démine à cause de l'augmentation de la surface de la flamme, où les pertes par rayonnement augmentent par rapport à la production par réaction jusqu'à l'extinction, en combinaison avec le régime sans flamme, on peut faire réduire les espèces polluantes, telles que le NO et C_2H_2 d'une manière importante, et d'un autre coté ce travail peut nous servir comme base d'étude de la combustion turbulente, en supposant que les plus petites échelles de longueurs caractéristiques de la turbulence sont beaucoup plus grandes que l'épaisseur d'un front de flamme laminaire.

REFERENCES

- [1] J. Wunning, '*Flammenlose Oxidation von Brennstoff mit Hochvorgewärmter Luft*', Chemie Ingenieur Technik, Vol. 63, pp. 1243 - 1245, 1991.
- [2] P.F. Li, M.I. Jian Chun, B.B. Dally, F.F. Wang, L. Wang, Z.H. Liu, S. Chen and C.G. Zheng, '*Progress and Recent Trend in Mild Combustion*', Science China Technological Sciences, Vol. 54, N°2, pp. 255 - 269, 2011.

- [3] M. Derudi, A. Villani and R. Rota, '*Sustainability of Mild Combustion of Hydrogen-Containing Hybrid Fuels*', Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 31, pp. 3393 - 3400, 2007.
- [4] A. Hadeif, N. Benaouda, A. Mameri, and Z. Aouachria, '*Effet de l'Addition d'H₂ et H₂O sur la Structure Interne et les Espèces Polluantes d'une Flamme de Diffusion Laminaire à Contre-Courant d'un Biogas*', International Symposium on Sustainable Hydrogen, ISSH, CDER 4-5 Octobre 2016 Alger-Algérie.
- [5] Z. Cheng, J.A. Wehrmeyer and R. Pitz, '*Experimental and Numerical Studies of Opposed Jet Oxygen-Enhanced Methane Diffusion Flames*', Combustion Science and Technologie, Vol. 178, N°12, pp. 2145 - 2163, 2006.
- [6] A. Mameri, and F. Tabet, '*Numerical Investigation of Counter-Flow Diffusion Flame of Biogase Hydrogen Blends: Effects of Biogas Composition, Hydrogen Enrichment and Scalar Dissipation Rate on Flame Structure and Emissions*', International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 41, N°3, pp. 2011 - 2022, 2016.
- [7] Chemkin-Pro 15131. *Reaction Design*: San Diego, 2013.
- [8] A. Mameri, F. Tabet, and A. Hadeif, '*Simulation of Biogas Counter Flow Diffusion Flame Under Serval Operation Condition of Composition and Pressure International*', Book of Procceding 12-15 November Conference on Sustainable Development, Belgrad, pp. 165 - 172, 2015.
- [9] W. Lin, L. Zhaohui, C. Sheng, Z. Chuguang and L. Jun, '*Physical and Chemical Effects of CO₂ and H₂O Additives on Counter-flow Diffusion Flame Burning Methane*', Energy & Fuels, Vol. 27, pp. 7602 - 7611, 2013.
- [10] J. Saeed, E. Abraham and I.S. Wichman, '*Thermal and Chemical Structure of Biogas Counter-flow Diffusion Flames*', Journal Energy & Fuels, Vol. 23, N°11, pp. 5312 - 5321, 2009.
- [11] C. Sheng and Z. Chuguang, '*Counter-flow Diffusion Flame of Hydrogen-Enriched Biogas Under MILD Oxy-Fuel Condition*', International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 36, N°23, pp. 15403 - 15413, 2011.
- [12] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, Jr.W.C. Gardiner, V.V. Lissianski and Z. Qin, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- [13] K. Safer, F. Tabet, A. Ouadha, M. Safer and I. Gökalp, '*Combustion Characteristics of Hydrogen-Rich Alternative Fuels in Counter-Flow Diffusion Flame Configuration*' Energy Conversion and Management, Vol. 74, pp. 269 - 278, 2013.
- [14] M. Safer, F. Tabet, A. Ouadha and K. Safer, '*A Numerical Investigation of Structure and Emissions of Oxygen-Enriched Syngas Flame in Counter-Flow Configuration*', International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 40, N°6, pp. 2890 - 2898, 2015.
- [15] C.J. Sung, J.B. Liu and C.K. Law, '*Structural Response of Counter-flow Diffusion Flames to Strain Rate Variations*', Combustion and Flame; Vol. 102, N°4, pp. 481 - 492, 1995.
- [16] B.H. Chao and C.K. Law, '*Asymptotic Theory of Flame Extinction with Surface Radiation*', Combustion and Flame, Vol. 92, N°1-2, pp. 1 - 24, 1993.

- [17] F. Liu, H. Guo, G.J. Smallwood, and O.L. Gülder, '*The Chemical Effects of Carbon Dioxide as an Additive in an Ethylene Diffusion Flame: Implications for Soot and NO_x Formation*', *Combustion and Flame*, Vol. 125, N°1, pp. 778 - 787, 2001.
- [18] M.P. Ruiz, A. Callejas, A. Millera, M.U. Alzueta and R. Bilbao, '*Soot Formation from C₂H₂ and C₂H₄ Pyrolysis at Different Temperatures*', *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, Vol. 79, N°1-2, pp. 244 - 251, 2007.
- [19] V. Chernov, M.J. Thomson, S.B. Dworkin, N.A. Slavinskaya and U. Riedel, '*Soot Formation with C1 And C2 Fuels Using an Improved Chemical Mechanism for PAH Growth*', *Combustion and Flame*, Vol. 161, N°2, pp. 592 - 601, 2014.
- [20] D. Liu, J. Santner, C. Togbé, D. Felsmann, J. Koppmann, A. Lackner, X. Yang, X. Shen, Y. Ju and K. Kohse-Höinghaus, '*Flame Structure and Kinetic Studies of Carbon Dioxide-Diluted Dimethyl Ether Flames at Reduced and Elevated Pressures*', *Combustion and Flame*, Vol. 160, N°12, pp. 2654 - 2668, 2013.