

# Simulation aux grandes échelles de la combustion diluée dans un four de 30 kW

## Large Eddy Simulation of MILD combustion in a 30 kW furnace

Marie CORDIER<sup>1\*</sup>, Alessio PAPPA<sup>1</sup>, Pierre BÉNARD<sup>2</sup>, Paul LYBAERT<sup>1</sup>, Véronique FELDHEIM<sup>1</sup>, Laurent BRICTEUX<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Université de Mons, Faculté Polytechnique, Département Mécanique  
56, rue de l'Épargne – B7000 Mons, Belgique.

<sup>2</sup> 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 est un régime de combustion qui permet de réduire significativement les émissions d'oxydes d'azote et est donc de plus en plus utilisée dans les fours industriels et systèmes thermiques fonctionnant avec de l'air préchauffé. Ce mode de combustion pose cependant des problèmes de simulation particuliers liés à la modélisation de l'interaction chimie-turbulence. L'objectif de ce travail est d'utiliser la simulation aux grandes échelles et de valider cette approche à l'aide de résultats expérimentaux obtenus sur un four de laboratoire de 30 kW.

**Mots-clés** : Combustion diluée ; Combustion sans flamme ; Simulation aux grandes échelles ; Fours industriels ; Interaction chimie-turbulence.

**Abstract** - The diluted combustion, also called MILD combustion, is a combustion mode that allows to reduce the nitrogen oxides emissions significantly and is thus more and more used in industrial furnaces and in thermal devices operating using preheated air. However, this combustion mode leads to specific numerical problems linked to the modeling of the turbulence-chemistry interaction. This work aims to perform Large Eddy Simulation and to assess this approach using experimental data taken on a 30kW lab-scale furnace.

**Keywords**: MILD combustion; Flameless combustion; Large Eddy Simulation; Industrial furnaces; Turbulence-chemistry interaction.

### Nomenclature

$a$    taux d'étirement,  $s^{-1}$   
 $Da$    nombre de Damköhler  
 $q$    débit massique, kg/s  
 $Re$    nombre de Reynolds  
 $T$    température, K  
 $U$    vitesse, m/s

$Y$    fraction massique  
 $Z$    fraction de mélange  
*Symboles grecs*  
 $\Delta$    taille caractéristique des mailles, m  
 $\nu$    viscosité cinématique,  $m^2/s$

## 1. Introduction

La combustion diluée, aussi appelée combustion MILD (Moderate or Intense Low-oxygen Dilution) ou combustion sans flamme, apparaît en effectuant une importante recirculation des fumées [1, 2]. Les réactifs sont ainsi dilués avec les produits de combustion, ce qui conduit à des concentrations locales en réactifs et par conséquent, à des dégagements de chaleurs locaux plus faibles qu'en combustion classique. La température est plus uniforme dans la chambre de combustion et la production de  $NO_x$  thermique est largement réduite.

La simulation numérique de combustion turbulente dans des chambres de combustion est très complexe car elle fait intervenir plusieurs phénomènes : turbulence, chimie et rayonnement. De plus, les réactions en combustion diluée sont lentes, menant à des temps caractéristiques pour le mélange  $t_{\text{mix}}$  et pour la chimie  $t_{\text{ch}}$  du même ordre de grandeur  $Da = t_{\text{mix}}/t_{\text{ch}} \approx 1$ , où  $Da$  est le nombre de Damköhler. Un  $Da$  proche de l'unité, comme c'est le cas en combustion diluée, signifie que la turbulence a une forte influence sur la chimie et réciproquement. On parle d'interaction chimie-turbulence (TCI - Turbulence-Chemistry Interaction). Jusqu'à présent, la finesse des maillages utilisés ne permet pas de résoudre directement ces phénomènes. Des modèles sont donc généralement utilisés pour compenser la partie non résolue de l'écoulement, de la combustion et du rayonnement. En ce qui concerne l'écoulement, plusieurs niveaux de modélisation de la turbulence existent. La modélisation RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) ne tient pas compte du caractère instationnaire de l'écoulement et modélise l'effet de toutes les échelles de turbulence. Entre la simulation directe des équations de Navier-Stokes (DNS) et la modélisation RANS, il existe un intermédiaire qu'est la simulation aux grandes échelles (LES – Large Eddy Simulation). En LES, le maillage permet de résoudre les plus grandes échelles de la turbulence et un modèle de sous-maille modélise l'effet des petites échelles.

La littérature montre que, jusqu'à présent, la modélisation RANS a principalement été utilisée pour la simulation numérique de fours industriels [3, 4, 5, 6]. Elle a permis de mieux comprendre le fonctionnement de la combustion diluée mais présente certaines limitations quant à la prédiction de la forme et de la localisation de la zone réactionnelle ainsi qu'à l'obtention de niveaux de température corrects [3]. De plus, la nécessité d'utiliser un modèle d'interaction chimie-turbulence (modèle TCI), tels que les modèles "Eddy Dissipation Concept" [7] ou "Partially Stirred Reactor" [8], a largement été prouvée dans le cadre des simulations RANS [9, 10, 11]. Ces modèles font intervenir des coefficients, menant à des incertitudes de modélisation. Par ailleurs, l'augmentation constante des ressources de calcul a permis le développement de l'utilisation de la LES. Cependant, la plupart des études LES en combustion diluée ont été réalisées sur des cas académiques, tels que les "Jet-in-hot-Coflow" [12, 13, 14]. Pour cette raison, nous proposons, dans cette étude, de passer d'une modélisation RANS à une approche LES pour la simulation d'une configuration plus réaliste, où la dilution des réactifs est réalisée par une recirculation interne des fumées, et d'étudier l'amélioration des résultats numériques. Cet article présente, dès lors, la méthodologie, les paramètres de la simulation LES et une comparaison avec les mesures expérimentales et des résultats RANS.

## 2. Méthodologie

### 2.1. Description du four

Le four étudié a une puissance nominale de 30kW et a été conçu pour pouvoir fonctionner en conditions diluées. Bien qu'il s'agisse d'un four de laboratoire, cette configuration permet de contrôler les conditions opératoires du système (présence d'une charge, et préchauffage de l'air) et d'observer une importante recirculation interne des fumées, de la même manière que pour les fours industriels fonctionnant en combustion diluée. La chambre de combustion a une hauteur d'un mètre et une base à section carrée ( $0.35^2 \text{ m}^2$ ). Le brûleur est constitué de trois injections : une injection d'air, placée au centre de la base, et deux injections de combustible, situées dans un même plan de part et d'autre de l'injection d'air (Figure 1). Les injections de combustible sont inclinées d'un angle de  $11^\circ$  vers le jet d'air. L'air est préchauffé électriquement. La charge de ce four de laboratoire est matérialisée par quatre tubes en acier dans lesquels circule de l'eau et dont l'immersion dans le four est ajustable (0 à 0.9 m). Les fumées sont évacuées au travers

de 12 trous placés à une hauteur de 0.9 m sur les parois latérales. Les conditions opératoires que nous avons choisi de simuler dans cette étude correspondent à une campagne de mesures réalisées par Lupant [3], en utilisant du gaz naturel comme combustible et avec un excès d'air  $E = 10\%$  (Tableau 1). Les cartes de température ont été mesurées grâce à un pyromètre à aspiration et les cartes d'espèces grâce à une sonde d'analyse refroidie.

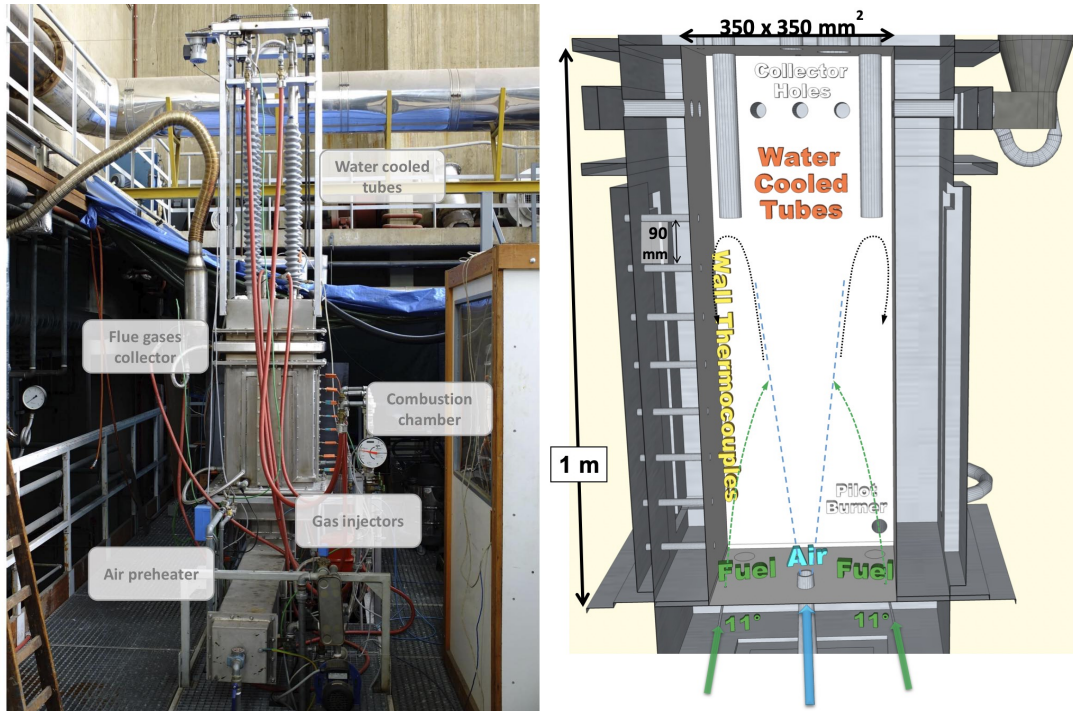


Figure 1 : Photo et schéma illustrant le four étudié [3].

	Débit	Vitesse	Température	Diamètre	Nombre de Reynolds
	$\text{Nm}^3 \cdot \text{h}^{-1}$	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	K	m	/
Air	34.6	78.16	1073	0.0248	14700
Combustible	3.13	77.90	296	0.0028	14050

Tableau 1 : Conditions opératoires étudiées, conditions d'entrée [3].

## 2.2. Choix du schéma réactionnel

Comme mentionné dans l'introduction, la cinétique chimique, et donc l'interaction chimie-turbulence, ne peuvent pas être négligées en simulation de combustion diluée. Dans cette étude, on fait l'hypothèse que le maillage LES utilisé est suffisamment fin pour résoudre directement cette interaction et la cinétique chimique est prise en compte en appliquant le modèle "Finite Rate Chemistry" (FRC) combiné à un mécanisme réactionnel détaillé.

Afin de choisir correctement le schéma cinétique à utiliser pour la simulation LES, une comparaison de différents mécanismes détaillés et réduits a été réalisée, en simulant une flamme de diffusion 1D contre-courant avec l'outil Cantera [15]. Les conditions aux limites de température et concentrations sont celles du four étudié (voir Tableau 1) et l'étirement  $a$  a été choisi en accord avec les résultats LES :  $a = \max\left(\frac{\Delta u_z}{\Delta z}\right) = 200 \text{ s}^{-1}$ . La Figure 2 représente l'évolution de

la température et de la fraction massique des réactifs en fonction de la fraction de mélange  $Z$ . Cette dernière est la fraction massique locale de combustible et est calculée dans cette étude par la formule de Bilger [16]. Le mécanisme DRM22 [17] a été choisi pour cette étude car il permet d’obtenir les mêmes résultats que le GRI3.0, considéré ici comme référence, à coût réduit.

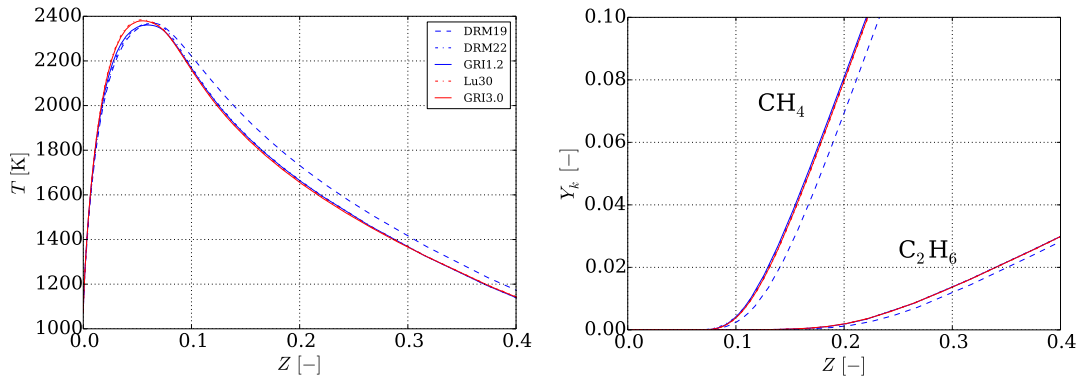


Figure 2 : Température et fraction massique des réactifs en fonction de la fraction de mélange  $Z$  pour l’étude d’une flamme 1D contre-courant.

### 2.3. Paramètres de la simulation

Le domaine de calcul est constitué du volume fluide à l’intérieur de la chambre de combustion et des injecteurs, duquel le volume des tubes refroidis est soustrait (longueur de 0.5 m pour les conditions considérées). Pour éviter des problèmes numériques de refoulement à la sortie, des tubes de sortie sont ajoutés sur une distance correspondant à 10 diamètres de l’orifice de sortie. Ce cas d’étude présente des échelles spatiales très différentes (diamètre des injections de combustible - hauteur de la chambre), ce qui nécessite l’utilisation d’un maillage tétraédrique. Dans ce maillage, des zones de raffinement sont présentes dans les injections et dans la continuité de celles-ci. Finalement, le maillage utilisé comporte 42 millions de cellules et la taille de maille caractéristique  $\Delta$  dans les zones de raffinement est telle que le Reynolds de maille  $Re_{\Delta} = U\Delta/\nu \approx 400$ .

Pour les conditions aux limites, les débits expérimentaux  $q_{\text{combustible}} = 0.00068 \text{ kg/s}$  et  $q_{\text{air}} = 0.0124 \text{ kg/s}$  sont imposés. La turbulence aux entrées est générée grâce à des boîtes de turbulence homogène isotrope. Pour les transferts de chaleur, les températures du combustible et de l’air sont celles du Tableau 1. Les parois des injecteurs sont considérées adiabatiques. Les températures des parois latérales (1173 K) et des tubes refroidis (336 K), relevées expérimentalement, sont imposées. Des lois de paroi logarithmique sont appliquées sur toutes les parois du domaine car la résolution proche paroi n’est pas suffisante pour capturer correctement les profils de vitesse et de température à la paroi.

La simulation LES est réalisée avec le solveur dédié aux écoulements à densité variable et à faible nombre de Mach du code YALES2 [18]. La méthodologie développée consiste à appliquer le modèle de Smagorinsky dynamique comme modèle de sous-maille, une approche “Finite Rate Chemistry” combinée au mécanisme réactionnel DRM22, et le modèle de rayonnement de YALES2. Celui-ci combine une méthode aux ordonnées discrètes à un modèle global (SNB full-spectrum correlated-k) pour l’évaluation des propriétés radiatives. Dans cette étude, 24 directions et 7 quadratures spectrales sont considérées. La température et l’émissivité sont estimées pour chaque limite du domaine. De plus, le rayonnement est calculé une fois tous les 50 pas de temps pour limiter le coût calcul significatif lié au rayonnement.

### 3. Résultats

Le temps convectif, défini comme le temps nécessaire à l'air pour traverser la chambre à sa vitesse d'injection,  $t_f = L/U_{air}$ , est ici égal à 0.0125 s. Avec les paramètres numériques choisis et en utilisant 576 CPUs, un temps convectif nécessite 18800 heures CPU. Les statistiques présentées ont été réalisées sur environ  $5 t_f$ .

L'écoulement dans la chambre peut être visualisé à la Figure 3. Celui-ci peut être caractérisé grâce à plusieurs éléments : l'ouverture et la décroissance de vitesse du jet d'air, la trajectoire du combustible et les zones de recirculation.

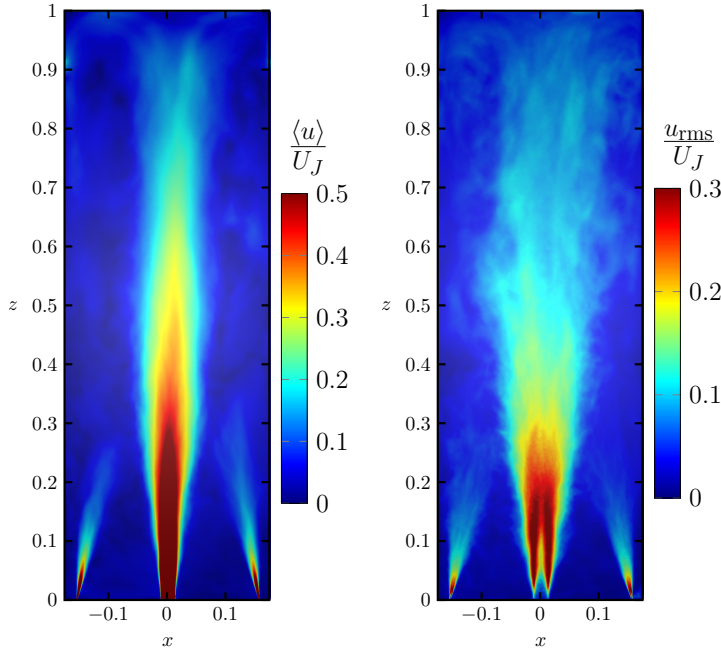


Figure 3 : Moyennes temporelles des vitesses et des fluctuations de vitesse dans le plan des injections de combustible ( $x,z$ ).

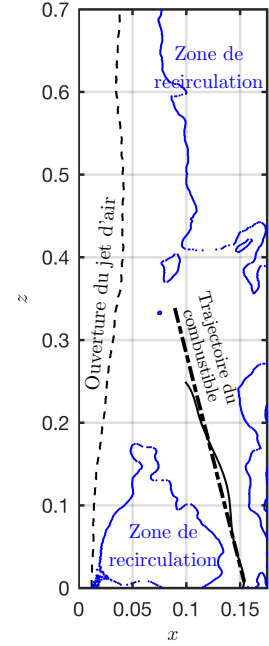


Figure 4 : Topologie de l'écoulement moyen.

Dans la théorie du jet libre [19], l'évolution de l'ouverture d'un jet  $S$  est linéaire et  $S$  est définie par :

$$r_{1/2}(z) = S(z - z_0), \quad (1)$$

où  $r_{1/2}$  est la distance radiale pour laquelle la vitesse est égale à la moitié de la vitesse au centre du jet et  $z_0$  est une origine virtuelle. La décroissance de vitesse axiale d'un jet libre est également linéaire et le coefficient de décroissance  $B$  peut être calculé comme suit :

$$\frac{U_0(z)}{U_J} = B \frac{D}{(z - z_0)}, \quad (2)$$

où  $U_0(z)$  est la vitesse sur l'axe du jet et  $U_J$  est la vitesse à la sortie de l'injection. Dans notre cas d'étude,  $S = 0.09$  et  $B = 6.2$  sont proches des valeurs pour un jet libre, jusqu'à  $z \approx 0.4$  m (trait pointillé fin sur la Figure 4). Au-delà, les parois et la zone de recirculation commencent à avoir une influence sur l'ouverture du jet d'air et, par conséquent, sur la vitesse de celui-ci. La trajectoire du jet de combustible est donnée par la position de la vitesse maximum dans la zone du combustible (ligne continue noire sur la Figure 4). En accord avec les observations expérimentales, les jets de combustible sont légèrement déviés. Il y a, en effet, un entrainement du jet d'air, dont la vitesse diminue moins rapidement que celle du combustible. Deux zones de

recirculation sont observées dans la chambre en utilisant les iso-lignes  $\langle U_z \rangle = 0$  (en bleu sur la Figure 4) : une le long des parois latérales, due à la présence de la paroi supérieure et une autre entre les jets, près du brûleur.

En ce qui concerne l'analyse de la flamme, le champ de température a tout d'abord été comparé aux mesures expérimentales et à des résultats RANS utilisant différents modèles TCI : EDC, Eddy Dissipation/Finite Rate (EDFR) avec un coefficient  $A = 4$  standard et un coefficient ajusté  $A = 0.6$ . Le niveau de température dans le four est du même ordre de grandeur que pour les données expérimentales (Figure 5). Le champ de température et la forme de la zone réactionnelle sont mieux prédits qu'en RANS, et ce même pour la RANS fournissant la meilleure prédiction (EDFR  $A = 0.6$ ). Deux profils de températures sont également représentés en Figure 6 : un profil le long de l'axe du jet d'air, et l'autre à une distance  $z/D \approx 24$  ( $z = 0.59$  m) du brûleur, correspondant à la position du pic de température. Sur l'axe, la modélisation LES prédit mieux les températures dans la zone réactionnelle (à partir de  $z/D \approx 14$ ) qu'en RANS, et ce quelque soit le modèle de TCI considéré. La sous-estimation de la température proche de l'injection peut s'expliquer par une vitesse axiale du jet d'air constante sur une trop longue distance, avec la résolution du maillage utilisé. Les trois profils de température obtenus en RANS mettent en évidence les incertitudes de modélisation mentionnées dans l'introduction. Sur le profil transversal  $z/D \approx 24$ , les températures sont correctement prédites au centre du four mais sont surestimées près des parois. La prédiction LES reste néanmoins plus fidèle à l'expérimental que le profil RANS le mieux prédit.

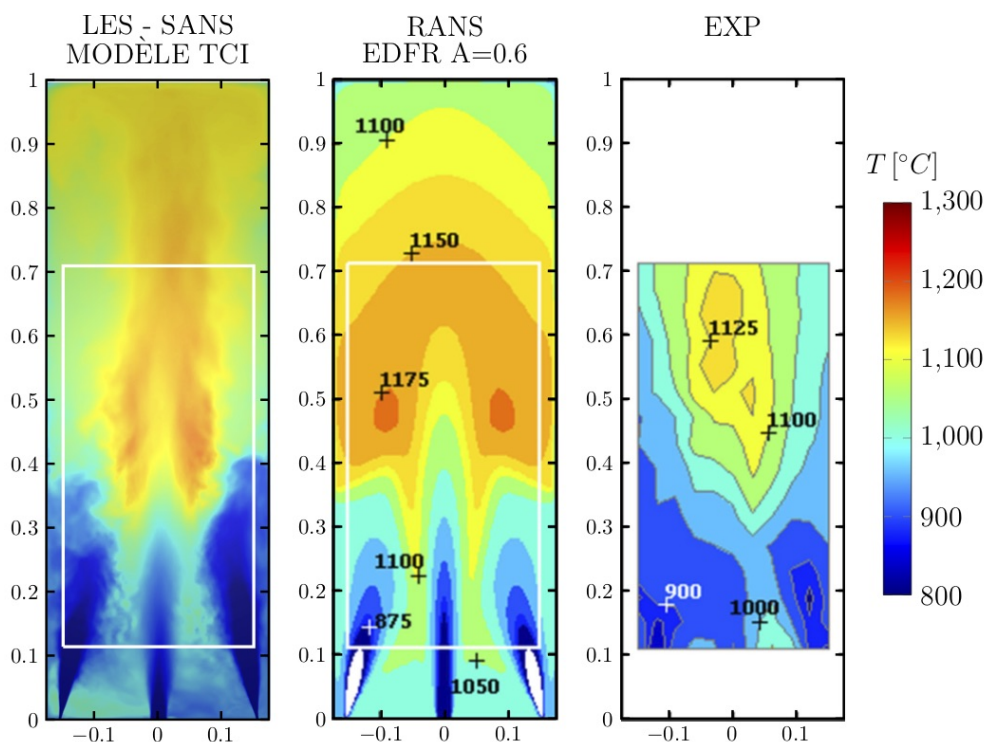


Figure 5 : Comparaison des champs de température dans le plan  $(x,z)$  obtenus avec la simulation LES, une simulation RANS et les mesures expérimentales.

L'analyse du maximum de la fraction massique  $\text{CH}_4$  pour chaque profil transversal dans le plan  $(x,z)$  permet de vérifier la manière dont est consommé le combustible. La Figure 7 montre que la fraction massique maximale de  $\text{CH}_4$  diminue rapidement après les injections, atteignant moins de 8% en  $z/D = 10$ . Après  $z/D \approx 25$ , le combustible est totalement consommé, signi-



fiant que la combustion est complète. La consommation du  $\text{CH}_4$  est néanmoins plus rapide avec les résultats LES qu'expérimentalement. De la même manière, la fraction massique maximale de CO permet de localiser la zone de réaction. En accord avec la précédente observation, le maximum de CO est correctement estimé autour de 3000 ppm mais la zone de réaction prédite en LES est trop proche du brûleur. Ce décalage est dû à une sous-estimation du mélange des fumées avec l'oxygène de l'air, menant à des concentrations en oxygène trop élevées, en comparaison avec les mesures expérimentales.

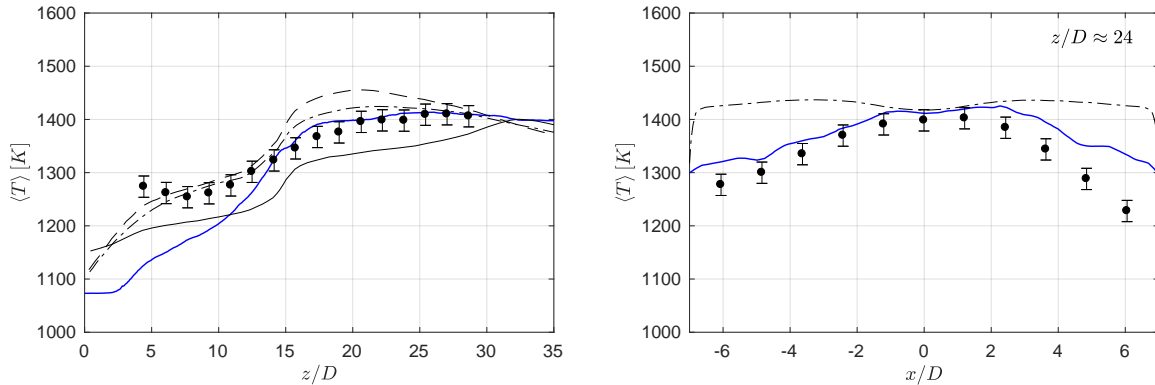


Figure 6 : Profils de température dans l'axe du jet (gauche) et en  $z/D \approx 24$  dans le plan  $(x,z)$  (droite). Comparaison entre les résultats LES (trait continu bleu), les résultats RANS (EDC : trait continu noir, EDFA=4 : tirets noirs, EDFA=0.6 : trait pointillé noir) et les mesures expérimentales (points).

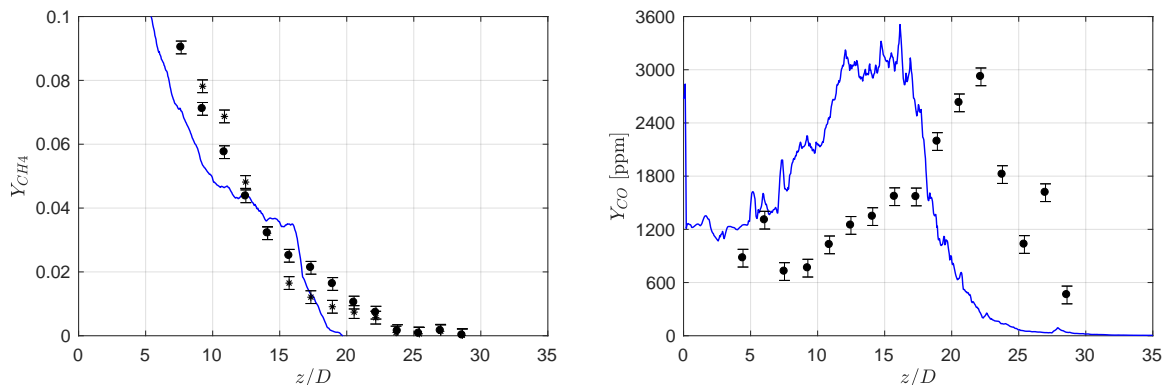


Figure 7 : Maximum de  $\text{CH}_4$  et CO pour chaque profil transversal. Comparaison entre les résultats LES (trait continu bleu) et les mesures expérimentales (\* pour  $x > 0$  and • pour  $x < 0$ ).

## 4. Conclusion

La LES réalisée dans cette étude, sur un four de 30kW, fournit des résultats en accord avec les données expérimentales. Cependant, les concentrations en oxygène au point de confluence sont trop élevées. Ceci est peut-être dû à une durée trop courte de simulation, ne permettant pas un calcul correct de la zone de recirculation et sous-estimant ainsi la dilution des fumées dans l'air. Il en résulte que la zone réactionnelle est trop proche du brûleur par rapport aux mesures expérimentales. Les champs initiaux de la simulation présentée ont été obtenus par interpolation des résultats d'une simulation LES utilisant un maillage de 5.3 millions d'éléments. Une perspective serait donc de réaliser une simulation préliminaire avec encore moins d'éléments de calcul, permettant de pouvoir renouveler une ou plusieurs fois le volume de la chambre et d'assurer un écoulement initial, zones de recirculation comprises, stabilisé.

## 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] D. Lupant, Caractérisation expérimentale détaillée et modélisation numérique de la combustion diluée du gaz naturel sur une installation de laboratoire de 30 kW, Thèse de l'Université de Mons, 2011.
- [4] A. Parente, C. Galletti, L. Tognotti. Effect of the combustion model and kinetic mechanism on the mild combustion in an industrial burner fed with hydrogen enriched fuels, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33 (2008) 7553-7564.
- [5] M. Ferrarotti, D. Lupant, A. Parente. Analysis of a 20 kW flameless furnace fired with natural gas, *Energy Procedia*, 120 (2017) 104-111.
- [6] G. Sorrentino, U. Göktolga, M. de Joannon, J. van Oijen, A. Cavaliere, P. de Goey. An experimental and numerical study of mild combustion in a cyclonic burner, *Energy Procedia*, 120 (2017) 649-656.
- [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. Chomiak, A. Karlsson, Flame Liftoff in Diesel Sprays, *Proc. Combust. Inst.*, 26 (1996) 2557-2564.
- [9] F.C. Christo, B.B. Dally, Modeling turbulent reacting jets issuing into a hot and diluted coflow, *Combust. Flame.*, 142 (2005) 117-129.
- [10] A. De, E. Oldenhof, P. Sathiah, D.J.E.M. Roekaerts, Numerical Simulation of Delft-Jet-in-Hot-Coflow (DJHC) Flames Using the Eddy Dissipation Concept Model for Turbulence-Chemistry Interaction, *Flow Turbul. Combust.*, 87 (2011) 537-567.
- [11] Z. Li, M. Ferrarotti, A. Cuoci, A. Parente, Finite-rate chemistry modelling of non-conventional combustion regimes using a Partially-Stirred Reactor closure : Combustion model formulation and implementation details, *Appl. Energy.*, 225 (2018) 637-655.
- [12] M. Ihme, Y.C. See, LES flamelet modeling of a three-stream MILD combustor : Analysis of flame sensitivity to scalar inflow condition, *Proc. Combust. Inst.*, 33 (2011) 1309-1317.
- [13] R.M. Kulkarni, W. Polifke, LES of Delft-Jet-In-Hot-Coflow (DJHC) with tabulated chemistry and stochastic fields combustion model, *Fuel. Process. Technol.*, 107 (2013) 138-146.
- [14] 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) flame, *Combust. Flame.*, 164 (2016) 68-84.
- [15] 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).
- [16] R. W. Bilger, The structure of turbulent nonpremixed flames, *In Symposium (International) on Combustion* 22 (1989) 475-488.
- [17] A. Kazakov, M. Frenklach, Reduced Reaction Sets based on GRI-Mech 1.2.
- [18] V. Moureau, P. Domingo, L. Vervisch, Design of a massively parallel CFD code for complex geometries, *Comptes Rendus Mécanique*, 339 (2-3) (2011) 141-148.
- [19] S.B. Pope, Turbulent flows, Cornell University, Cambridge University Press (2000).

## Remerciements

Les auteurs remercient G. Lartigue et V. Moureau du Coria pour l'accès au code YALES2. 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.