

## Modélisation de la combustion turbulente du méthane par une chimie complexe

Abdelouahad AIT MSAAD<sup>1</sup>, Mustapha MAHDAOUI<sup>1</sup>, Elhoussin AFFAD<sup>2</sup>, M'hamed MOUQALLID<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Mécanique, Energétique et Procédés (LMEP), ENSAM 'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers' Meknes, University Moulay İsmail, B.P. 4024 Béni M'hamed - Meknès

<sup>2</sup>Laboratoire de Transfert de Chaleur et de Masse, University Hassan II, FST de Mohammedia B.P. 146  
Yasmina Mohammedia 20800

E-mail: [msaadabdelouahad@yahoo.fr](mailto:msaadabdelouahad@yahoo.fr)

**Résumé :** La combustion du gaz naturel est chimiquement beaucoup plus propre que celle des carburants classiques (-25 % de CO<sub>2</sub> par rapport à l'essence, taux faible de suies c'est une caractéristique du méthane, (-80 % d'oxydes d'azote) et les moteurs fonctionnant au GNV (Gaz Naturel pour Véhicules) sont deux fois plus silencieux. Le GNV peut être utilisé, moyennant des adaptations légères, dans des moteurs à essence ou Diesel. Le présent travail est consacré à l'étude de la combustion turbulente du méthane dans une chambre de combustion cylindrique utilisant le gaz naturel. L'étude est basée sur l'approche de simulation numérique en utilisant le modèle de turbulence k-ε (code KIVA II). L'aspect chimique de la combustion est traité par le couplage entre le mécanisme réduit obtenu par la méthode CSP (Computational Singular Perturbation) à neuf étapes (9-Step), ce mécanisme réduit est couplé avec la méthode des PDF présumées associée à un modèle lagrangien. Les résultats numériques obtenus par le code de calcul KIVA II qui tient compte des interactions entre la chimie et la turbulence seront comparés avec les résultats expérimentaux obtenus dans une chambre de combustion du gaz naturel.

**Mots clés :** Combustion turbulente; Méthode CSP; Combustion du gaz naturel; interaction chimie-turbulence.

### 1. Introduction

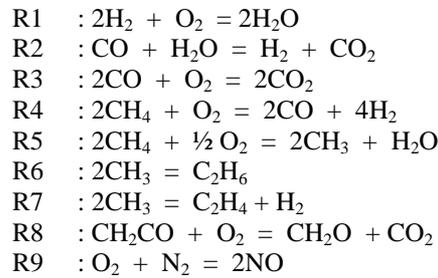
Le développement actuel des moteurs à combustion interne doit répondre à une volonté d'amélioration de leurs performances. Afin d'arriver à cet objectif une compréhension et un contrôle du processus de la combustion est nécessaire. Dans ce contexte plusieurs travaux de recherche ont été faits sur la combustion turbulente. Une étude ont été fait sur les mécanismes détaillés du méthane. Ces mécanismes contiennent plusieurs réactions et espèces. Dans la littérature, plusieurs mécanismes détaillés : Christos et Konstantinos [1], Westbrook [2], Miller et Bowman [3], et le standard GRIMECH [4]. Ces mécanismes présentent le problème du temps de calcul est la résolution de grands systèmes d'équations différentielles d'autre part ces mécanismes ne sont pas à l'heure actuelle d'une utilité importante pour la modélisation des écoulements réactifs turbulents. Ces inconvénients ont conduit les chercheurs sur la cinétique chimique à chercher des outils pour réduire ces mécanismes. Plusieurs mécanismes réduits existant dans la littérature : Duterque et al. [5] (1 à 2 réactions globales), Peters [6], Jones et Lindstedt [7] (plus de deux réactions globales), Edelman et Harsha [8]. Les mécanismes présentent un bon outil pour simuler la combustion turbulente car ne contenant que très peu d'espèces et de réactions chimiques. Ces mécanismes permettent la prise en compte de la chimie d'une manière satisfaisante même dans des situations d'écoulements réels. Alors ces schémas peuvent être intégrés dans les codes de calculs industriels pour modéliser la combustion dans des configurations plus complexes (moteurs, turbine à gaz, centrales thermique...). Canon et al [9] ont étudié numériquement l'interaction de la flamme avec l'injecteur pour une combustion pauvre prémélangée du méthane en utilisant une chimie tabulée avec un mécanisme réactionnel réduit à cinq réactions élémentaires, déduit du Grimech. L'efficacité des mécanismes réduits dans la combustion pauvre est aussi soulignée par Sanchez et al [10]. Une version modifiée du code de calcul KIVA II et adapté à la combustion turbulente dans les brûleurs été utilisée. Le modèle de turbulence k-ε avec une cinétique chimique a été utilisé pour décrire le mécanisme réactionnel du méthane, basée sur le schéma réduit à deux étapes. Fichet [11], a utilisé la méthode ILDM (terme tabulé) pour introduire les termes sources de NO et de CO directement dans le code Saturne pour démontrer le potentiel des nouveaux modèles de la prédiction des émissions polluantes.

## 2. Méthodologie

### 2.1. Construction du mécanisme réduit

Les mécanismes détaillés sont les plus prédictifs vue leurs domaines de validité, ainsi que leurs précision, mais nécessite un très grand temps de calcul et des calculateurs très puissants. Pour cela, des études ont été faites pour simplifier et réduire les mécanismes détaillés. Cependant, l'intérêt principal est d'élaborer des mécanismes réduits sans perdre les propriétés principales du phénomène de la combustion avec un domaine de validation large. Dans le présent travail, nous avons fait une réduction du mécanisme détaillée GRI 3.0 par la méthode de réduction en utilisant les vitesses des réactions PCAF [12]. Cette méthode est basée sur l'élimination des espèces et des réactions redondantes pour le cas d'une flamme de prémélange laminaire. Nous avons d'élaboré un mécanisme réduit à 90 réactions, qui a été validé on le comparant au le mécanisme détaillé.

Dans cette partie, nous considérons le mécanisme réduit à 90 réactions comme une base pour l'application de la méthode de réduction CSP (Computational Singular Perturbation) [13]. Cette méthode basée sur la division de l'espace des fractions massiques des espèces en deux sous espaces. Le premier sous espace produit la formulation mathématique de tous les paramètres nécessaires pour la construction de mécanisme réduit. Le deuxième (lent) sous espace produit les paramètres nécessaires pour la construction de mécanisme réduit. Le mécanisme réduit globale construit contient neuf étapes (9-Step) [14] couplé avec le mécanisme de Zeldovitch (NO-prompt) [15]. Ce mécanisme est construit sur la base des 14 espèces majoritaires. Le mécanisme donné par l'algorithme S-STEP est décrit par les étapes globales suivantes :



## 3. Modélisation de la combustion turbulente

### 3.1. Modèle lagrangien

Les modèles lagrangiens pour l'évolution des particules fluides ont été proposés comme support des modèles représentant les phénomènes turbulents. Villermaux [16] a proposé un modèle appelé IEM (Interaction par Echange avec la Moyenne). Ce modèle (IEM) a été appliqué par Vervisch [17] pour la combustion du méthane. L'équation de bilan instantané pour les  $Y_i$  est donnée par :

$$\rho \frac{dY_k}{dt} = \rho \frac{\tilde{Y}_k - Y_k}{\tau_{ex}} + \rho \dot{\omega}_k \quad k = 1, n \quad (1)$$

avec  $(\tilde{Y}_i - Y_i)/\tau_t$  qui présente le terme de diffusion,  $n$  est le nombre d'espèces chimiques impliquées dans le mécanisme en question.  $\tau_t$  est le temps caractéristique lié à la diffusion des espèces. Pour calculer ce temps, nous avons utilisé une formule déduite des automates cellulaire [18].

### 3.2. Méthode des pdfs présumées

Le problème posé par le grand nombre de paramètre, et par le temps de calcul limite l'application des Pdfs calculés. D'où ca nécessite d'utiliser les Pdfs présumées pour réduire le temps de calcul et pour la simplicité de leurs applications. Plusieurs formes de PDF définies par trois paramètres seulement ont déjà été utilisées ; par exemple celle proposée par Borghi et Dutoya [19] appliqué au cas de foyers. Les formes plus complexes pourraient être considérées ici en utilisant l'approche généralisée de PDF partielle introduite par Mura et Borghi [20]. Les pdfs composés de pics rectangulaires doit satisfaire les trois équations suivantes :

$$\int_0^1 P(R_{O_2}) dR_{O_2} = 1 \quad (2)$$

$$\int_0^1 P(R_{O_2}) R_{O_2} dR_{O_2} = \tilde{R}_{O_2} \quad (3)$$

$$\int_0^1 P(R_{O_2}) (R_{O_2} - \tilde{R}_{O_2})^2 dR_{O_2} = \tilde{R}_{O_2}^{\prime 2} \quad (4)$$

Les trois paramètres a, b et c sont des fonctions de  $\tilde{Y}_k$  et  $\tilde{Y}_k^2$ .  $\tilde{R}_{O_2}$  est donné par les équations eulériennes.  $\tilde{R}_{O_2}^2$  nécessite une équation de transport établie à partir de celle de  $\tilde{R}_{O_2}$  en posant  $R_{O_2} = \tilde{R}_{O_2} + R'_{O_2}$  et  $R_{O_2} = Y_{O_2} - Y_{O_2}^b / Y_{O_2}^0 - Y_{O_2}^b$  avec  $R_{O_2} = 0$  relatif aux gaz brûlés et  $R_{O_2} = 1$  relatif aux gaz frais.

L'équation de  $\tilde{Y}_{O_2}^2$  est de la forme :

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{Y}_{O_2}^2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_{O_2}^2) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}'_i \tilde{Y}_{O_2}^2) = -2 \bar{\rho} \tilde{u}'_i \tilde{Y}'_{O_2} \frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}}{\partial x_i} - 2 d \bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}'_{O_2}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Y}'_{O_2}}{\partial x_i} + 2 \bar{\rho} \tilde{Y}'_{O_2} \tilde{\omega}' \quad (5)$$

En modélisant les termes de diffusion et de dissipation d'une manière classique :

$$\tilde{u}'_i \tilde{Y}'_{O_2} = d \frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}^2}{\partial x_i} \quad (6)$$

$$d \frac{\partial \tilde{Y}'_{O_2}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Y}'_{O_2}}{\partial x_i} = \varepsilon_y = Z_f \frac{\tilde{Y}_{O_2}^2}{\tau_t} \quad (7)$$

$\varepsilon_y$  le terme de dissipation des fluctuations du scalaire réactifs,  $Z_f$  la constante qui dépend du type de la combustion [21]. Les profils de la densité de probabilité (pdf) qui permet de calculer une valeur moyenne de  $\tilde{\omega}$  de la production chimique de l'espèce  $i$  par l'intégrale suivante :

$$\tilde{\omega} = \int_0^1 P(R_{O_2}) \omega(R_{O_2}) dR_{O_2} \quad (8)$$

Les quatre formes de pdf présumées sont représentées sur la figure 1.

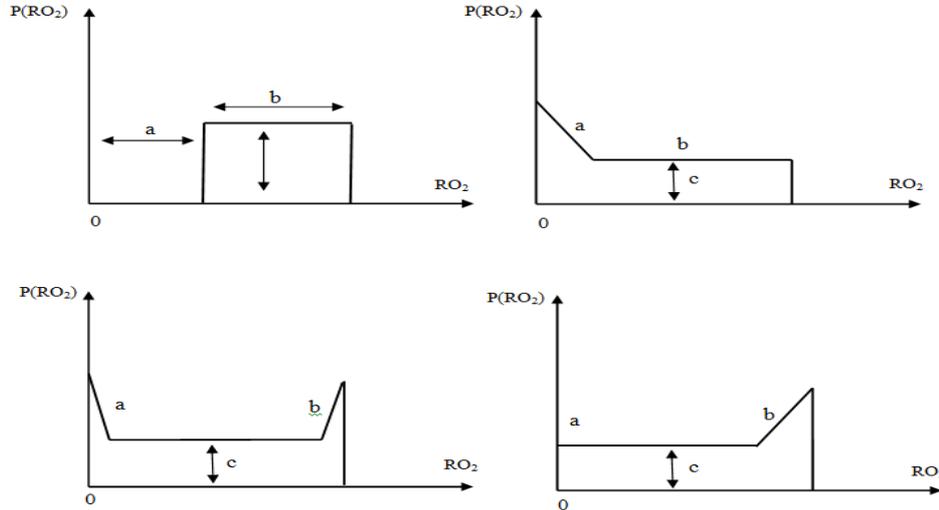


Figure 1 : pdfs présumés

## 4. Résultats et discussion

### 4.1. Description de la chambre de combustion de CNG :

La chambre de combustion utilisée dans notre travail est une chambre cylindrique utilisée pour la combustion de gaz naturel (CNG). Cette chambre est utilisée dans les véhicules bi-carburés, mais brûlant un seul combustible à la fois. Le moteur est à combustion interne d'essence. Cela signifie qu'il peut fonctionner indifféremment soit à l'essence, soit au GNV. Cette chambre a pour dimension un diamètre de 102 mm et une hauteur de 187.24 mm[22], avec les conditions de fonctionnement du moteur suivante :

- Le mélange de combustible à la stoechiométrie contient (89 % CH<sub>4</sub>, 2.7 % C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, 1.7 % C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>)
- Le taux de compression est 10.5
- Le régime du moteur est 3000 tr/min
- L'allumage effectué à : 25 degré vilebrequin avant le PMH (le point mort haut)

### 4.2. Comparaison des résultats numériques avec l'expérience

Dans la première partie de notre calcul nous avons fait une comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux [22], pour les profils de pression, de température et pour les profils des espèces NO et CO en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin. Ces résultats sont présentés sur les figures 2-5, et montrent que

leurs valeurs maximales et leurs évolutions sont réalistes. On note aussi que les ordres de grandeur présentent une concordance acceptable. L'évolution des fractions molaires de CO et NO augmentent régulièrement jusqu'à la fin de la phase de combustion. La concentration de NO reste faible au début d'allumage (température faible), après un certain temps, elle augmente avec l'augmentation de la température. A la phase de détente la concentration de NO reste constante car cette phase est caractérisée par des températures faibles, alors la réaction de cet élément est inerte à ces températures. La concentration de l'espèce CO augmente avec l'augmentation de la température atteint un maximum pour l'angle de vilebrequin et diminue ensuite.

Dans la deuxième partie des résultats, nous avons fait une comparaison avec les résultats de simulation obtenus par le mécanisme GRI 3.0 [23], Les figures 6 et 7 présentent la comparaison entre les résultats obtenus par les deux calculs de la température et de la pression. On constate que ces deux caractéristiques présentent un maximum très proche (39.8 atm et 3250 k pour le mécanisme GRI3.0, 40 atm et 3215 k pour le mécanisme réduit) pour l'angle du vilebrequin zéro. Ces résultats sont présentés dans les figures 8-10 pour les espèces majoritaires ( $\text{CO}_2$ , CO, NO) en fonction de l'angle de rotation du vilebrequin. On peut constater que les évolutions des différentes espèces prédites présentent des comparaisons acceptables.

## 5. Conclusion

Le modèle eulérien lagrangien couplé à la méthode des pdfs présumées et avec un schéma cinétique réduit à neuf réactions, ont donné différents résultats pour les espèces majoritaires dans le mécanisme réduit, les résultats des espèces polluantes et radicalaires présentés dans le front de flamme, l'évolution de la température et la pression. On note que la comparaison entre la simulation et l'expérience montre une concordance acceptable pour différentes comparaisons entre les résultats numériques et expérimentaux, ainsi la comparaison entre les résultats de simulation de mécanisme GRI 3.0 et mécanisme réduit à neuf réactions.

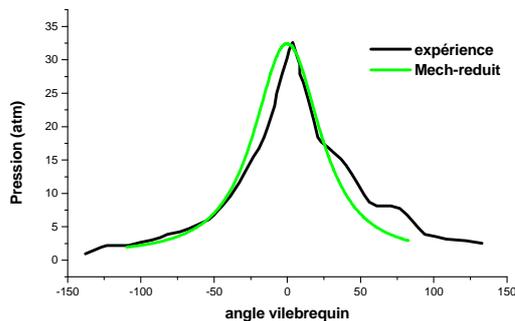


Figure 2 : Comparaison de la pression calculée et de l'expérience [22]

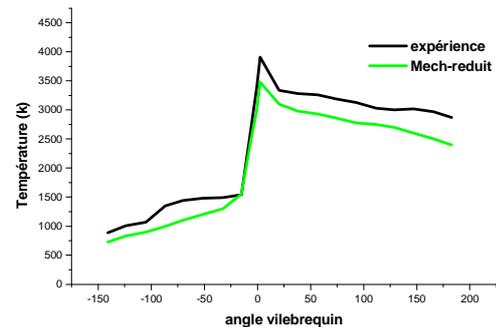


Figure 3 : Comparaison de température calculée avec l'expérience [22]

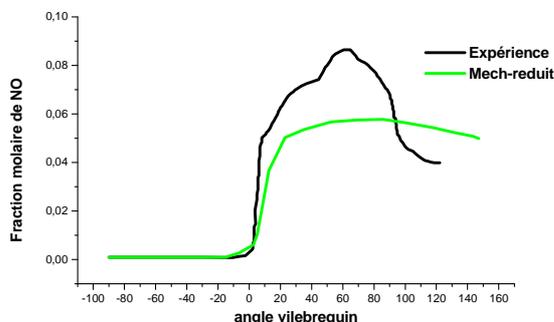


Figure 4 : Comparaison de fraction molaire de NO calculée avec l'expérience [22]

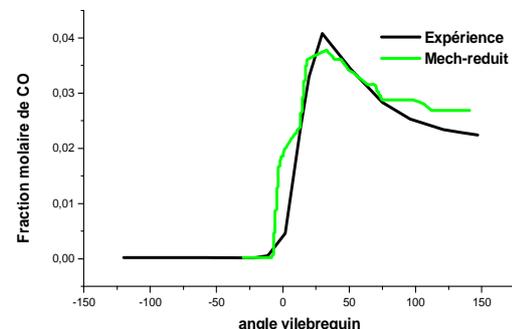


Figure 5 : Comparaison de fraction molaire de CO calculée avec l'expérience [22]

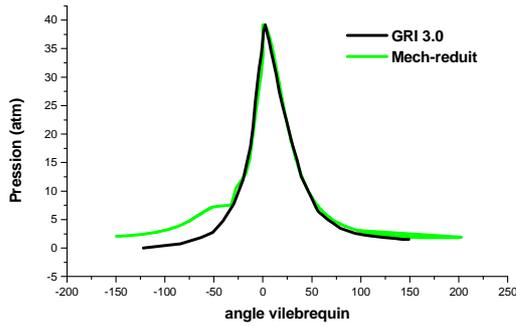


Figure 6 : Comparaison de pression calculée par les deux mécanismes réduit et détaillé [23]

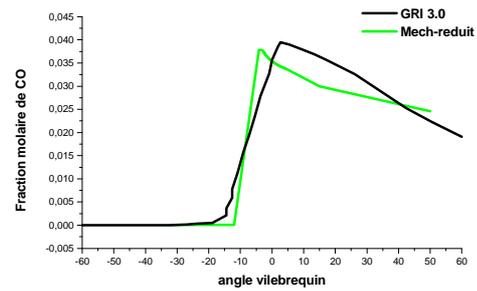


Figure 9 : Comparaison de CO calculée par les deux mécanismes réduit et détaillé [23]

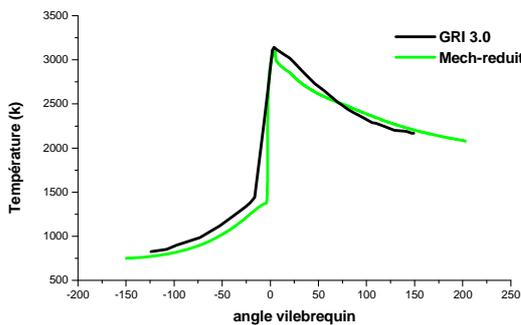


Figure 7 : Comparaison de température calculée par les deux mécanismes réduit et détaillé [23]

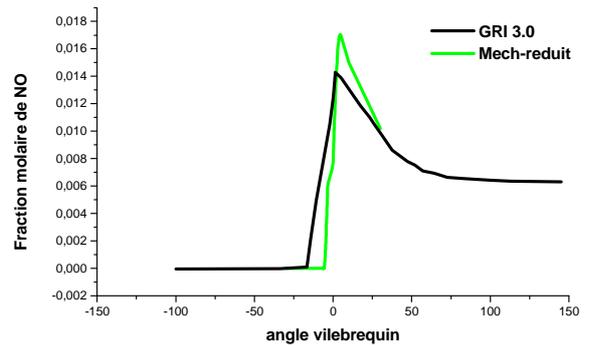


Figure 10 : Comparaison de NO calculée par les deux mécanismes réduit et détaillé [23]

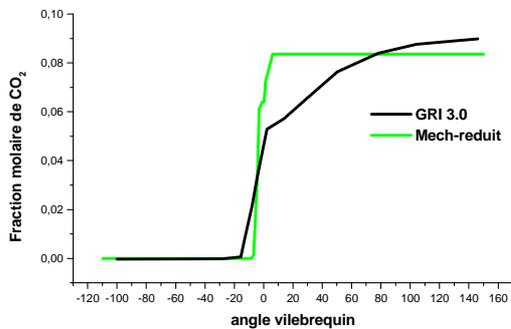


Figure 8 : Comparaison de CO<sub>2</sub> calculée par les deux mécanismes réduit et détaillé [23]

## Références

- [1] E. F. Christos, and B . Konstantinos, "Analysis and Reduction of the CH<sub>4</sub>-Air Mechanism at Lean Conditions", *Combustion Science and Technology*, Vol. 159, 2000, 281-303.
- [2] C. K. Westbrook, Report No. PB-86-168770/XAB, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, Cal., USA, 1985
- [3] J. A. Miller, C. T. Bowman. *Prog Energy Combust Sci*, 1989, 15(4): 28.
- [4] C. T. Bowman, R. K. Hanson, D. F. Davidson, W. C. Gardiner, V .Jr Lissianski, G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenlach, M. Goldenberg. GRI-Mech Home page, [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)
- [5] J . Duterque, B .Roland, T .Helene. *Combust Sci Technol*, 1981, 26(1-2): 1
- [6] N. Peters, R. Glowinski, B . Larrouturou, R . Temam, ed. *Lecture Notes in Physics*, Vol 241. 1985. 90
- [7] W. P. Jones, R. P. Lindstedt. *Combust Flame*, 1988, 73(3): 233.
- [8] R. B. Edelman, P. T. Harsha. *Prog Energy Combust Sci*, 1978, 4(1): 1.

- [9] S.M. Cannon et al, PDF Modeling of lean premixed combustion using in situ tabulated chemistry, *Comb & Flame* 119:223-252(1999).
- [10] A.L. Sanchez et al, The reduced kinetic description of lean premixed combustion, *Comb & Flame* 123:436-464 (2000).
- [11] V.Fichet, Modélisation de la combustion du gaz naturel par réseaux de réacteurs avec cinétique chimique détaillée, thèse de l'Ecole Centrale des Arts et Manufactures (2010).
- [12] A. A. Konnov, Refinement of the kinetic Mechanism of hydrogen combustion. *Khimicheskaya Fizika* 2004 123(8) : 5-18.
- [13] S. H. Lam and D. A. Goussis, "Understanding Complex Chemical Kinetics with Computational Singular Perturbation," 22nd Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1988, 931.
- [14] A. Ait Msaad, A. Belcad, M. Mahdaoui, E. Aaffad, M. Mouqallid, 'Reduced Detailed Mechanism for Methane Combustion', *Energy and Power Engineering*, 2012, 4, 28-33.
- [15] Y.B. Zeldovitch (1946), 'The oxidation of nitrogen in combustion and explosion', *Acta Physicochimica URSS*, 21, 557-628.
- [16] J. Villermaux, (1966), "Micromixing phenomena in stirred reactors", *Encycl. of fluid mechanics*, Gulf Publishing Corp. West Orange (NJ)
- [17] L. Vervisch, (1991) "Prise en compte d'effets de cinétique chimique dans les flammes de diffusion turbulentes par l'approche fonction densité de probabilité", doctoral thesis, University of Rouen.
- [18] R. Said and R. Borghi, "A simulation with a 'cellular automaton' for turbulent combustion modeling", in twenty-second Symposium (International) on combustion, pages 569-577. The combustion Institute, 1988.
- [19] R. Borghi, D. Dutoya (1978), "On the scales of the fluctuations in turbulent combustion", 17th Symp. (Int.) on Combust., 235-244, The Combustion Institute, Pittsburgh.
- [20] A. Mura, and R. Borghi, (2004), "Introducing a new partial PDF approach for turbulent combustion modelling", *Combust. Flame*, 136, 377-382.
- [21] E. Affad, 'Modélisation de la combustion turbulent dans les moteurs à allumage commandé avec prise en compte d'une cinétique complexe-prédiction des polluants', thèse de l'Université Rouen (1995).
- [22] M. Mansha, A. R. Saleemi, Javed.S.H, Badar M. Ghauri "Prediction and measurement of pollutant emissions in CNG fired internal combustion engine" *Journal of Natural Gas Chemistry* 19(2010)539-547
- [23] M. Mansha, H. S. Javed, A. R. Saleemi, Badar M. Ghauri "Detailed Kinetic Mechanism of CNG Combustion in an IC Engine", *Advances in Chemical Engineering and Science* , 2011, 1, 102117.