

Effet du rayonnement thermique sur des flammes diluées et décarbonées

Julie BEN ZENOU^{1*}, Ronan VICQUELIN¹

¹ Université Paris-Saclay, CNRS, CentraleSupélec, Laboratoire EM2C, Gif-sur-Yvette, France

* (auteur correspondant : julie.benzenou@centralesupelec.fr)

Résumé - L'effet du rayonnement thermique est étudié sur des flammes H₂-Air et CH₄-O₂ diluées. Pour cela, un solveur fluide réactif est couplé à une solution semi-analytique de l'équation de transfert radiatif. Le rayonnement thermique a trois effets principaux : une diminution de la température dans les gaz brûlés, un préchauffage des gaz frais, et une augmentation de la vitesse de flamme laminaire. Le modèle de gaz gris est comparé à des propriétés radiatives plus réalistes en utilisant un modèle CK. La prise en compte du rayonnement thermique conduit à une augmentation significative de la vitesse de flamme laminaire qui atteint 320% à 5 atm pour une flamme d'hydrogène.

Nomenclature

ρ	masse volumique, kg/m ³	x	position, m
S_l	vitesse de flamme laminaire non-étirée, cm/s	L	longueur du domaine, cm
ϕ	richesse	κ	coefficient d'absorption, m ⁻¹
T	température, K	τ	transmissivité
y_{dilu}	fraction massique de diluant	R	$(S_l^{\text{rad}} - S_l^{\text{adiab}})/S_l^{\text{adiab}}$, %
P	pression, atm		

1. Introduction

Les méthodes de combustion décarbonée, telles que la combustion de l'hydrogène ou l'oxycombustion du méthane, sont des solutions potentielles pour neutraliser les émissions de carbone dans les processus industriels et les moyens de transport. Cependant, elles présentent des défis comme la stabilisation de la flamme ou l'augmentation des émissions de polluants comme les oxydes d'azote (NO_x).

Une façon de limiter ces émissions est de diluer les gaz frais avec des gaz brûlés, *i.e.*, de la vapeur d'eau ou de dioxyde de carbone. La dilution avec de la vapeur d'eau a été étudiée pour les flammes d'hydrogène (ou de gaz de synthèse) à la fois expérimentalement et numériquement [1, 2, 3]. La principale conclusion de ces études est que la dilution réduit la vitesse de la flamme, la température adiabatique et les émissions de NO_x. Il en est de même pour les flammes de méthane diluées avec du CO₂ [4].

Les effets du rayonnement thermique et en particulier de sa réabsorption par les gaz frais (ici par la vapeur d'eau ou la vapeur de CO₂) sont mal compris et sont généralement négligés dans les simulations de flammes libres. Le rayonnement thermique dans les flammes diluées a été étudié numériquement dans la littérature, principalement sur des flammes méthane/air diluées avec de la vapeur de dioxyde de carbone. Ces études [5, 6, 7, 8, 9] soulignent la nécessité de considérer la dépendance spectrale des propriétés radiatives du gaz et de modéliser non seulement l'émission de rayonnement mais aussi la réabsorption. Elles ont établi que la réabsorption augmente la vitesse et la température de la flamme. Ju *et al.* [5] ont également relevé une forte dépendance à la longueur du domaine. Cependant, la plupart de ces études se concentrent sur des flammes sphériques utilisées pour trouver expérimentalement la vitesse de flamme laminaire.

Cette géométrie nécessite une extrapolation (non-)linéaire pour trouver la vitesse de flamme non-étirée à partir des valeurs étirées à rayon fini. Elle suppose également des conditions adiabatiques. Cette extrapolation n'est pas nécessaire avec les simulations de flammes planes 1D, qui peuvent directement fournir la valeur de la vitesse de flamme laminaire non étirée.

Ce travail a pour but de mieux comprendre l'effet du rayonnement thermique sur les flammes planes 1D diluées. Les méthodes numériques utilisées sont décrites dans la section 2. Afin de calculer des flammes couplées réalistes, plusieurs simulations sont entreprises sur des flammes H₂-Air-H₂O : avec des propriétés de gaz gris dans un domaine infini (section 3), avec des propriétés de gaz gris dans un domaine fini (section 4) et avec des propriétés radiatives spectrales réalistes dans un domaine fini (section 5). L'impact de la pression sur les résultats est discuté dans la section 6. Finalement, la section 7 ouvre la discussion aux flammes CH₄-O₂-CO₂.

2. Méthodes numériques

2.1. Couplage des solveurs fluide et radiatif

Ce travail utilise le code maison Agath, développé au laboratoire EM2C, pour résoudre les équations de Navier-Stokes en régime permanent 1D pour un écoulement réactif multi-espèces. Dans l'état stationnaire considéré, le flux de masse constant $\rho_u S_l$ est une valeur propre de cet ensemble d'équations complété par les conditions aux limites. Ces équations sont discrétisées avec un schéma de volume fini et résolues avec un solveur de Newton. Pour la combustion de l'hydrogène, le mécanisme chimique détaillé de Varga *et al.* [10] (12 espèces, 30 réactions) est choisi, et une formulation multi-espèce prenant en compte l'effet Soret, comme conseillé dans [11], est utilisée pour modéliser les vitesses de diffusion. Pour la combustion du méthane, le schéma GRI 3.0 [12] (53 espèces, 325 réactions) est utilisé avec une formulation classique de diffusion moyennée pour la modélisation du transport.

Ce solveur d'écoulement réactif est couplé à un solveur semi-analytique 1D pour décrire le transfert radiatif dans un domaine 1D hétérogène. Ce solveur est basé sur la solution semi-analytique exacte détaillée, dans le cas gris, par Modest [13]. Elle est adaptée à un cas spectral en intégrant sur le nombre d'onde. Cette solution s'appuie sur des fonctions intégrées-exponentielles pour exprimer les transmissivités de couches 1D apparaissant dans la forme intégrale de l'équation de transfert radiatif. Deux modèles pour les propriétés radiatives des gaz sont considérés : une approximation grossière de gaz gris et un modèle CK précis [14] avec des paramètres mis à jour par Rivière et Soufiani [15].

Des flammes diluées sont étudiées ici pour une richesse $\phi = 0,45$, une température de gaz frais $T_u = 500$ K, un rapport de dilution $y_{H_2O} = 0,2$ (ou $y_{CO_2} = 0,6$) et une pression variant entre 1 et 20 atm. Ces conditions sont représentatives de celles du fonctionnement d'un moteur.

2.2. Conditions aux limites

Les calculs de vitesse de flamme laminaire (sans rayonnement) sont généralement effectués dans des domaines suffisamment grands pour simuler une propagation dans un milieu infini. Cependant, il sera montré (section 4) que la taille du domaine, même si elle reste très supérieure à l'épaisseur de la flamme, affecte fortement les résultats couplés au rayonnement thermique. Deux ensembles de conditions aux limites sont donc comparés dans cette étude. L'un simule un domaine infini avec une infinité de gaz frais pour $x < 0$ et une infinité de gaz brûlés pour $x > 0$. L'autre reproduit un domaine de longueur finie dans lequel la température des gaz frais est celle imposée au premier point du domaine. Dans cette configuration, le gaz est supposé être

entouré d'une enceinte noire froide à 500 K. Dans les deux cas, le domaine simulé s'étend de $x = -L = -20$ cm à $x = L = 20$ cm avec le front de flamme situé autour de $x = 0$ cm. Dans le cas fini, une partie du rayonnement thermique émis est perdue aux frontières du domaine alors que dans le cas infini, toute l'émission est réabsorbée. Une partie de cette réabsorption a lieu en amont du domaine simulé, ce qui doit être reflété dans les conditions aux limites. La température au premier point du domaine simulé sera donc différente de celle imposée au mélange imbrûlé à $-\infty$ dans la configuration infinie.

3. Gaz gris et domaine infini

La première configuration étudiée est un domaine infini de gaz frais et brûlés considérés gris. On choisit un coefficient d'absorption uniforme $\kappa = 1 \text{ m}^{-1}$. L'épaisseur optique des couches de gaz frais et brûlés est infinie. Une flamme H₂-Air-H₂O avec $\phi = 0,45$, $T_u = 500$ K, $P = 5$ atm et $y_{H_2O} = 0,2$ est simulée dans un domaine de 40 cm de long en utilisant le jeu de conditions aux limites du cas infini détaillé dans la section 2.2. Les profils de température et de puissance radiative de la flamme sont représentés sur la Figure 1. Le profil de température de la flamme adiabatique correspondante (*i.e.* sans rayonnement thermique) est également affiché pour comparaison.

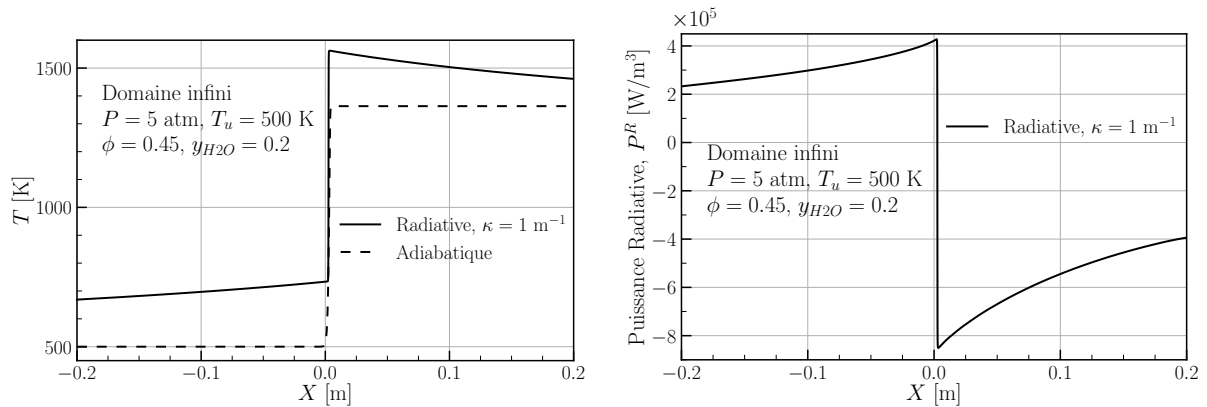


Figure 1 : Profils de température (gauche) et de puissance radiative (droite) dans le cas de gaz gris dans un domaine infini.

La puissance radiative est négative dans les gaz brûlés où l'émission est dominante et positive dans les gaz frais, où l'absorption est majoritaire. Cette absorption conduit à un préchauffage de la couche 1D infinie de gaz frais, ce qui explique que la température au premier point du domaine numérique soit supérieure à $T_u = 500$ K. Dans les gaz brûlés, l'émission conduit à une diminution de la température. En écrivant un bilan de température entre le dernier point du domaine numérique et $x = +\infty$, on trouve que $T_{+\infty}$ vaut 1363 K, ce qui est précisément la température adiabatique de fin de combustion de la flamme étudiée. Ceci valide la simulation d'un domaine infini sans pertes : tout rayonnement émis doit être, à terme, réabsorbé.

Le préchauffage des gaz frais a deux conséquences principales : la température maximale dans le domaine est supérieure à la température adiabatique (1562 K au lieu de 1363 K), et la vitesse de flamme laminaire non étirée augmente considérablement. Cette vitesse de flamme, et les autres obtenues dans cette étude sur l'hydrogène, sont résumées dans le Tableau 1 avec la valeur correspondante de $R = (S_l^{\text{rad}} - S_l^{\text{adiab}})/S_l^{\text{adiab}}$. Ce coefficient, similaire à celui défini dans [7], quantifie l'effet du rayonnement thermique sur la vitesse de flamme. Dans ce premier scénario, l'augmentation est conséquente avec $R = 1500$ % et S_l passant de 2 cm/s à 31,9 cm/s.

4. Gaz gris et domaine fini

Les chambres de combustion réelles ne sont pas infinies. La Figure 2 compare les profils de température et de puissance radiative pour le même mélange de gaz frais que précédemment mais avec les deux jeux de conditions aux limites détaillées dans la section 2.2.

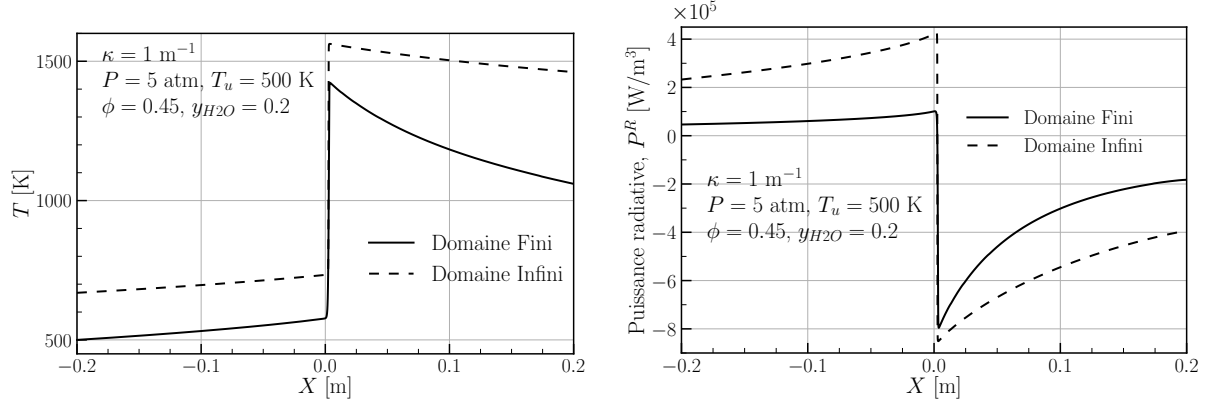


Figure 2 : Effet des conditions aux limites sur les profils de température (gauche) et de puissance radiative (droite).

Les mêmes phénomènes que ceux détaillés dans la section 3 apparaissent dans la configuration finie. Le préchauffage est cependant moins important pour trois raisons. Premièrement, la condition de Dirichlet à $x = -20$ cm force la température à 500 K à cette position. Deuxièmement, les gaz brûlés émettent moins dans le cas du domaine fini car la frontière froide à droite les refroidit. Troisièmement, la couche de gaz frais n'est plus infinie, et son épaisseur optique est désormais finie ($\kappa L = 0,2$ et $\tau_u = \exp(-\kappa L) \approx 0,82$). Une partie du rayonnement thermique émis ne peut plus être réabsorbée par les gaz frais et est perdue à la frontière froide à gauche. La valeur de la température au dernier point du domaine simulé, qui est maintenant de 1060 K, *i.e.* 300 K de moins que la température adiabatique de la flamme, met en évidence ces pertes. L'effet sur la vitesse de flamme est également plus faible que dans la configuration infinie avec une vitesse de $S_f^{\text{rad}} = 4,3$ cm/s correspondant à $R = 115$ %.

L'épaisseur optique des gaz peut être modifiée en changeant la valeur de κ . La Figure 3 compare trois valeurs d'épaisseurs optiques (0,02, 0,2 et 2) associées à des transmissivités décroissantes pour les gaz frais de 0,98, 0,82 et 0,14. Le préchauffage devient de plus en plus important quand κ augmente puisqu'un coefficient d'absorption plus élevé signifie plus d'émission des gaz brûlés (pour une température fixée), et une épaisseur optique plus élevée signifie plus de réabsorption des gaz frais ainsi qu'un impact plus faible des frontières froides. Les pertes thermiques dans le domaine atteignent une valeur maximale pour les transmissivités intermédiaires. En effet, lorsque le domaine est optiquement fin ($\kappa L = 0,02$), l'émission des gaz brûlés est moins importante, ce qui explique la faible diminution de la température. Au contraire, lorsque le domaine est assez épais ($\kappa L = 2$), l'impact des frontières froides est moins intense. Les pertes sur le domaine sont alors plus faibles que dans le cas $\kappa L = 0,2$ comme le prouve la température en sortie du domaine simulé, qui est plus élevée pour $\kappa L = 2$.

Dans le cas optiquement fin ($\kappa L = 0,02$), la valeur de la vitesse de flamme est très proche de la valeur adiabatique (voir Tableau 1). D'autre part, même avec $\kappa L = 2$, la vitesse de flamme est toujours inférieure de 67% à celle du cas infini. Cela indique que la convergence en épaisseur optique du côté épais n'est pas atteinte. Augmenter κ de 1 à 10 m^{-1} dans un domaine de 40 cm revient à garder $\kappa = 1 \text{ m}^{-1}$ constant mais à augmenter la longueur du domaine de 40

cm à 4 m. Cela signifie que la longueur du domaine a un impact significatif sur l'impact du rayonnement thermique, comme le montrait Ju *et al.* [5]. Dans les applications pratiques de combustion, où les dimensions de la chambre varient de quelques dizaines de cm à plusieurs mètres, une configuration finie d'une longueur appropriée doit être simulée pour obtenir une vitesse de flamme avec rayonnement correcte.

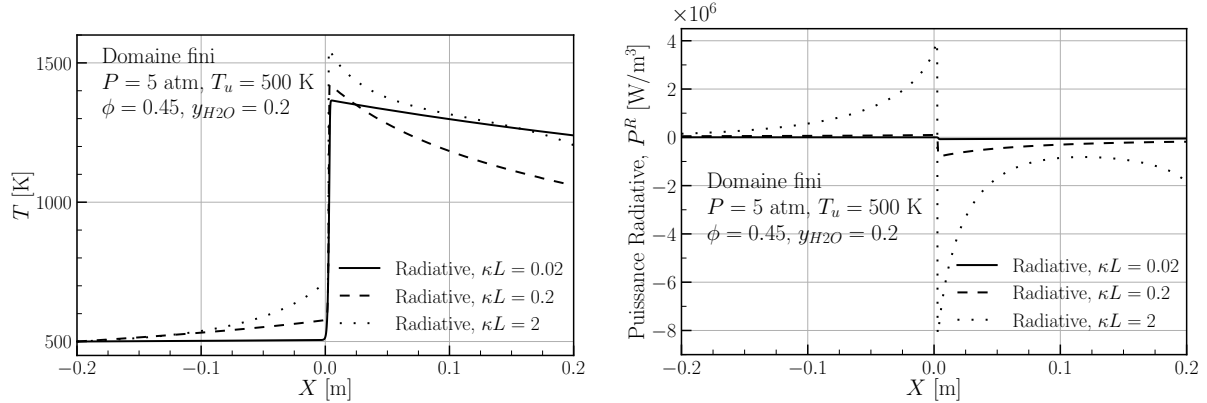


Figure 3 : Profils de température (gauche) et de puissance radiative (droite) pour différentes épaisseurs optiques dans un domaine fini.

5. Propriétés radiatives spectrales

Pour continuer d'augmenter la complexité et le réalisme de la simulation, des propriétés radiatives dépendantes du nombre d'onde doivent être prises en compte au lieu de l'approximation de gaz gris. Un modèle CK est choisi comme détaillé dans la section 2.2. Les spectres d'émissivité des gaz frais et brûlés sont présentés sur la Figure 4 pour différentes conditions de pression. La fonction de Planck modélisant l'émission d'un corps noir à la température des gaz brûlés ($T_{\text{adiab}} = 1363$ K) est représentée en pointillés pour souligner la zone d'intérêt des spectres. Il est clair que les mélanges étudiés ne sont pas gris. Des propriétés radiatives spectrales sont nécessaires même si elles rendent les simulations plus coûteuses (1022 bandes au lieu d'une seule valeur pour κ).

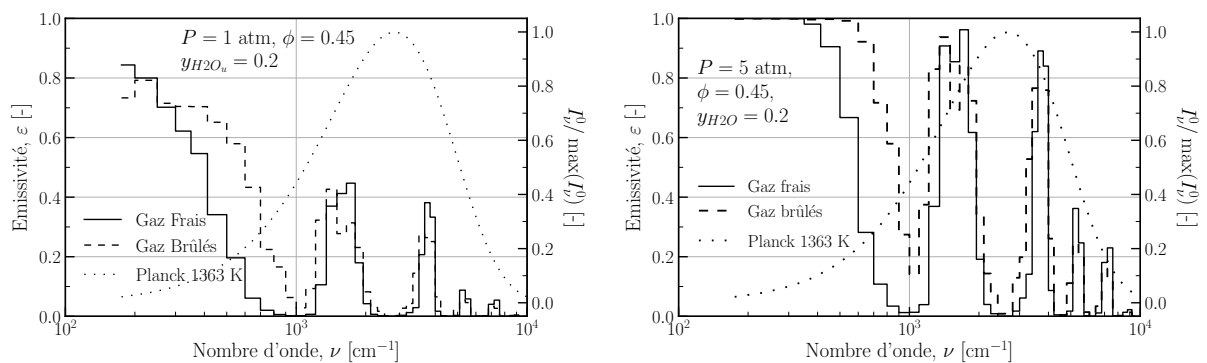


Figure 4 : Spectres d'émissivité des gaz frais et brûlés selon le modèle CK pour deux valeurs de pression 1 atm (gauche) et 5 atm (droite).

La Figure 5 compare cette simulation avec le modèle CK aux calculs précédents avec l'approximation de gaz gris avec $\kappa L = 0.2$ ($\tau = 0,82$) et $\kappa L = 2$ ($\tau = 0,135$). Avec le modèle CK, la transmissivité moyenne du mélange brûlé pondérée par la fonction de Planck est de $\tau = 0,68$. Les profils de température et de puissance radiative du calcul avec le modèle CK se situent entre les tracés des deux autres simulations. Cela suit l'ordre des épaisseurs optiques, des mélanges

les plus fins aux plus épais. Il est important de noter ici que pour une configuration réaliste avec un domaine fini, un modèle détaillé de propriétés radiatives, un mécanisme chimique détaillé et une modélisation correcte du transport, la prise en compte du rayonnement thermique conduit à une augmentation de la vitesse de flamme laminaire de 320%. Ainsi, dans ces flammes H₂-Air-H₂O, il est essentiel de tenir compte du rayonnement thermique pour obtenir des simulations correctes de la vitesse de flamme.

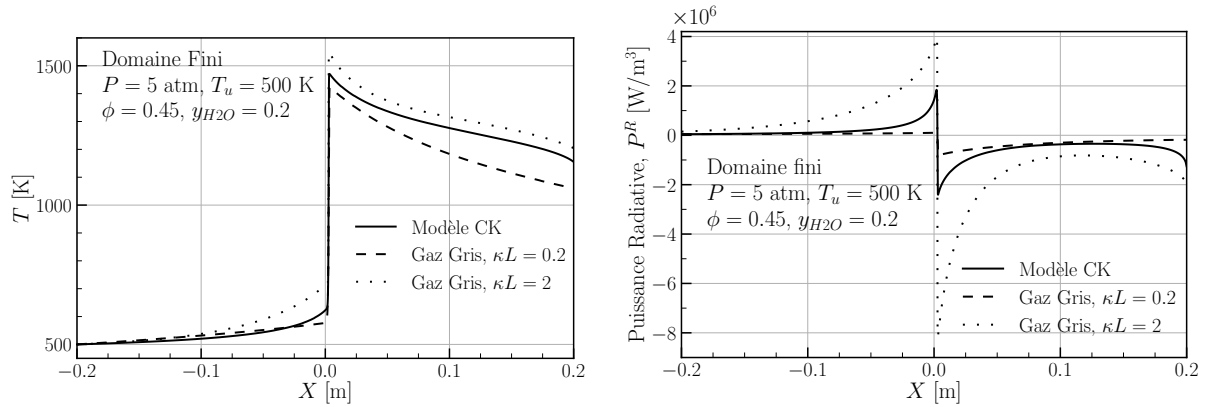


Figure 5 : Effets des propriétés radiatives sur les profils de température (gauche) et de puissance radiative (droite).

6. Effet de la pression

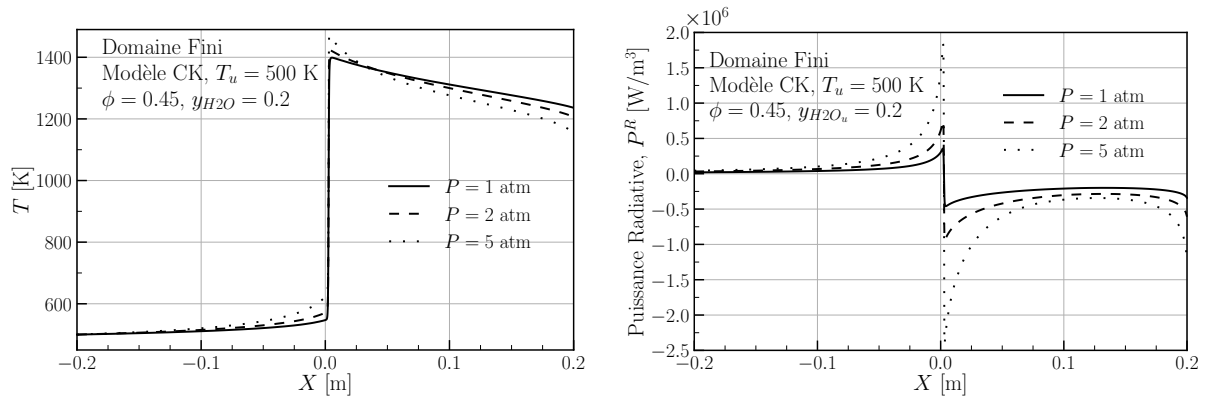


Figure 6 : Effet de la pression sur les profils de température (gauche) et de puissance radiative (droite)

Les effets du rayonnement avec le modèle CK sont maintenant étudiés pour différentes conditions de pression. La base de données spectroscopiques utilisée pour déterminer les paramètres du modèle CK tient compte des effets d'élargissement de raie dus à la pression. La Figure 6 présente les profils de température et de puissance radiative pour des simulations à 1, 2 et 5 atm. L'augmentation de la pression et donc du coefficient d'absorption des gaz brûlés entraîne une plus grande émission des gaz chauds. Cela se reflète dans la baisse de la température après le front de flamme, qui est plus raide aux pressions plus élevées. Une pression plus élevée, correspondant à un mélange plus épais, conduit également à un préchauffage plus important des gaz frais.

Les vitesses de combustion des flammes adiabatiques et couplées aux différentes pressions considérées sont détaillées dans le Tableau 1. Comme attendu, les flammes avec rayonnement à 1, 2 et 5 atm sont plus rapides que les flammes adiabatiques correspondantes. Avec le modèle CK, contrairement au gaz gris, deux effets de la pression sur la vitesse de flamme laminaire

s'opposent. En effet, il est connu que l'augmentation de la pression conduit à des valeurs plus faibles de vitesses de flamme. Cependant, avec le rayonnement thermique, l'augmentation du préchauffage due à l'augmentation de la pression conduit à une vitesse de flamme plus élevée. Ces deux effets sont en opposition dans ces flammes diluées couplées. Le premier effet est le plus fort ici : l'augmentation de la pression réduit la vitesse de flamme, à la fois dans les simulations adiabatiques et dans les calculs couplés. Cependant, l'effet du rayonnement, qui est quantifié par R , croît avec la pression : de 46% à 1 atm à 320% à 5 atm. Ceci est, de nouveau, dû à l'augmentation de l'épaisseur optique et de l'intensité du rayonnement quand la pression augmente. Il est intéressant de noter que même à pression atmosphérique, l'effet du rayonnement thermique sur une flamme pauvre H2-Air-H2O est significatif.

Domaine	Modèle de rayonnement	κL [-]	S_l [cm/s]	R [%]
Infini	Adiabatique	-	2,0	-
	Gaz Gris	0,2	31,9	1500
Fini	Adiabatique	-	2,0	-
		0,02	2,1	5
	Gaz Gris	0,2	4,3	115
		2	21,4	970
	Modèle CK	-	8,4	320

Tableau 1 : Résumé des valeurs de vitesse de flamme pour les différentes conditions étudiées pour H2

7. Oxycombustion du méthane diluée avec du dioxyde de carbone

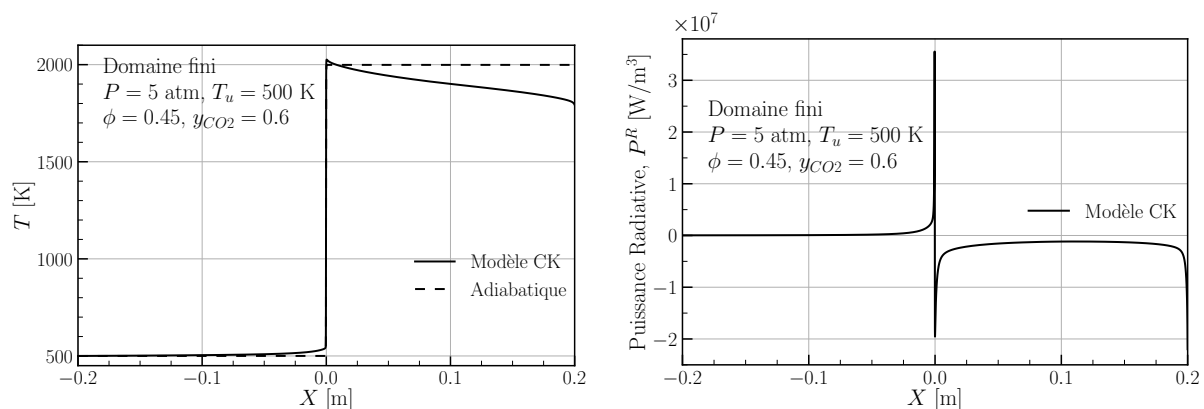


Figure 7 : Prise en compte du rayonnement sur une flamme d'oxycombustion CH4-O2-CO2

Suite à ces études sur des flammes H2-Air-H2O, une flamme CH4-O2 diluée avec de la vapeur de CO2 a également été simulée pour comparer les effets du rayonnement sur les deux carburants. Les profils de température et de puissance radiative obtenus pour $P = 5$ atm, $\phi = 0,45$, $T_u = 500$ K et $y_{CO_2} = 0,6$ sont présentés en Figure 7. Le taux de dilution est plus élevé que dans le reste de l'étude car le CO2 vient remplacer l'azote de l'air. Le modèle CK et le jeu de conditions correspondant à un domaine fini ont été utilisés. Il est intéressant de souligner que cette simulation est sensiblement plus chère que celles pour l'hydrogène car la chimie du méthane est plus complexe.

Les mêmes phénomènes que pour l'hydrogène peuvent être retrouvés avec une émission des gaz brûlés menant à une baisse de température, une réabsorption par le CO2 des gaz frais entraînant un préchauffage et une température maximale légèrement supérieure à la température

adiabatique. L'effet sur la vitesse de flamme est moins important que celui observé précédemment avec $S_l^{\text{adiab}} = 20,5$ cm/s et $S_l^{\text{rad}} = 23,4$ cm/s soit $R = 14$ %. Il sera intéressant dans la suite de faire varier le taux de dilution, la richesse et la pression de cette flamme de méthane pour voir si des effets du même ordre de grandeur que ceux trouvés pour l'hydrogène existent.

8. Conclusion

Cette étude a examiné l'effet du rayonnement thermique sur des flammes 1D prémélangées H₂-Air diluées avec de la vapeur d'eau en utilisant un solveur fluide réactif couplé à une solution semi-analytique de l'équation de transfert radiatif. Les résultats ont montré que le transfert radiatif a un impact significatif sur les caractéristiques de la flamme. Sa prise en compte entraîne un préchauffage des gaz frais, une augmentation de la vitesse de la flamme laminaire, et une diminution de la température dans les gaz brûlés. L'effet de la longueur du domaine sur ces phénomènes a été examiné, soulignant l'importance de sa considération dans les simulations pratiques. L'étude a également comparé l'approximation de gaz gris à des propriétés radiatives plus réalistes en utilisant un modèle CK. Les simulations couplées ont révélé que la prise en compte du rayonnement thermique conduit à une augmentation significative de la vitesse de la flamme laminaire, qui atteint 320% à 5 atm. L'impact de la pression a également été étudié. Une ouverture aux flammes CH₄-O₂-CO₂ a montré que les mêmes phénomènes avaient lieu mais avec un effet plus faible du rayonnement. Dans l'ensemble, cette étude souligne la nécessité de prendre en compte le rayonnement thermique dans les simulations 1D de flammes diluées afin d'obtenir des prédictions précises des caractéristiques de la flamme, telles que sa vitesse laminaire non étirée, une brique fondamentale de la modélisation de la combustion 3D turbulente.

Références

- [1] Xie, Yongliang *et al.* (2014). Comparative study on the effect of CO₂ and H₂O dilution on laminar burning characteristics of CO/H₂/air mixtures. *Int. J. Hydrog. Energy*, 39(7), 3450–3458.
- [2] Meng, Shun *et al.* (2016). The effects of water addition on the laminar flame speeds of CO/H₂/O₂/H₂O mixtures. *Int. J. Hydrog. Energy*, 41(25), 10976–10985.
- [3] Lyu, Yajin *et al.* (2018). Effects of steam dilution on laminar flame speeds of H₂/air/H₂O mixtures at atmospheric and elevated pressures. *Int. J. Hydrog. Energy*, 43(15), 7538–7549.
- [4] Qiao, L. *et al.* (2010). Extinction of premixed methane/air flames in microgravity by diluents : Effects of radiation and Lewis number. *Combust. Flame*, 157(8), 1446–1455.
- [5] Ju, Yiguang *et al.* (1998). Effects of radiative emission and absorption on the propagation and extinction of premixed gas flames. *Symp. (Int.) Combust.*, 27(2), 2619–2626.
- [6] Ruan, Jiongming *et al.* (2001). Combined effects of nongray radiation and pressure on premixed CH₄/O₂/CO₂ flames. *Combust. Flame*, 124(1-2), 225–230.
- [7] Chen, Zheng (2017). Effects of radiation absorption on spherical flame propagation and radiation-induced uncertainty in laminar flame speed measurement. *Proc. Combust. Inst.*, 36(1), 1129–1136.
- [8] Chen, Zheng *et al.* (2007). Studies of radiation absorption on flame speed and flammability limit of CO₂ diluted methane flames at elevated pressures. *Proc. Combust. Inst.*, 31(2), 2693–2700.
- [9] Han, Minchao *et al.* (2015). Laminar flame speeds of H₂/CO with CO₂ dilution at normal and elevated pressures and temperatures. *Fuel*, 148, 32–38.
- [10] Varga, T. *et al.* (2015). Optimization of a hydrogen combustion mechanism using both direct and indirect measurements. *Proc. Combust. Inst.*, 35(1), 589–596.
- [11] Sánchez, Antonio L. and Williams, Forman A. (2014). Recent advances in understanding of flammability characteristics of hydrogen. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 41, 1–55.
- [12] Smith, Gregory P. *et al.* (1999). GRI-Mech 3.0. <http://me.berkeley.edu/gri-mech/>
- [13] Modest, M. F. (1993). Radiative Heat Transfer. McGraw-Hill.
- [14] Goody, Richard *et al.* (1989). The correlated-k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 42(6), 539–550.
- [15] Rivière, Philippe and Soufiani, Anouar (2012). Updated band model parameters for H₂O, CO₂, CH₄ and CO radiation at high temperature. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 55(13-14), 3349–3358.