

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE HOUARI BOUMEDIENE  
FACULTÉ DE GÉNIE MÉCANIQUE ET DE GÉNIE DES PROCÉDÉS



# THÈSE DE DOCTORAT

PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION DU DIPLOME DE DOCTEUR  
EN : GÉNIE MÉCANIQUE  
SPÉCIALITÉ : THERMO-ÉNERGÉTIQUE

Réalisée par  
**Sidahmed MEZIANE**

---

## ÉTUDE ET MODÉLISATION DE LA COMBUSTION DANS LES MICRO-TURBINES

---

Soutenue publiquement, le 10/06/2020, devant le jury composé de :

M.	R.	DIZENE	Professeur	à l'USTHB	Président
M.	A.	BENTEBBICHE	Professeur	à l'USTHB	Directeur de thèse
M.	M.	ATIF	Professeur	à l'USTHB	Examineur
M.	M.	BALISTRO	Professeur	à l'ENSSMAL	Examineur
M.	S.	HANCHI	Professeur	à l'EMP	Examineur

## Résumé

### Étude et modélisation de la combustion dans les micro-turbines

Ce travail de thèse a permis de développer une modélisation numérique de la combustion turbulente au sein d'une chambre de combustion du type RQL d'une micro-turbine à gaz. En effet, la combustion d'un carburant mélangé d'hydrogène et de gaz naturel ( $CH_4$ ) a été étudiée. Un calcul numérique a été réalisé en variant le pourcentage d'hydrogène dans le mélange avec des proportions de 10% à 90% avec un pas de 10%. Pour cela, Un mécanisme de réaction chimique réduit a été élaboré. Un modèle de turbulence SST  $k-\omega$  et un modèle réactionnel Eddy dissipation-Finite rate ont été adoptés. Quand le carburant mélangé est injecté à un débit massique constant, la température dans la chambre augmente, mais la distribution de la température à la sortie de la chambre risque de ne pas satisfaire la résistance thermique des aubes de la turbine. En outre, quand le carburant mélangé est injecté à une vitesse constante, la distribution de la température à la sortie devient uniforme. En outre, les polluants comme le CO et NO diminuent continuellement. Par contre, la diminution de la température à la sortie de la chambre de combustion risque de diminuer la puissance de la microturbine. D'autre part, des modifications dans la géométrie de la chambre de combustion sont nécessaires.

**Mots clés :** Microturbine à gaz, combustion, fuel mélangé, Simulation numérique.

## **Abstract**

### **Study and modélisation of combustion in micro gas turbines**

Firstly, our work in this thesis is made it possible to carry a combustion modeling in a RQL-type combustion chamber of a micro gas turbine. Indeed, the combustion of a blended fuel of hydrogen and natural gas has been studied. A numerical simulation was performed by varying the percentage of hydrogen in the mixture from 10% to 90% with a step of 10%. For this purpose, a reduced chemical reaction mechanism has been developed. A turbulence model SST  $k-\omega$  and Eddy dissipation-Finite rate reaction model were adopted. When the mixed fuel is injected at a constant mass flow rate, the temperature in the chamber increases, but the temperature distribution at the outlet of the chamber may not satisfy the thermal resistance of the turbine blades. Otherwise, when the mixed fuel is injected at a constant fuel velocity, the temperature distribution at the outlet will becomes more uniform. In addition, pollutants such as CO and NO are continuously decreasing. On the other hand, the decrease in temperature at the exit of the combustion chamber may reduce the power of the microturbine. Furthermore, modifications in the design of the combustion chamber are necessary.

**Keywords:** Micro gas turbine, Combustion, Blended fuel, Numerical simulation.

## ملخص

### دراسة ومحاكاة عددية للاحتراق في الميكرو تر بينات

أتاح هذا البحث في أطروحته أولاً إجراء نموذج للاحتراق في غرفة احتراق من نوع RQL لميكرو تربين غاز. في الواقع، تمت دراسة احتراق وقود مختلط من الهيدروجين والغاز الطبيعي. تم إجراء المحاكاة العددية عن طريق تغيير نسبة الهيدروجين في الخليط من 10 بالمئة إلى 90 بالمئة بخطوة تقدر ب 10 بالمئة. تم تطوير آلية تفاعل كيميائي مخفضة، كما تم الاعتماد على نموذج SST k-omega للاضطراب ونموذج تفاعل كيميائي ED-FR. عندما يتم حقن الوقود المختلط بمعدل تدفق كثلة ثابت، تزداد درجة الحرارة في غرفة الاحتراق، لكن توزيع درجة الحرارة عند مخرج الغرفة قد لا يفي بالمقاومة الحرارية لشفرات التربين. من جهة أخرى عندما يتم حقن الوقود المختلط بسرعة ثابتة، يصبح توزيع درجة الحرارة في المخرج متناسقا. بالإضافة إلى ذلك، الملوثات مثل CO و NO تتناقص باستمرار. من ناحية أخرى، فإن انخفاض درجة الحرارة عند مخرج الغرفة يهدد بتقليل قوة الميكرو تربين و لهذا من الضروري إجراء تغييرات في تصميم الغرفة. الكلمات الرئيسية: الميكرو تربين، الاحتراق، وقود مختلط، المحاكاة العددية.

*À ma Mère.*

*À mon Père et à Khali Ali, "Allah yerhamhom".*

# Remerciements

Arrivant au terme de ce travail, je souhaiterais exprimer ma gratitude et mes remerciements à **ALLAH** qui m'a donné la force et le courage qui m'ont permis d'arriver au bout du chemin entrepris.

Je souhaiterais tout d'abord remercier monsieur Abdelhalim BENTEBBICHE, directeur de thèse, pour son encadrement et pour sa disponibilité ainsi que sa compréhension. Il a été plus qu'un directeur de thèse, il a été un mentor. En plus de me faire découvrir le monde de la recherche, il m'a également poussé à me lancer dans l'enseignement.

Je voudrais remercier l'ensemble du jury en commençant par le président, monsieur Rabah DIZENE, et messieurs Samir HANCHI, Mourad BALISTRO et Madjid ATIF d'avoir accepté d'être membres de jury et qui en cette qualité ont consacré de leur temps à lire ce document avec une grande attention.

Mes remerciements s'adressent à tous les doctorants et les enseignants du laboratoire de mécanique énergétique et système de conversion de l'énergie (LMESC). Je remercie en particulier monsieur Rédha M. Raïs, auprès duquel j'ai appris beaucoup de choses sur la recherche scientifique par la seule envie de savoir.

Je remercie chaleureusement tous mes frères d'armes (doctorants et docteurs), d'abord pour l'aide qu'ils m'ont apportée ou pour les bons moments passés ensemble. Sans ordre de préférence, j'ai envie de citer Abdelrrahmane ZIDANE, Zineddine BOUYAHYAOUI, Soufyane DJELLOULI, Bilel ZOZOU, Amir NOUIRI, Housseem DRICI, Billel AMIRI, Amirouche GOUMGHAR, Youcef GHEZALI, Fatih LEMIZE, Abdelkader HAMZAOU, Sid Ali SI SALAH.

Je remercie mon cher ami, mon frère Abdelhak BOUSBACI pour m'avoir encouragé de près et de loin durant toutes ces années. Je voudrais aussi remercier Abdessamad DERDER, Zakaria LARBI, Abderraouf ARABI, Housseem AMROU et Mehdi BENZEMA.

Je remercie la clique de LSGM : Imene SOAL, Mohamed MEHENNI, Djawed FE RHAT et Fatah TOUGHERGHI. Je voudrais remercier Fatima BENOUIS et Nawel RAHMOUNE. Je remercie la clique de la FSTGAT. La plupart, plus que des collègues, sont devenus de véritables amis.

Je remercie ma famille, mes parents d'abord, mon frère Farid et mes soeurs Lynda et Warda, mes oncles Amrane et mohammed, mes cousins et cousines pour m'avoir encouragé et m'avoir supporté durant toutes ces années. Ils ont fait preuve d'une patience infinie.

# Table des matières

<b>Remerciements</b>	<b>i</b>
<b>Table des matières</b>	<b>iii</b>
<b>Liste des figures</b>	<b>vii</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>xi</b>
<b>Nomenclature</b>	<b>xii</b>
<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>I Étude Bibliographique</b>	<b>5</b>
I.1 Microturbines et chambre de combustion . . . . .	6
I.1.1 Généralités . . . . .	6
I.1.2 Types de microturbine à gaz . . . . .	7
I.1.3 Types de chambre de combustion . . . . .	8
I.2 La combustion d'hydrogène . . . . .	9
I.2.1 Vitesse de flamme laminaire . . . . .	10



I.2.2	Extinction et retour de flamme . . . . .	13
I.2.3	Point d'auto inflammation . . . . .	14
I.3	La combustion dans les microturbines à gaz . . . . .	15
I.4	Synthèse de l'étude bibliographique . . . . .	25
I.5	Motivation de l'étude . . . . .	26
<b>II</b>	<b>Modélisation de la combustion turbulente</b>	<b>27</b>
II.1	Les écoulements réactifs . . . . .	28
II.2	Type de combustion . . . . .	28
II.2.1	Flamme de diffusion . . . . .	28
II.2.2	Flamme pré-mélangée . . . . .	29
II.2.3	Flamme partiellement pré-mélangée . . . . .	29
II.3	Équations gouvernantes . . . . .	29
II.3.1	Équations de la continuité . . . . .	30
II.3.2	Équations de la conservation de la quantité de mouvement . . . . .	30
II.3.3	Équations de conservation de l'énergie . . . . .	31
II.4	Modélisation de la turbulence . . . . .	32
II.4.1	Équations de Navier-Stokes moyennées au sens de Favre . . . . .	32
II.4.2	Modélisation de la turbulence par l'approches RANS . . . . .	34
II.5	Modélisation de la combustion . . . . .	35
II.6	Modèles NOx . . . . .	40

<b>III Procédures numériques</b>	<b>42</b>
III.1 Méthode des volumes finis et discrétisation . . . . .	43
III.2 Description du problème . . . . .	43
III.3 Géométrie et maillage . . . . .	46
III.4 Conditions aux limites . . . . .	49
III.5 Configuration des paramètres numériques . . . . .	52
III.6 Comparaison des modèles de turbulence . . . . .	53
III.7 Validation des résultats primaire . . . . .	54
<b>IV Résultats et discussions</b>	<b>58</b>
IV.1 La combustion du mélange Gaz naturel-Hydrogène . . . . .	59
IV.1.1 Injection de carburant à débit massique constant . . . . .	59
IV.1.2 Injection de carburant à vitesse constante . . . . .	64
IV.2 Comparaison sur les effets d'addition d'hydrogène . . . . .	69
IV.2.1 La combustion de gaz naturel-Hydrogène (STAR CCM+) . . . . .	69
IV.2.2 La combustion de gaz de synthèse-Hydrogène (STAR CCM+) . . . . .	72
IV.3 Conclusions . . . . .	76
<b>Conclusion générale</b>	<b>78</b>
<b>Annexes</b>	<b>82</b>
<b>A Propriétés thermodynamiques</b>	<b>83</b>

<b>B Mécanismes réactionnels</b>	<b>89</b>
<b>C Le mécanisme <i>Reduced GRIMECH 3.0</i></b>	<b>91</b>
<b>D Logiciels utilisés</b>	<b>97</b>
<b>E Article</b>	<b>99</b>

# Liste des figures

I.1	Cycle de Brayton pour Microturbine à gaz . . . . .	7
I.2	Types de Microturbine à gaz. . . . .	8
I.3	Types de chambres de combustion. . . . .	9
I.4	Vitesse de flamme laminaire pour le mélange CH <sub>4</sub> /H <sub>2</sub> dans des conditions atmosphériques en 300K [14] . . . . .	10
I.5	Résultats expérimentales de la vitesse de flamme pour différents mélanges	11
I.6	Résultats expérimentales et numériques de la vitesse de flamme laminaire de H <sub>2</sub> /air dans la pression atmosphérique et au-dessous . . . . .	11
I.7	La vitesse de flamme laminaire de H <sub>2</sub> /air pour différentes pressions.[15]	12
I.8	La vitesse de flamme laminaire de H <sub>2</sub> /air pour différentes pressions et température.[16] . . . . .	12
I.9	La vitesse de flamme laminaire de H <sub>2</sub> /air pour différentes pressions et température.[17] . . . . .	13
I.10	LBO (U <sub>0</sub> =6m/s) et flashback (U <sub>0</sub> =2m/s) en fonction de la fraction molaire d'hydrogène et de la ratio d'équivalence. Température : 460 K et pression 0,44 MPa. . . . .	14
I.11	Délai d'inflammation de méthane et de l'hydrogène. [26] . . . . .	15

I.12	Schéma de la microturbine à gaz [27] . . . . .	16
I.13	(a)Température à la sortie de la chambre de combustion et (b)Emissions NO <sub>x</sub> et CO à la sortie de la chambre de combustion [27] . . . . .	16
I.14	La chambre de combustion de la microturbine Capstone C30 [28] . . .	17
I.15	Température pour différents cas de carburants [29] . . . . .	18
I.16	La chambre de combustion et les résultats [30]. . . . .	19
I.17	La chambre de combustion modifiée (en haut) la chambre de combustion de la microturbine originale modèle Garrett GTP 30–67 (en bas) [31] . .	20
I.18	(a) CO et NO émissions pour MGT originale (b) CO et NO émissions pour MGT modifiée [31] . . . . .	21
I.19	La chambre de combustion d'une MGT [32] . . . . .	22
I.20	Résultats numériques sur la chambre de combustion [32] . . . . .	23
I.21	(a)Chambre de combustion modifiée (b)Chambre de combustion origi- nale (c)MGT ELLIOTT TA 80 R.[33] . . . . .	24
II.1	Flamme de diffusion. . . . .	28
II.2	Flamme de pré-mélange. . . . .	29
III.1	Microturbine à gaz ELLIOTT TA 80R [42]. . . . .	44
III.2	Chambre de combustion de la MGT ELLIOTT TA 80R. . . . .	45
III.3	(a)Domaine périodique de la chambre de combustion. (b)Zones RQL. .	45
III.4	(a)Injecteur pour gaz naturel. (b)Injecteur pour gaz de synthèse. [42]. .	46
III.5	Maillage de la chambre de combustion. . . . .	47
III.6	Analyse de la sensibilité de maillage. . . . .	48

III.7 Analyse de maillage sur la vitesse de l'écoulement. . . . .	48
III.8 Maillage de la chambre de combustion en utilisant Star CCM+. . . . .	49
III.9 Fraction massique de GN vs. Hydrogène dans le mélange. . . . .	51
III.10 Fraction massique de SG vs. Hydrogène dans le mélange. . . . .	52
III.11 Profils de vitesses par rapport aux modèles de turbulence. . . . .	54
III.12 Comparaison de la température moyenne de sortie et de la fraction molaire de $CO_2$ pour des résultats numériques et expérimentaux [42] . . .	55
IV.1 Distribution de la température à débit massique constant. . . . .	60
IV.2 Distribution des fractions massiques de (a) $CH_4$ et de (b) $H_2$ à 40% d'hydrogène. . . . .	61
IV.3 Variations de la température et de facteur de forme à débit massique constant. . . . .	62
IV.4 Distribution de la température à la sortie de la chambre de combustion. . . . .	63
IV.5 Émissions de $CO$ et $NO$ avec GRIMECH 3.0 réduit à débit massique constant. . . . .	63
IV.6 Émissions de $CO_2$ et de $NO$ avec un débit massique d'injection constant [49]. . . . .	64
IV.7 Distribution de la température à vitesse constante. . . . .	65
IV.8 Variations de la température et de facteur de forme à vitesse constante. . . . .	66
IV.9 Distribution de la température à la sortie de la chambre de combustion. . . . .	67
IV.10 Émissions de $CO$ et $NO$ avec GRIMECH 3.0 réduit à vitesse constante. . . . .	67
IV.11 Émissions de $CO$ et $NO$ avec 9-steps. . . . .	68

IV.12Émissions de $NO_x$ en fonction du pourcentage d'hydrogène [50] . . . . .	69
IV.13Distribution de la température à débit massique constant (STAR CCM+). 70	
IV.14Variations de la température et de facteur de forme à débit massique constant (STAR CCM+). . . . .	71
IV.15Distribution de la température à la sortie de la chambre de combustion (STAR CCM+). . . . .	71
IV.16Émissions de $CO$ et $NO$ (STAR CCM+). . . . .	72
IV.17Distribution de la température à débit massique constant (STAR CCM+). 73	
IV.18Variations de la température et de facteur de forme à débit massique constant (STAR CCM+). . . . .	74
IV.19Distribution de la température à la sortie de la chambre de combustion (STAR CCM+). . . . .	74
IV.20Émissions de $CO$ et de $NO$ (STAR CCM+). . . . .	75
IV.21L'injecteur radial (a) et L'injecteur axial (b) . . . . .	75

# Liste des tableaux

I.1	Température, émissions CO et NO pour différents cas de carburants [28]	17
I.2	Résultats numériques et expérimentales sur la chambre de combustion originale et modifiée [33]	24
III.1	Conditions aux limites du domaine en charge maximale.	50
III.2	Comparaison de compositions et propriétés.	50
III.3	Composition et propriétés de gaz de synthèse.	52
III.4	Comparaison des paramètres à la sortie de CC.	56
A.1	Propriétés thermodynamiques des espèces $s$ [51]	84
A.2	Format des bases thermodynamiques [51]	85
A.3	Base thermodynamique de NASA Glenn [51]	86
B.1	Le mécanisme de 9 étapes avec 11 espèces et 9 réactions.	90
D.1	Liste des différents logiciels utilisés dans l'élaboration de cette thèse	98



# Nomenclature

## Lettres latines

$\beta_r$	Exponentiel de température dans la réaction $r$	
$\Delta h_{f,K}^0$	Enthalpie de formation de l'espèce $K$	$kJ/mol$
$\dot{\omega}_T$	Taux de dégagement de chaleur à la combustion	$J/m^3s$
$\dot{m}$	Débit massique	$kg/s$
$\gamma_{j,r}$	l'efficacité du troisieme corps de l'espèce $j$ dans la réaction $r$	
$\lambda$	Conductivité thermique	$W/mK$
$\mu$	Viscosite dynamique	$Pa.s$
$\nu$	Viscosite cinématique	$m^2/s$
$\omega$	Taux spécifique de déssipation	
$\tau_{ij}$	Tenseur des forces visqueses	$N/m^2$
$\varepsilon$	Taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence	
$A_r$	Facteur pré exponentiel de la réaction $r$	
$A_i$	symbole désignant l'espèce $i$	
$C_p$	Chaleur spécifique à pression constante du mélange	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
$C_v$	Chaleur spécifique à volume constant du mélange	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
$C_{j,r}$	Concentration molaire de l'espèce $j$ dans la réaction $r$	$kg.mol/m^3$
$D_K$	Coéffient de diffusion de l'espèce $k$ dans le mélange	
$E_r$	Énergie d'activation de la réaction $r$	

$e_s$	Énergie interne de l'espèce $s$	$J/kg$
$H$	Enthalpie totale	$J/kg$
$k$	Energie cinétique turbulente	
$k_{b,r}$	Taux de réaction indirecte pour la réaction $r$	$cm^3.mole^{-1}.s^{-1}$
$k_{f,r}$	Taux de réaction directe pour la réaction $r$	$cm^3.mole^{-1}.s^{-1}$
$m$	Masse	$kg$
$M_i$	Masse molaire de l'élément $i$	$g/mol$
$N$	Nombre des espèces	
$p$	Pression statique	$Pa$
$P_{atm}$	Pression atmosphérique, 101325 Pa	
$R$	Constante universelle des gaz parfait	$J.mole^{-1}.K^{-1}$
$R_s$	Constante des gaz spécifique à l'espèce $s$	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
$T$	Température	$K$
$t$	Temps	$s$
$V_{K,i}$	Vitesse de diffusion de la composante $i$ de l'espèce $k$	
$X_s$	Fraction molaire de l'espèce $s$	
$Y_s$	Fraction massique de l'espèce $s$	
$\Delta H_r^0$	Variation d'enthalpie à l'état standard pour la réaction $r$	$kJ/mol$
$\Delta S_r^0$	Variation d'entropie à l'état standard pour la réaction $r$	$J.mol^{-1}.K^{-1}$
$\eta''_{j,r}$	l'exposant du taux des produits $j$ dans la réaction $r$	
$\eta'_{j,r}$	l'exposant du taux des réactifs $j$ dans la réaction $r$	
$K_r$	Constante d'équilibre pour la réaction $r$	
PCI	Pouvoir Calorifique Inférieur	$kJ/kg$

### Lettres grecques

$\dot{Q}$	Terme source de chaleur	$J/m^3.s$
-----------	-------------------------	-----------

$\nu_{s,r}$	Coefficient stœchiométrique de l'espèce $s$ à la réaction $r$	
$\rho$	Masse volumique du fluide	$kg/m^3$

### Indices

0	Condition totale
$f$	Fraction du mélange
$lz$	Zone pauvre
$max$	maximale
$moy, avg$	Moyenne
$out$	Outlet, Sortie de chambre de combustion
$r$	Réaction
$rz$	Zone riche
$F$	Fuel, Carburant
$O$	Oxydant, Air
$s,k$	Espèces

### Acronymes

$CO$	Monoxide de carbon
$H_2$	Hydrogène
$NO$	Monoxyde d'azote
$CC$	Chambre de combustion
$CFD$	Computational Fluid Dynamics
$ED-FR$	Eddy Dessipation-Finite Rate
$GN$	Gaz naturel
$LES$	Large Eddy Simulation
$MGT$	Microturbine à gaz
$PF$	Facteur de Pattern

<i>PPDF</i>	Presumed Probability Dansity Function
<i>RANS</i>	Reynolds Average Navier-Stokes
<i>RQL</i>	Rich, Quick quench, Lean
<i>RSM</i>	Reynolds Stress Models
<i>SG</i>	Gaz de synthèse
<i>SST</i>	Shear Stress Transport

# **Introduction générale**

De nos jours, l'un des principaux défis de la recherche scientifique notamment dans le domaine de l'énergie est de réaliser un système miniature, capable de produire de l'énergie électrique ou thermique nécessaire, mais aussi capable de satisfaire au règlement de l'environnement.

L'une des technologies les plus efficaces qui se trouve sur le marché de l'énergie est la microturbine à gaz. C'est un système miniature, compact et relativement simple qui fonctionne selon le cycle de Brayton ré génératif. Le premier prototype commercial de microturbine à gaz est lancé sur le marché en 1998. Elles sont habituellement alimentées au diesel de catégorie 2, au gaz naturel ou au gaz de pétrole liquéfié. Le gaz naturel est le carburant principal de choix pour sa disponibilité, son coût réduit et ses faibles émissions polluantes. Cependant, les réserves de gaz naturel (GN) sont en baisse avec l'augmentation de la consommation actuelle de carburant en raison des progrès technologiques, ainsi la nouvelle politique qui favorise les sources à faibles émissions de carbone. Par conséquent, la demande d'un carburant alternatif est l'une des principales préoccupations dans le futur proche, comme l'utilisation de l'hydrogène ou un carburant mélangé.

Les microturbines à gaz ont déjà été optimisées en fonction des limites actuelles en construction mécanique et en matériaux utilisés. Il en ressort donc que pour améliorer de tel engin, il nous faut donc améliorer la chambre de combustion servant à la conversion de l'énergie chimique en énergie thermique. Il faut savoir que dans la chambre de combustion de ces microturbines, qui mesure que quelques centaines de millimètres cubes, les écoulements sont beaucoup moins turbulents donc les gaz ont plus de difficultés à se mélanger. Cependant, le mélange est essentiel pour que la combustion aura lieu. Pour cela des structures dans la conception géométrique de la chambre de combustion ont été créés afin de favoriser le mélange des gaz.

Afin de développer des microturbines de plus en plus performantes, on se doit de mieux comprendre le phénomène de la combustion qui se produit dans ces dernières. Toutefois, les tests expérimentaux étant très onéreux, alors on a recours aux études numériques pour réaliser des simulations de la combustion.

Cette thèse a pour but d'étudier numériquement la combustion dans la chambre de combustion d'une microturbine à gaz du type Rich-Quick quench-Lean (RQL). Ce modèle a été choisi parce que son étude expérimentale est déjà disponible dans la littérature, donc une validation des résultats numériques est assurée. Pour la simulation numérique, on a utilisé une Work station du type Z820 de marque HP (12 cœurs, 32 go RAM), ce matériel est disponible au sein du laboratoire de mécanique énergétique et systèmes de conversion de l'énergie (LMESC). Une telle configuration est nécessaire pour simuler une combustion en trois dimensions (3D) dans une géométrie relativement complexe et plus dense en matière de maillage.

Le logiciel Ansys Fluent a été utilisé dans la réalisation de cette simulation numérique. Il est souvent considéré comme une référence dans le domaine de la modélisation de fluide. Il utilise la méthode des volumes finis caractérisés par son avantage à satisfaire la conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. L'un des intérêts de ce logiciel de simulation est qu'il dispose d'un nombre relativement important de modèles, pouvant faire face à divers aspects de la mécanique des fluides, notamment dans le domaine de la combustion.

Le logiciel Star CCM+ a été utilisé aussi pour la réalisation de d'autres simulations numériques, plus précisément lors d'utilisation de Gaz de synthèse comme combustible. Le choix de ce logiciel revient à sa configuration interne, autrement dit ; ce type de logiciel utilise un polynôme de sept coefficients pour le calcul de la capacité calorifique ( $C_p$ ), et cela engendre des résultats plus précis par rapport à Ansys Fluent qui utilise un polynôme de cinq coefficients.

Le combustible choisi est un carburant mélangé, il est obtenu par la substitution de l'hydrogène dans le gaz naturel avec un pas de 10%. L'aspect physicochimique entre le carburant et le comburant est défini par la réalisation d'un mécanisme de réaction chimique, c'est un modèle réduit du mécanisme de GRIMECH 3.0 qui comporte 21 espèces et 86 réactions.

La présente thèse est constituée d'une introduction générale, quatre chapitres et une conclusion générale. Le chapitre **I** de la thèse place l'étude bibliographique. Dans ce même chapitre, une recherche sur les microturbines à gaz, plus précisément sur le phénomène de la combustion dans ces derniers. Ce chapitre nous permet de cibler l'investigation menée dans cette thèse et donc de justifier l'approche numérique à utiliser.

Cette approche numérique est détaillée dans le chapitre **II**, on y présente les équations gouvernantes résolues, ainsi que les modèles utilisés pour décrire la turbulence et l'interaction turbulence-chimie.

Le chapitre **III** est réservé aux procédures numériques tels que le maillage et les conditions aux limites. On termine ce chapitre par une validation des résultats primaires avant d'entamer la suite des résultats.

Le chapitre **IV** quant à lui est réservé à la discussion des résultats obtenus, on en trouve : la combustion du mélange gaz naturel-hydrogène par deux étapes : à débit massique constant et à vitesse constante. Ainsi, la combustion de gaz de synthèse mélangé avec de l'hydrogène, on a utilisé le logiciel STAR CCM+ comme solveur dans ce dernier.

Enfin, nous achèverons notre manuscrit, par une conclusion générale, qui résumera les principaux résultats de notre étude, suivie par des perspectives proposées.



# Chapitre I

## Étude Bibliographique

### Sommaire

---

<b>I.1 Microturbines et chambre de combustion . . . . .</b>	<b>6</b>
I.1.1 Généralités . . . . .	6
I.1.2 Types de microturbine à gaz . . . . .	7
I.1.3 Types de chambre de combustion . . . . .	8
<b>I.2 La combustion d'hydrogène . . . . .</b>	<b>9</b>
I.2.1 Vitesse de flamme laminaire . . . . .	10
I.2.2 Extinction et retour de flamme . . . . .	13
I.2.3 Point d'auto inflammation . . . . .	14
<b>I.3 La combustion dans les microturbines à gaz . . . . .</b>	<b>15</b>
<b>I.4 Synthèse de l'étude bibliographique . . . . .</b>	<b>25</b>
<b>I.5 Motivation de l'étude . . . . .</b>	<b>26</b>

---

## I.1 Microturbines et chambre de combustion

### I.1.1 Généralités

Pour relever les défis mondiaux en matière de sécurité énergétique, de changements climatiques et de croissance économique, il est nécessaire de mettre au point des technologies efficaces, écologiques et à faible émission de carbone, telle que les biocarburants, le solaire photovoltaïque, le solaire thermique, l'énergie éolienne et les systèmes de stockage d'énergie [1]. Ainsi, on prévoit une réduction de 23% de la consommation mondiale de combustibles fossiles jusqu'en 2040; tant que les nouvelles politiques énergétiques maintiendront la tendance à privilégier les sources à faible émission de carbone, la biomasse se distinguera avec une croissance de 62,5% sur la même période, avec une participation particulière dans le secteur de la production électrique [2]. La tendance croissante à mettre en œuvre des systèmes de production décentralisée et leur possibilité d'intégration à des systèmes centralisés font de cette modalité de production un bon candidat pour répondre aux besoins énergétiques futurs, en particulier pour les communautés éloignées des grands centres urbains, tout en différant les investissements dans les grandes centrales électriques et en améliorant la disponibilité et la qualité du réseau électrique [3].

Les microturbines à gaz (MGT) sont des générateurs électriques de petite taille, compacts et relativement simples qui fonctionnent à une puissance inférieure à 500 kW. Ces groupes sont habituellement alimentés au diesel de catégorie 2, au gaz naturel ou au gaz de pétrole liquéfié. Le premier prototype commercial de microturbine à gaz stationnaire a été développé par Capstone Turbine Corporation™ en 1994, testé officiellement en 1996 et lancé sur le marché en 1998 [4]. Le coût d'installation, le rendement et les émissions sont les trois critères les plus pertinents dans la conception de ce type de générateur [5, 6].

Le principe de fonctionnement des microturbines à gaz est basé sur le cycle de Brayton régénératif, comme le montre la figure I.1. Ce type de machine utilise un compresseur centrifuge et une turbine d'entrée radiale qui fonctionne à des vitesses de rotation élevées, d'où la nécessité d'un contrôleur de puissance numérique pour gérer

la production électrique. Les microturbines actuelles peuvent utiliser des combustibles liquides et gazeux, mais elles ont des exigences strictes concernant la qualité des gaz qui circulent dans le rotor de la turbine, étant intolérantes à la présence de particules solides, de gouttelettes et d'autres contaminants [7].

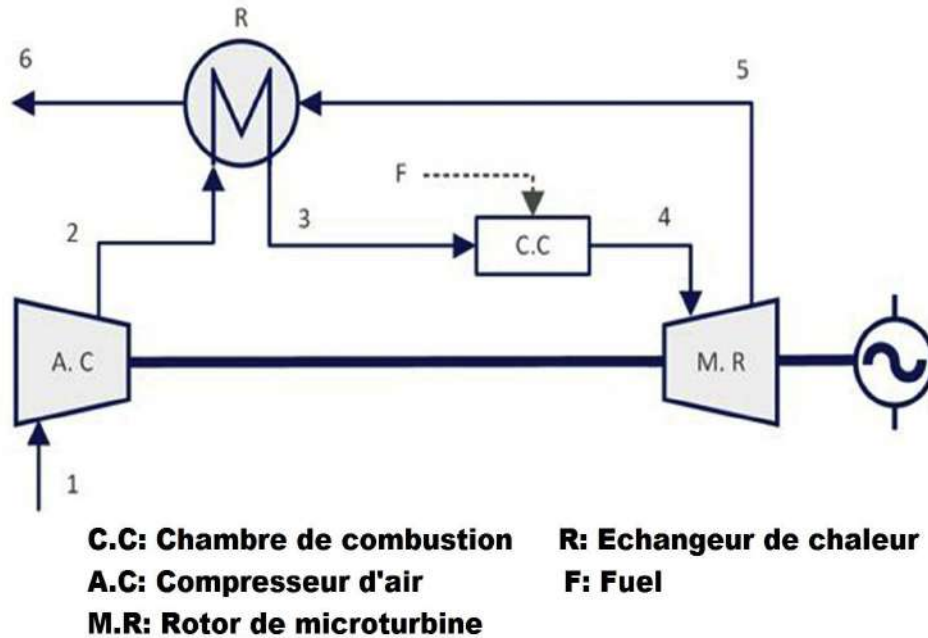


FIGURE I.1 – Cycle de Brayton pour Microturbine à gaz

### I.1.2 Types de microturbine à gaz

La conception de microturbine à gaz moderne est en évolution continue. Il existe de nombreuses recherches scientifiques sur l'évaluation complète de sa structure physique, sur le réaménagement de ses composants et sur le type du carburant utilisé pour ce type d'engin. Le but de ces études est non seulement pour l'optimiser à produire une puissance électrique optimale mais aussi pour satisfaire aux lois ou réglementations en matière d'environnement. Les dernières microturbines à gaz, encore en phase de test, peuvent atteindre 370 kW et fonctionnent en configuration double arbre [8].

Il existe plusieurs type de microturbines selon les dimensions et selon la puissance produite. La figure I.2 montre quelques exemples sur les MGT, dont leurs dimensions varient proportionnellement par rapport à leurs puissances générés. Les chercheurs de L'ONERA ont conçu une microturbine à gaz dont sa puissance peut atteindre 1,2KW, le diamètre de sa chambre de combustion est seulement 20 mm [9]. La Capstone C60

avec une puissance de 60KW, elle peut être utilisée pour alimenter une grande maison ou une petite unité de fabrication. Par ailleurs, The wilson microturbine avec une puissance maximal de 300KW peut être utilisée pour alimenter des hôtels , des établissements publics, scolaires ou des hôpitaux.



FIGURE I.2 – Types de Microturbine à gaz.

### I.1.3 Types de chambre de combustion

Dans la chambre de combustion de ces microturbines, qui mesure que quelques centaines de millimètres cubes, les écoulements sont beaucoup moins turbulents donc les gaz ont plus de difficultés à se mélanger. Cependant, le mélange est essentiel pour que la combustion aura lieu. Pour cela, des structures géométriques ont été créés dans la chambre de combustion afin de favoriser le mélange des gaz.

Ci-dessous, trois techniques pour améliorer le mélange carburant-air dans la chambre de combustion ont été présentées. La figure I.3(a) représentée une chambre de combustion annulaire, ici le carburant est injecté radialement face à l'écoulement d'air pour créer des vortex dans l'écoulement afin d'améliorer le mélange. La figure I.3(b) représente une chambre de combustion de type RQL, cette dernière comporte un composant appelé tube de mélange qui sert à réorienter l'écoulement d'air de l'extérieur vers l'intérieur de la chambre de combustion, et ainsi le carburant est entraîné par l'écoulement d'air. Une autre technique pour améliorer le mélange est présenté sur la figure I.3(c), la chambre de combustion comporte une zone de pré-mélange en amont, dans le but d'avoir un mélange pauvre afin d'éviter les hautes températures de réaction, c'est aussi une méthode pour diminuer la production de NOx.

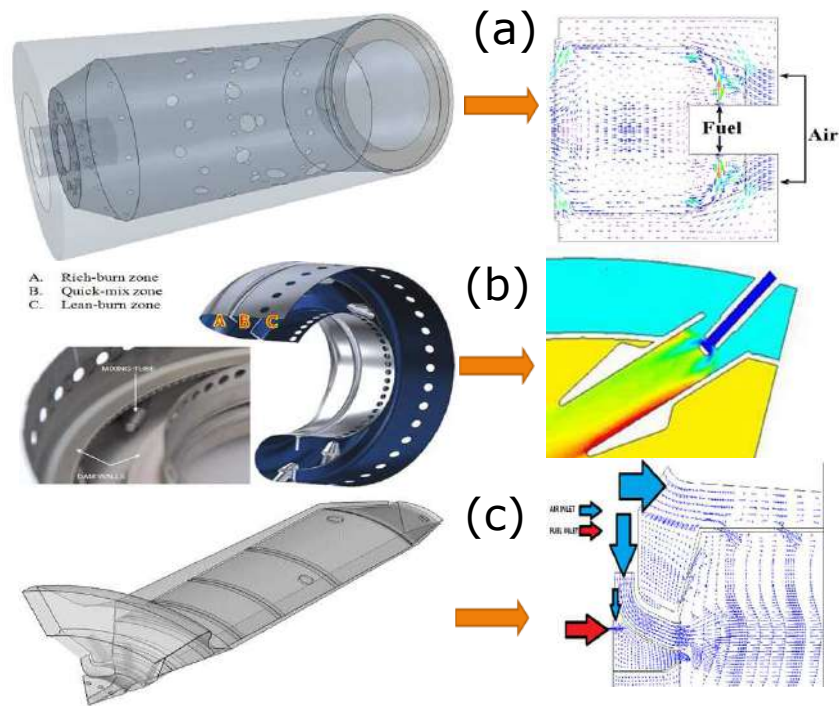


FIGURE I.3 – Types de chambres de combustion.

## I.2 La combustion d'hydrogène

L'intérêt d'utilisation des microturbines à gaz comme étant une nouvelle source de production d'électricité est devenue dominante depuis que le gaz naturel est le carburant couramment utilisé. Il est le carburant principal de choix pour sa disponibilité, son coût réduit et ses faibles émissions polluante [10]. Toutefois, les réserves de gaz naturel (GN) sont en baisse avec l'augmentation de la consommation actuelle de carburant en raison des progrès technologiques. Par conséquent, La demande d'un carburant alternatif est la principale préoccupation dans le future proche. L'hydrogène ou les carburants mélangés ont été considérés comme une des principales solutions atterantes pour avoir moins de polluants. D'autre part, le contrôle de la pollution dans les technologies modernes sont encore nécessaires pour satisfaire les exigences environnementales [11].

Au cours des dernières décennies, la combustion pré-mélangée pauvre est la technologie dominante dans le domaine des turbines à gaz pour ses faibles émissions de NOx [12]. Cependant, Le problème principal de la combustion pré-mélangée est la plage opératoire limitée. En fait, il existe trois phénomènes principaux qui décrivent ce problème : la vitesse, le retour de flamme et l'auto-inflammation.

### I.2.1 Vitesse de flamme laminaire

La vitesse de la flamme laminaire ou de la flamme turbulente est l'élément principal de la combustion pré-mélangées, car elle définit la position du front de la flamme. De nombreuses corrélations analytiques qui décrivent la vitesse de flamme laminaire ou la vitesse de la flamme turbulente en fonction de la température, de la pression et du taux d'équivalence [13]. Shelil et al. [14] ont évalué la vitesse de la flamme laminaire pour le mélange CH<sub>4</sub> / H<sub>2</sub> dans de nombreuses conditions de fonctionnement avec une approche numérique. Dans le cas où la concentration en hydrogène est inférieure à 30%, la variation de la vitesse de la flamme est limitée à 0.5 m/s (voir la figure I.4), mais l'augmentation de la teneur en hydrogène déplace la vitesse vers des valeurs très élevées. Dans le cas de l'hydrogène à 100%, la valeur maximale de la vitesse de la flamme laminaire est supérieure à 3 m/s.

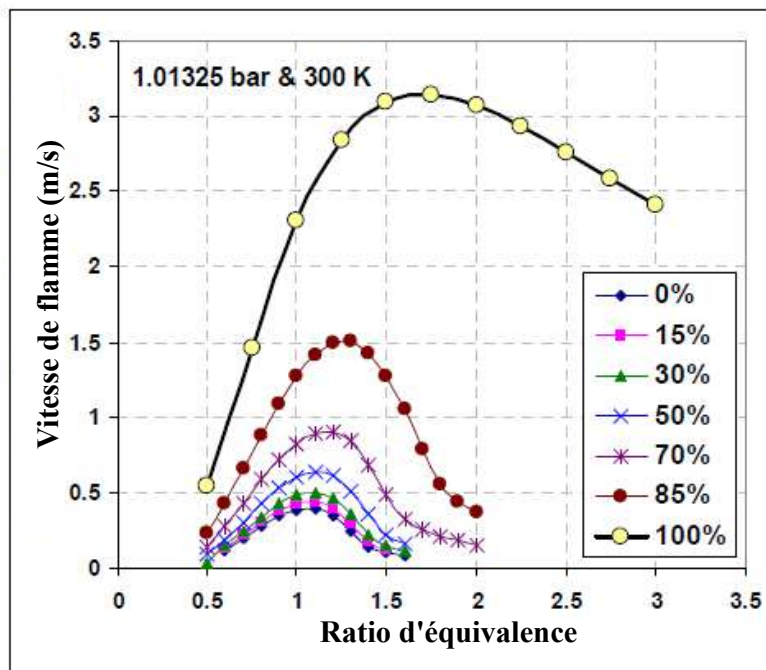


FIGURE I.4 – Vitesse de flamme laminaire pour le mélange CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> dans des conditions atmosphériques en 300K [14]

Les résultats de Shelil et al [14] sont cohérents avec les résultats expérimentaux de Kwon [18] et de Rozenchan [19], voir la figure I.5.

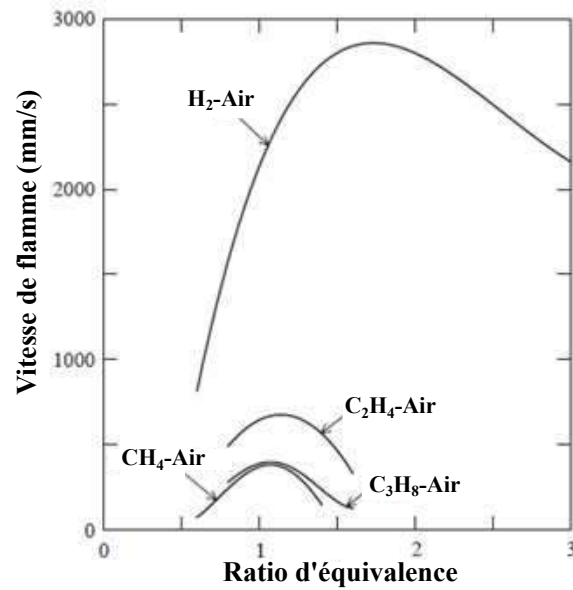


FIGURE I.5 – Résultats expérimentales de la vitesse de flamme pour différents mélanges

Pareja et al. [20] ont recueilli de nombreuses données sur la vitesse de la flamme laminaire dans des conditions atmosphériques (voir la figure I.6).

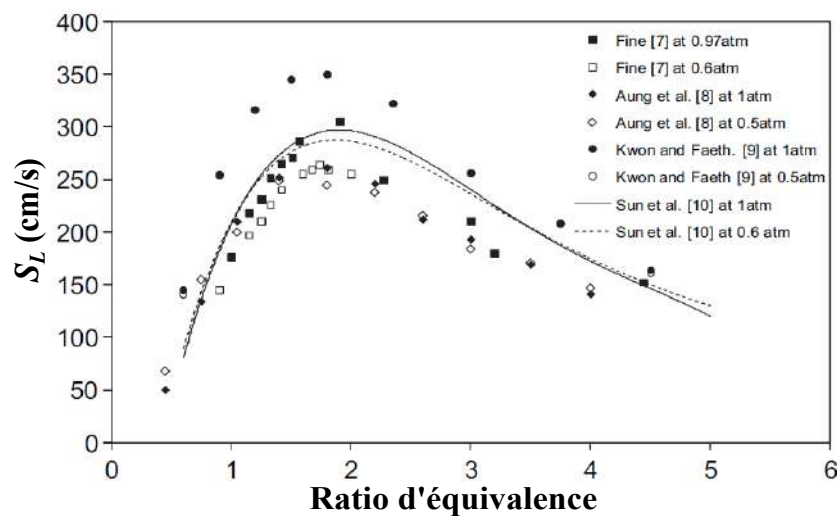


FIGURE I.6 – Résultats expérimentales et numériques de la vitesse de flamme laminaire de H2/air dans la pression atmosphérique et au-dessous

Kittagawa et al. [15] et Hu et al. [16] rapportent l'influence de la pression sur la vitesse de la flamme laminaire, voir figures I.7 et I.8. Généralement, pour un rapport équivalent inférieur à 1 et supérieur à 2,5, les valeurs diminuent, la valeur de différence absolue étant d'environ 0,5 m / s.

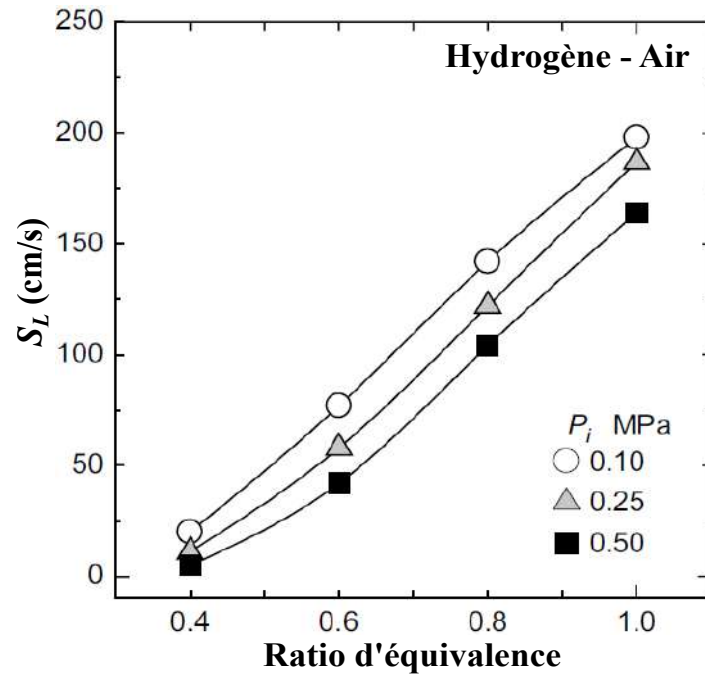


FIGURE I.7 – La vitesse de flamme laminaire de H2/air pour différent pressions.[15]

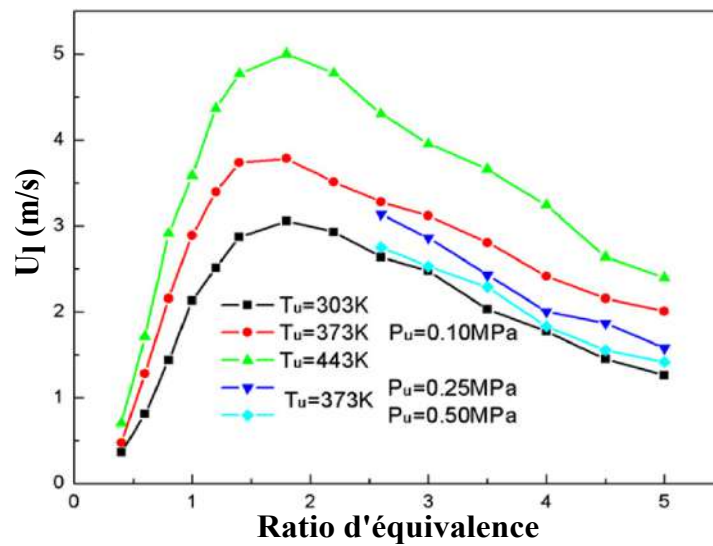


FIGURE I.8 – La vitesse de flamme laminaire de H2/air pour différent pressions et température.[16]

Verhelst et al. [17] rapporte une influence importante de la température sur la vitesse de la flamme laminaire pour les cas à haute pression, voir figure I.9.



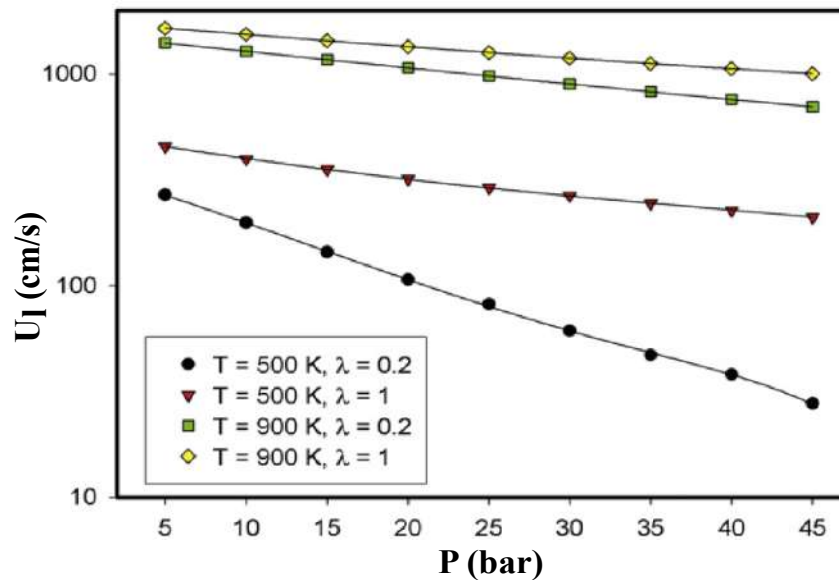


FIGURE I.9 – La vitesse de flamme laminaire de H<sub>2</sub>/air pour différent pressions et température.[17]

## I.2.2 Extinction et retour de flamme

De nombreux travaux sur la stabilité de la flamme et sa propagation pour les flammes pré-mélangées pauvres CH<sub>4</sub> / Air ont été réalisés au cours des dernières décennies [21], par contre la caractérisation des flammes d'hydrogène n'est pas assez complète en ce qui concerne les flammes au méthane. Les premiers travaux portaient sur le mélange CH<sub>4</sub> / H<sub>2</sub> de Schefer et al. [22] mais son intention était d'améliorer la stabilité des flammes de méthane. En fait, de nombreux travaux se concentrent sur la caractérisation du mélange enrichi en hydrogène, par exemple les travaux de Noble et al. [23] et les mêmes résultats sont rapportés par la figure I.10. Cette figure montre les conditions de coupure (symbolisées par des carrés) et de flashback (symbolisés par des points); le point en anneau montre un cas de flashback rapide. Les points de retour de flamme et d'éruption sont évidemment obtenus pour des vitesses différentes, mais ils sont reportés sur le même graphique pour souligner l'influence différente de l'hydrogène sur ce phénomène. L'augmentation de la concentration en hydrogène permet de réduire le rapport d'équivalence avant l'éjection, ce schéma est presque linéaire. En ce qui concerne le retour de flamme, l'effet est limité pour une concentration d'hydrogène inférieure à 60%, mais son influence est très forte. En fait, le retour est très rapide. La plage stable est divisée en deux régions : moins de 60% et plus de 60% d'hydrogène. Dans le premier cas, l'opérabilité pourrait être suffisante pour une turbine à gaz. Dans

la deuxième région, la plage est réduite par la concentration élevée en H<sub>2</sub> et pour l'hydrogène pur, elle est très étroite. Pour cette raison, l'alimentation en hydrogène pur dans une turbine à gaz à mélange préalable n'est pas utilisée dans les applications industrielles.

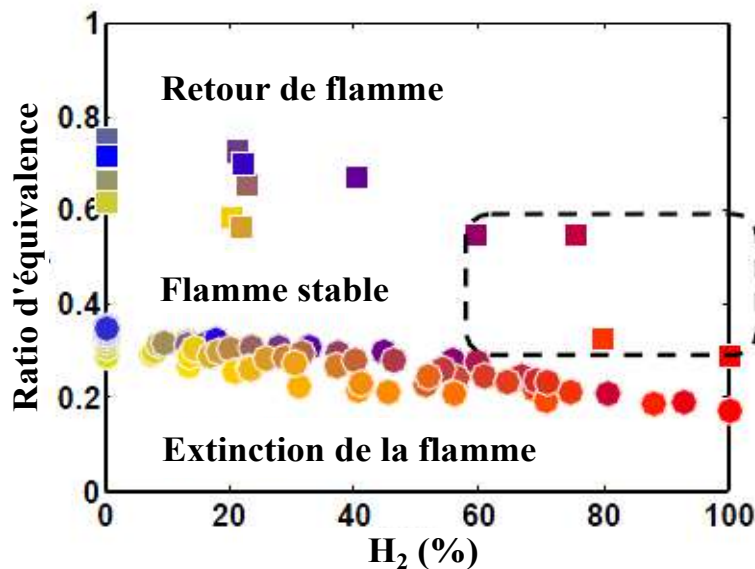


FIGURE I.10 – LBO ( $U_0=6\text{m/s}$ ) et flashback ( $U_0=2\text{m/s}$ ) en fonction de la fraction molaire d'hydrogène et de la ratio d'équivalence. Température : 460 K et pression 0,44 MPa.

### I.2.3 Point d'auto inflammation

Lorsque le temps caractéristique de pré-mélange est inférieur au temps de retard d'allumage, l'auto-inflammation est évitée. La complexité de l'aérodynamisme dans une chambre de combustion à turbine à gaz est le problème pour une évaluation correcte du temps de pré-mélange. Généralement, l'échelle temporelle de mélange dans une chambre de combustion pré-mélangée est d'environ 1 à 5 ms. Lieuwen et al. [24] rapporte une petite différence concernant le temps de retard à l'allumage entre le méthane et l'hydrogène pour la température typique de la turbine à gaz (de 600 à 1000 K). Le même résultat est rapporté par Therkelsen et al [25], voir la figure I.11, qui utilise cette information pour concevoir leur chambre de combustion dans une microturbine à gaz. Le problème principal est l'influence plus importante de la température sur le retard dans le cas de l'hydrogène que celle du méthane. L'hydrogène pur est théoriquement sans danger pour l'autoallumage en condition de fonctionnement d'une turbine à gaz. Le temps d'allumage est compris entre 10 et 100 ms et peut être suffisant pour une

chambre de combustion bien conçue. Le problème est l'évaluation de cette époque car ce résultat est issu d'une analyse de la chimie cinétique avec un modèle monodimensionnel et il n'est pas assez validé. Nombreuses solutions technologiques innovantes pour le travail de ravitaillement en hydrogène avec un temps de séjour réduit. Marek et al. [26] proposent la technologie Lean «Lean Direct Injection» basée sur la multiplicité des points d'injection et le mélange rapide. L'activité expérimentale montre que la flamme s'enflamme très près du point d'injection et que seul un matériau céramique peut supporter les températures élevées.

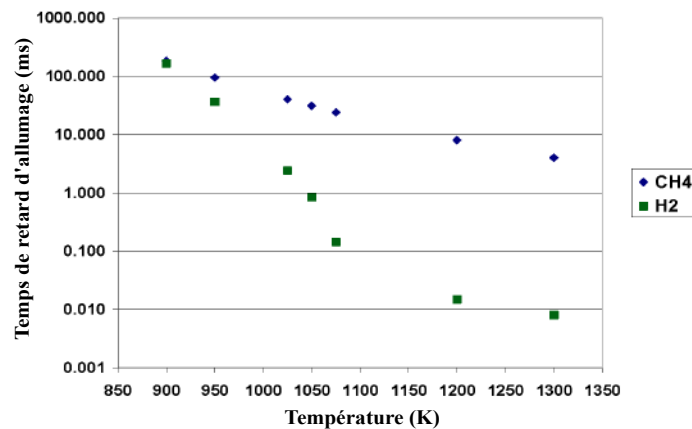


FIGURE I.11 – Délai d'inflammation de méthane et de l'hydrogène. [26]

### I.3 La combustion dans les microturbines à gaz

De nombreux travaux numériques et expérimentaux sur la combustion dans les microturbine à gaz ont été trouvés dans la littérature. Dans ce qui suit, on présente quelques analyses bibliographiques sur lesquelles ce présent travail s'est appuyé :

Shih et al. [27] ont fait une modélisation pour étudier l'effet d'addition de l'hydrogène dans le méthane sur la combustion. Ils ont utilisé une chambre de combustion annulaire d'une microturbine innovante (voir figure I.12), sa longueur est de 180 mm sur un diamètre de 75mm. Les travaux ont été réalisés en utilisant le logiciel de simulation STAR CD avec un maillage 3D hexaédrique en multi bloc. Le modèle de turbulence  $K - \varepsilon$  standard et le modèle de combustion PPDF ont été choisis. Les résultats montrent que la température dans la chambre de combustion augmente proportionnellement avec la substitution de l'hydrogène dans le méthane(voir figure I.13(a)). Cela

est dû à l'apport de chaleur important de l'hydrogène. Par conséquent, la performance de la combustion dans la microturbine est améliorée. Par ailleurs, leurs préoccupations c'était le refroidissement de la chambre et les émissions polluantes. L'émission de CO diminue mais l'émission de NO<sub>x</sub> augmente à cause des hautes températures (voir figure I.13(b)). Ils ont proposé par la suite d'augmenter le temps de séjour des gaz chauds en augmentant la longueur de la zone de dilution et en ajoutant d'autres trous pour réduire la température et la production de NO<sub>x</sub> à la sortie.

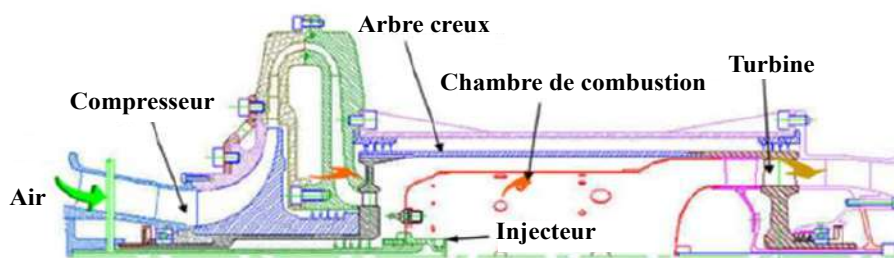


FIGURE I.12 – Schéma de la microturbine à gaz [27]

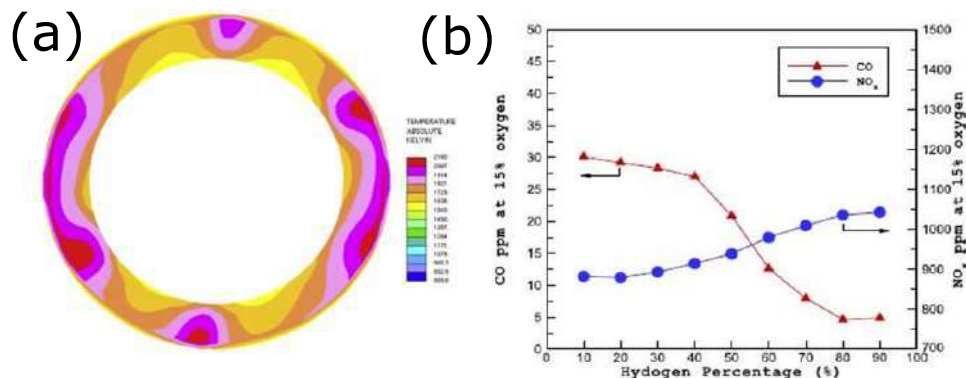


FIGURE I.13 – (a) Température à la sortie de la chambre de combustion et (b) Emissions NO<sub>x</sub> et CO à la sortie de la chambre de combustion [27]

Cameretti et al. [28] Ont fait une modélisation sur de la combustion de gaz de synthèse dans une microturbine de type Capstone model C30 (voir figure I.14). Les auteurs ont comparé la combustion de 3 types de gaz de synthèse différents avec la combustion de gaz naturel prise comme référence. Le gaz de synthèse est un gaz extrait par pyrolyse de la matière organique, son avantage c'est qu'il est riche en hydrogène et pauvre en carbone donc la production de CO sera faible. De plus, il est trois fois plus économique que le gaz naturel, et son inconvénient est qu'il est très toxique avant son

inflammation car il contient un pourcentage important de CO. Par ailleurs, il est plus rapide à brûler que le gaz naturel donc difficile à stocker. Les auteurs ont utilisé Ansys Fluent pour la modélisation avec un maillage 3D hybride, le modèle de turbulence choisi est  $k - \omega$  et le modèle combiné "finite rate-eddy dissipation" est utilisé pour l'interaction turbulence-chimie. La table I.1 représente les résultats dans le cas 4 et le cas 6 où le gaz de synthèse est utilisé, l'émission de NO est importante par rapport au cas du gaz naturel (cas 1) à cause de la haute température causée par la grande quantité d'hydrogène dans le gaz de synthèse. En outre, la production de CO est un peu faible par rapport au GN. Par ailleurs, le cas 5 donne des résultats assez satisfaisants par rapport au gaz naturel surtout dans la production de NOx qui est 31.6% moins que le GN pour une différence de température de 11°C à la sortie. Toute fois une modification dans la chambre est nécessaire au niveau de la zone primaire pour favoriser la réaction chimique entre le monoxyde de carbone et l'oxygène.

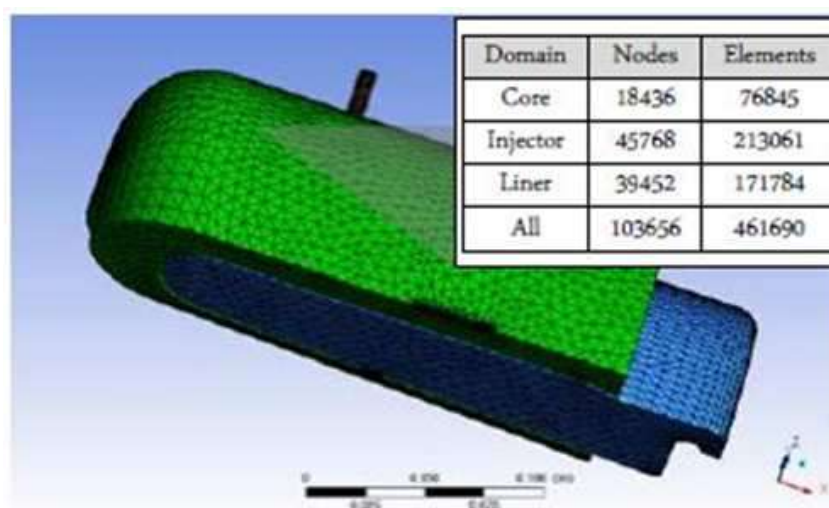


FIGURE I.14 – La chambre de combustion de la microturbine Capstone C30 [28]

TABLEAU I.1 – Température, émissions CO et NO pour différents cas de carburants [28]

	T <sub>out</sub> [K]	T <sub>max</sub> [K]	NO [%]	CO [%]
<b>Case #1</b>	1176	2557	- -	- -
<b>Case #4</b>	1140	2735	50.6	-8.3
<b>Case #5</b>	1165	2511	-31.6	14.7
<b>Case #6</b>	1183	2689	39.8	-1.8

Rajpara et al. [29] ont développé une étude numérique et expérimentale qui vise à évaluer le potentiel de l'hydrogène sous la forme d'un combustible supplémentaire pour accélérer la chimie de combustion et réduire les émissions de CO de la chambre de combustion d'une microturbine à gaz alimentée avec du méthane. Les effets de l'enrichissement en hydrogène sur les caractéristiques de la flamme et la cinétique chimique sont analysés en utilisant Large Eddy Simulation (LES). La visualisation de la flamme est effectuée et des mesures de température et d'émissions à la sortie de la chambre de combustion sont rapportées. Pour un même apport d'énergie, les flammes sont relativement plus larges et plus courtes à des concentrations d'hydrogène plus élevées (voir figure I.15). L'augmentation de l'hydrogène est avantageuse en termes de vitesse de flamme, de température, de vitesse de réaction chimique et d'émissions de CO. Une température de flamme plus élevée favorise les émissions de NOx lorsque la teneur en hydrogène est plus élevée. A débit volumétrique constant, la réduction des espèces générées par le carbone est attribuée à la substitution des hydrocarbures et les effets cinétiques chimiques sont moindres. Par Conséquent, l'ajout d'hydrogène augmente la température de la flamme, diminue les dimensions de la flamme et réduit les émissions de CO avec une augmentation marginale des émissions de NOx.

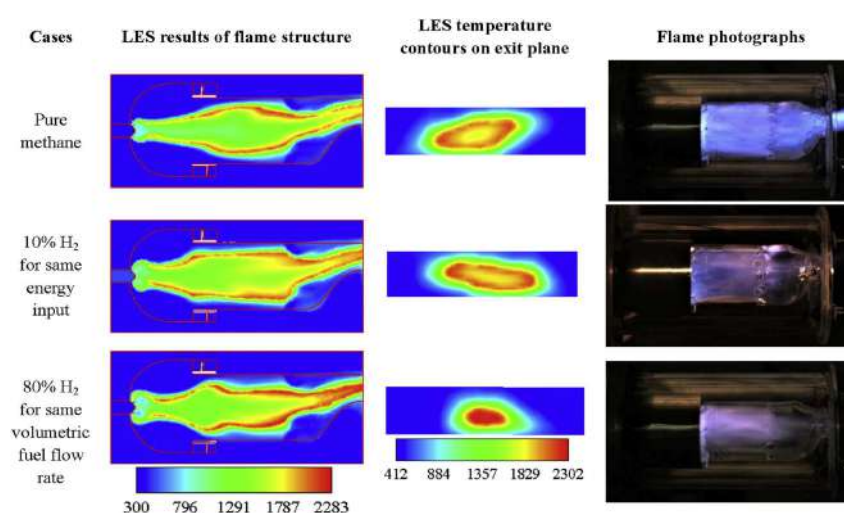


FIGURE I.15 – Temperature pour différents cas de carburants [29]

La relation entre la qualité de pulvérisation et la performance de combustion d'une microturbine à gaz a été étudiée par Sallevet et al. [30], en brûlant un biocarburant dans différentes conditions d'injection de carburant. Les émissions provenant de la combustion d'un mélange visqueux d'huiles végétales ont été comparées à des me-



sures de référence avec du diesel (voir figure I.16). L'effet de la viscosité du carburant sur les émissions polluantes est déterminé en ajustant la température d'injection. Les mesures confirment qu'une réduction de la viscosité du carburant améliore la qualité de la pulvérisation, entraînant une évaporation plus rapide des gouttelettes et une combustion plus complète. On a observé que les niveaux d'émission de CO diminuent linéairement avec la viscosité dans la plage testée. Pour la buse à jet hélicoïdal à pression utilisée dans les essais, la limite supérieure de viscosité est de 9 cP. Au-dessus de cette valeur, l'évaporation des gouttelettes semble incomplète car les gaz d'échappement contiennent une quantité considérable de carburant imbrûlé. De plus, l'influence de l'augmentation de la pression d'injection et de la température de la chambre de combustion est évaluée en faisant varier la charge. L'ajout d'une charge supplémentaire a permis d'améliorer la combustion lors de la combustion du diesel. Dans le cas de l'huile végétale, toutefois, cette tendance est moins constante car la diminution des émissions de CO n'est pas observée sur toute la plage de charge.

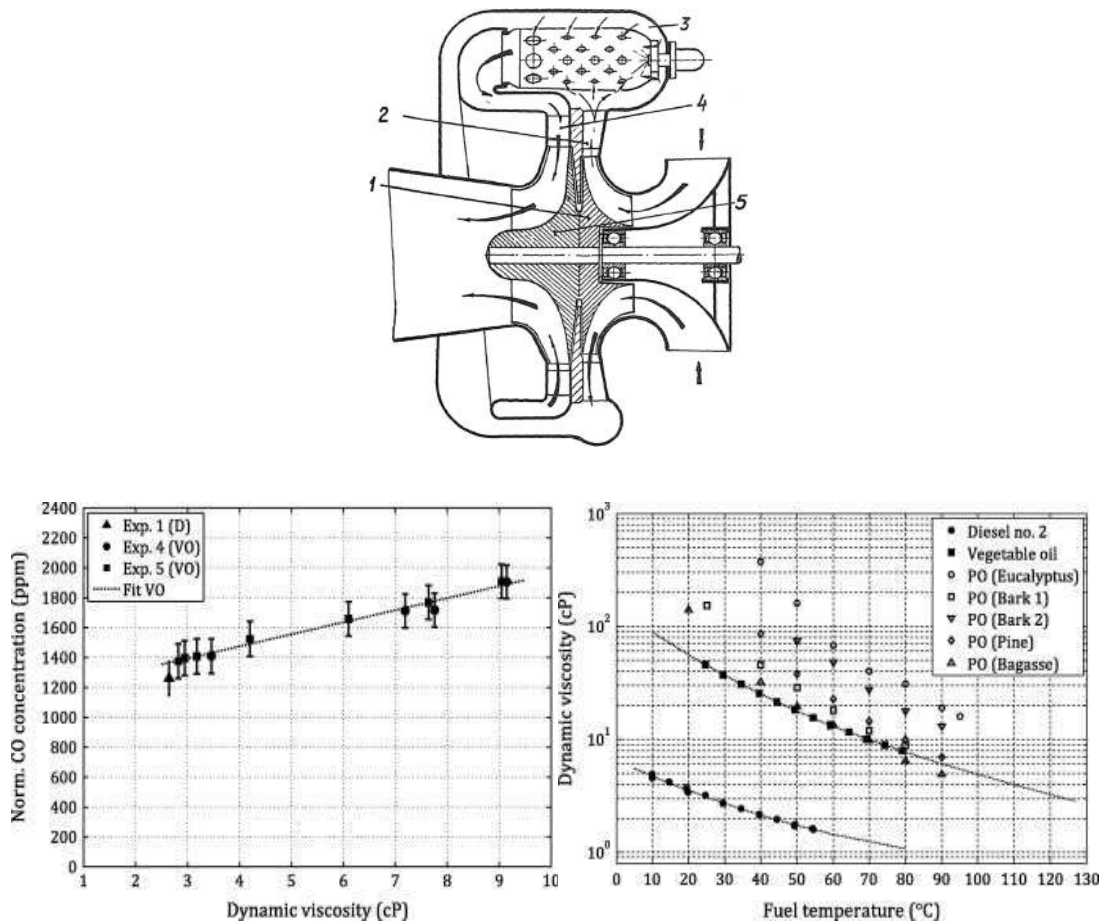


FIGURE I.16 – La chambre de combustion et les résultats [30].

Buffi et al. [31] ont étudié l'utilisation de la bio-huile à pyrolyse rapide (FPBO) comme carburant dans une microturbine à gaz non régénérée à petite échelle (voir figure I.17), installée dans un banc d'essai. Le système comprend une ligne d'injection et une chambre de combustion modifiée pour brûler efficacement les fractions à volume élevé de la solution FPBO dans l'éthanol. L'effet de l'augmentation du volume de la chambre de combustion a amélioré la qualité de la combustion du gazole de référence et de l'éthanol pur en ce qui concerne les émissions de gaz d'échappement (voir les figures I.18(a) et (b)), tout en maintenant les consommations de carburant de la configuration originale. Des essais avec des mélanges FPBO/éthanol à 20/80 et 50/50% (fractions volumiques) ont montré un fonctionnement stable et réussi du moteur. En augmentant la fraction volumique du FPBO dans le mélange de carburants, ils ont observé une augmentation des émissions de CO - probablement due aux gouttelettes plus grosses dérivées du carburant plus visqueux - ainsi que des émissions de NOX - probablement dues à l'azote lié au carburant. Compte tenu des modifications proposées et du mélange FPBO/éthanol comme carburant, le moteur a atteint un rendement électrique global supérieur à celui mesuré avec le carburant diesel de référence. Un tirage final avec une alimentation 100% FPBO a montré une combustion instable avec la présence de dépôts de carbone dans les parties chaudes du système, ce qui montre que la configuration actuelle nécessite d'autres modifications pour atteindre cet objectif.

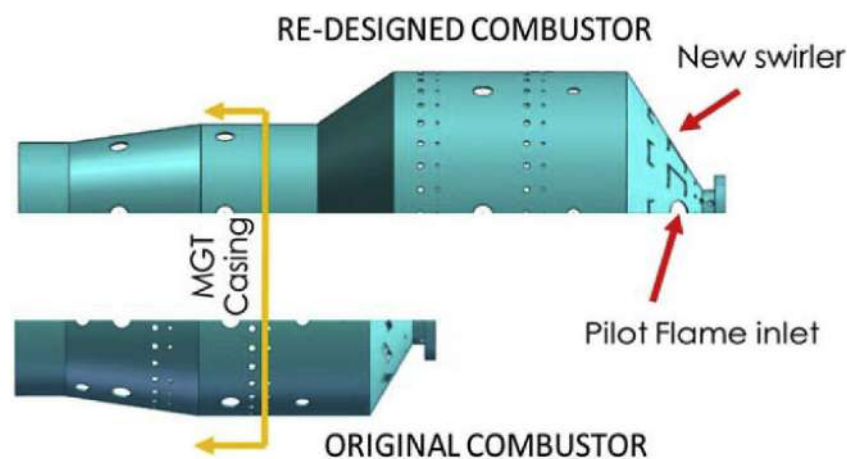


FIGURE I.17 – La chambre de combustion modifiée (en haut) la chambre de combustion de la microturbine originale modèle Garrett GTP 30-67 (en bas) [31]



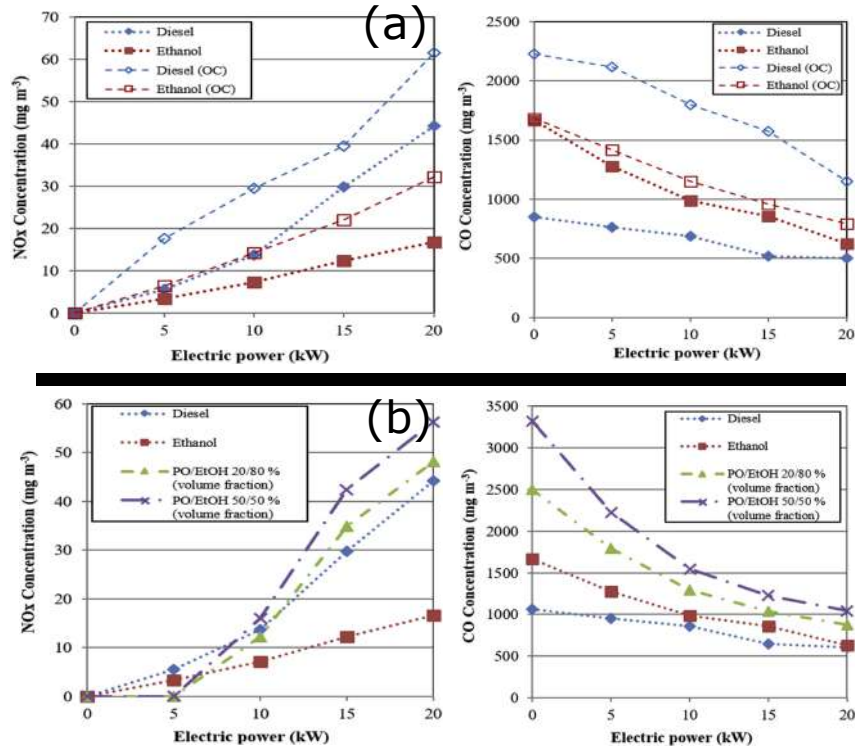


FIGURE I.18 – (a) CO et NO émissions pour MGT originale (b) CO et NO émissions pour MGT modifié [31]

Okafor et al. [32] ont étudié les effets de l'angle d'injection du combustible, de la température d'entrée de la chambre de combustion, du rapport d'équivalence et de la pression ambiante sur la stabilisation de la flamme et les émissions dans une chambre de combustion à haute pression de laboratoire (voir figure I.19). Un analyseur de gaz FTIR a été utilisé pour analyser les gaz d'échappement. Une modélisation numérique utilisant OpenFOAM a été réalisée pour mieux comprendre la dépendance des émissions de NO par rapport au rapport d'équivalence. Les résultats montrent que l'injection de carburant inclinée par opposition à l'injection verticale le long de l'axe central de la chambre de combustion a permis d'améliorer la stabilité de la flamme et de réduire les émissions de NH<sub>3</sub> et de NO<sub>x</sub>. Les résultats numériques et expérimentaux ont montré qu'un contrôle du rapport d'équivalence en amont de la chambre de combustion est critique pour une faible émission de NO<sub>x</sub> dans une chambre de combustion (voir figure I.20). Les émissions de NO avaient une valeur minimale pour un rapport d'équivalence en amont de 1,10 dans les expériences. En outre, ils ont constaté que les émissions de NO diminuent avec la pression ambiante, en particulier pour la combustion pré-mélangée. En ce qui concerne la stratégie de combustion riche et pauvre

employée dans cette étude, ils ont enregistré des émissions de NO<sub>x</sub> plus faibles dans la combustion pré-mélangée que dans la combustion non pré-mélangée, ce qui indique l'importance de l'uniformité du mélange pour les faibles émissions de NO<sub>x</sub> provenant de la combustion d'ammoniac. Dans la conception de la chemise proposée, les émissions de NO<sub>x</sub> sont de 42 ppmv et le rendement de combustion de l'ammoniac est de 99,5 % ont été atteints à 0,3 MPa pour une puissance d'entrée du combustible de 31,44 kW.

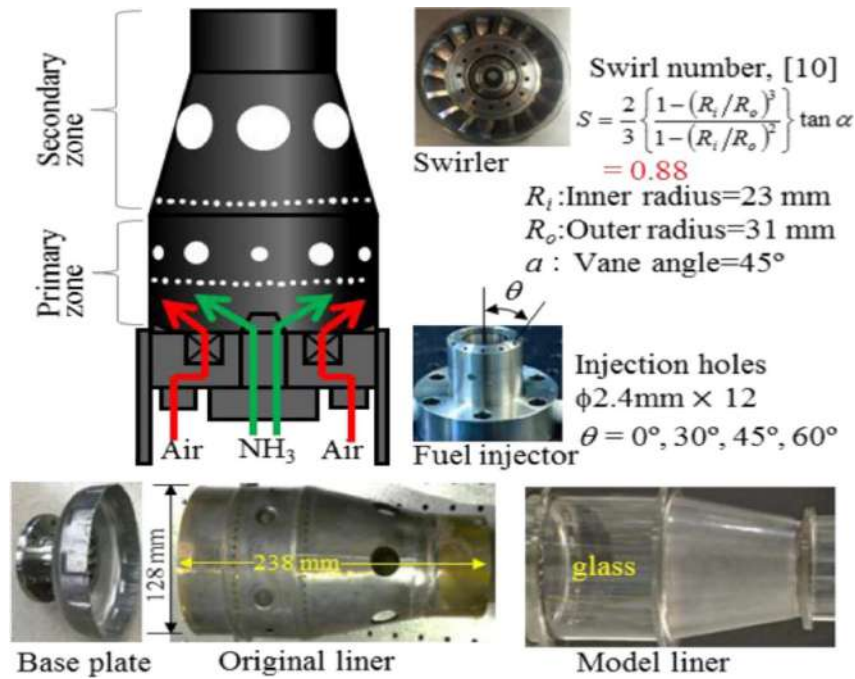


FIGURE I.19 – La chambre de combustion d'une MGT [32]

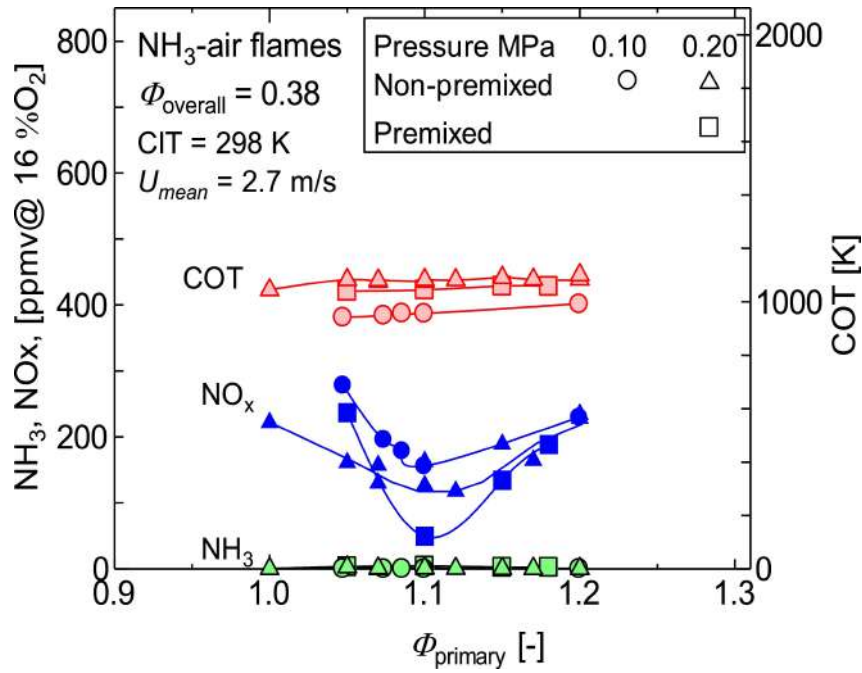


FIGURE I.20 – Résultats numériques sur la chambre de combustion [32]

Une nouvelle chambre de combustion annulaire RQL de la microturbine à gaz Elliott TA80R (voir figure I.21) a été conçue et construite avec une géométrie modifiée par Laranci et al. [33] pour surmonter les défaillances connues en cas de fonctionnement à bas régime (environ 2500 heures) causées par la surchauffe. Une facilité de fabrication et une optimisation des flux simplifiées pour réduire les émissions tout en maintenant des températures similaires et des gains d'efficacité. Une géométrie optimisée, cependant, garantissait une température d'entrée de la turbine (TIT) similaire par rapport à la géométrie d'origine avec une réduction considérable dans les émissions de CO et de NO<sub>x</sub> (voir table I.2). La géométrie modifiée était la suivante testée par analyse CFD sur du gaz de synthèse issu de la biomasse procédés thermo-chimiques. Les résultats montrent qu'en outre des modifications de la gaine sont nécessaires pour un fonctionnement optimal et d'atteindre des valeurs adéquates pour la température d'entrée de la turbine.

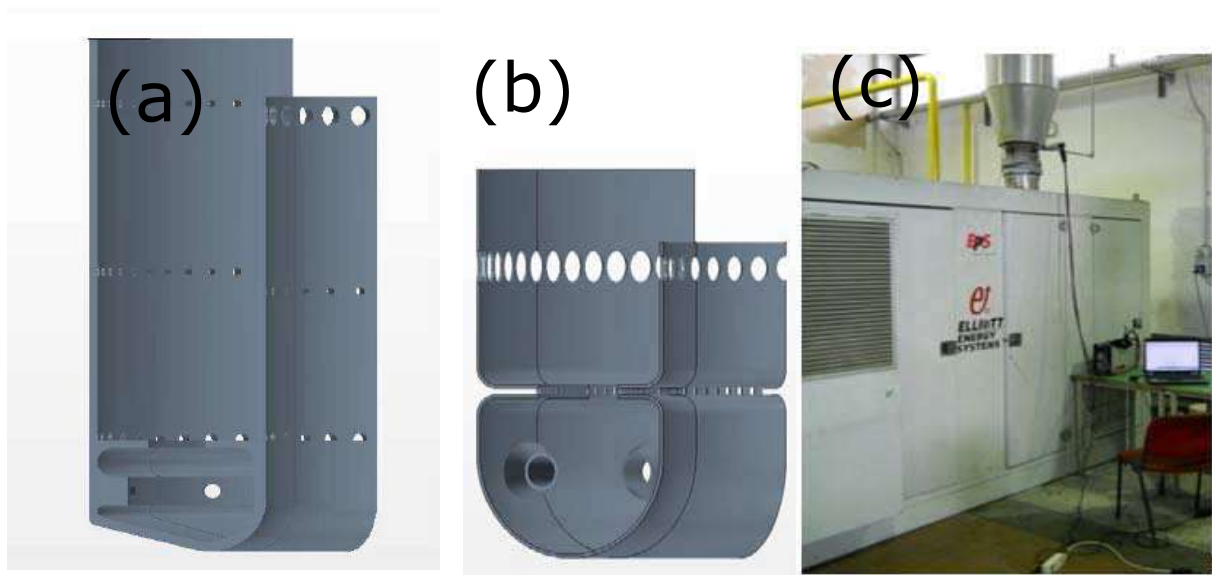


FIGURE I.21 – (a)Chambre de combustion modifiée (b)Chambre de combustion originale (c)MGT ELLIOTT TA 80 R.[33]

TABEAU I.2 – Résultats numériques et expérimentales sur la chambre de combustion originale et modifiée [33]

Analysis	Exp.	Computational				
CC	Original	Original	New	Modified for low LHV gas	New	New
Injectors	Original	Original	Original	Modified for low LHV gas	Original	Modified for low LHV gas
Fuel	NG	NG	NG	SG	SG	SG
$TIT [K]$	1126	1128	1121	1128	1071	1113
$P [bar]$	3.76	3.75	3.74	3.72	3.67	3.69
Species						
$O_2 [\%vol]$	18.4	18.4	18.4	18	18.5	18.2
$CO_2 [\%vol]$	1.37	1.43	1.47	3.94	3.47	3.83
$CO [ppm@15\%O_2]$	97	90	5	5	4	4
$NO [ppm@15\%O_2]$	48	32	18	3	0.4	1

## **I.4 Synthèse de l'étude bibliographique**

Au vu des travaux de recherche cités dans notre étude bibliographique, on peut conclure que les principaux résultats des recherches effectuées sur la combustion dans les microturbines à gaz, sont définis comme suit :

1. La combustion d'hydrogène mélangé avec du méthane dans une chambre de combustion annulaire d'une microturbine à gaz, provoque une augmentation de la température et par conséquent une augmentation de l'émission de NO<sub>x</sub> mais une diminution de l'émission de CO.
2. La combustion de gaz de synthèse dans une microturbine à gaz provoque une faible émission de NO<sub>x</sub> par rapport à celle de gaz naturel, avec une diminution faible de température à la sortie de la chambre de combustion.
3. L'augmentation de l'hydrogène dans le carburant mélangé est avantageuse en termes de vitesse de flamme, de température, de vitesse de réaction chimique et d'émissions de CO. Par ailleurs, une diminution dans les dimensions de la flamme et une augmentation marginale des émissions de NO<sub>x</sub> ont été prévues.
4. Des modifications dans les dimensions de la chambre de combustion d'une MGT, tel que : l'augmentation du temps de séjour des gaz brûlés en augmentant la longueur de la chambre ou l'augmentation du nombre des trous de dilution sont nécessaires pour réduire les émissions polluantes telles que CO et NO<sub>x</sub>.
5. Une chambre de combustion du type RQL est une architecture de technique innovante, elle permet de réduire les émissions polluantes par étapes. Ainsi, une utilisation de différents types d'injecteurs est possible pour différents carburants.

## I.5 Motivation de l'étude

D'après l'étude bibliographique, les techniques de réduction des émissions polluantes et le maintien des meilleures performances de la combustion sont les principales préoccupations des chercheurs.

Dans les études existantes sur les effets d'addition d'hydrogène, la combustion d'un carburant mélangé d'hydrogène et de gaz naturel dans une microturbine à gaz avec une chambre de combustion du type RQL n'a pas été explorée. Pour cela, on a élaboré un mécanisme de réaction chimique, une version réduite de GRIMECH 3.0. De plus, on a utilisé le modèle  $k - \omega$  SST pour décrire la turbulence et le modèle Eddy dissipation/Finite Rate pour l'interaction turbulence-chimie. Dans cette étude, on a utilisé Ansys Fluent 16 [34] pour la simulation numérique.

Une deuxième étude a été faite, une comparaison entre la combustion d'hydrogène-gaz naturel et l'hydrogène-gaz de synthèse. Pour cela, on a utilisé le modèle PPDF (Presumed Probability Density Function). Le modèle  $k - \epsilon$  standard pour la turbulence. Dans cette étude, on a utilisé Star CCM+ [35] pour la simulation numérique.

Le but de ces études est de réaliser une modélisation de la combustion dans une microturbine à gaz, ensuite améliorer les performances de la combustion pour un carburant mélangé, en utilisant une analyse comparative des deux outils de simulation utilisées.

# Chapitre II

## Modélisation de la combustion turbulente

### Sommaire

---

<b>II.1 Les écoulements réactifs</b>	28
<b>II.2 Type de combustion</b>	28
II.2.1 Flamme de diffusion	28
II.2.2 Flamme pré-mélangée	29
II.2.3 Flamme partiellement pré-mélangée	29
<b>II.3 Équations gouvernantes</b>	29
II.3.1 Équations de la continuité	30
II.3.2 Équations de la conservation de la quantité de mouvement	30
II.3.3 Équations de conservation de l'énergie	31
<b>II.4 Modélisation de la turbulence</b>	32
II.4.1 Équations de Navier-Stokes moyennées au sens de Favre	32
II.4.2 Modélisation de la turbulence par l'approches RANS	34
<b>II.5 Modélisation de la combustion</b>	35
<b>II.6 Modèles NOx</b>	40

---

## II.1 Les écoulements réactifs

La combustion est l'oxydation d'un combustible avec un carburant. Cette réaction est fortement exothermique, comme le cas de la combustion du carbone dans l'oxygène.

## II.2 Type de combustion

Il existe 3 types de flamme en termes de mélange du carburant et de comburant. Dans le cas de la combustion non pré-mélangée ou diffusion, le combustible et l'oxydant sont injectés dans la zone de réaction séparément. En revanche, dans le cas de la combustion pré-mélangée, les réactifs sont mélangés avant la combustion.

### II.2.1 Flamme de diffusion

La combustion non pré-mélangée se produit lorsque le combustible et l'oxydant sont injectés séparément dans la chambre de combustion (voir figure II.1), la combustion se fait lorsque les réactifs se mettent en contact dans une zone appelée zone de réaction primaire. C'est le cas de nombreux systèmes industriels, principalement pour des raisons de sécurité. De plus, ce type de combustion n'as pas besoin d'un dispositif de pré-mélange spécifique. Les flammes de diffusion se trouvent par exemples dans les fours, moteurs diesel et turbines à gaz.

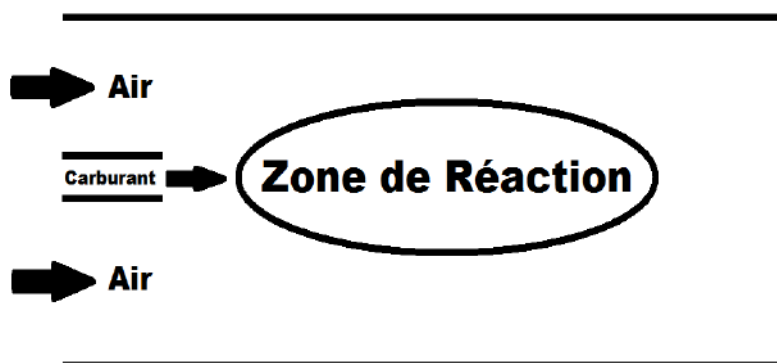


FIGURE II.1 – Flamme de diffusion.



### II.2.2 Flamme pré-mélangée

Dans les flammes pré-mélangée, le combustible et l'oxydant sont mélangés avant d'entrer dans la chambre de combustion (voir figure II.2). Ce dernier se produit comme un front de flamme en se propageant dans les réactifs imbrulés. Les flammes pré-mélangées se trouvent dans les moteurs à combustion internes et des turbines à gaz.

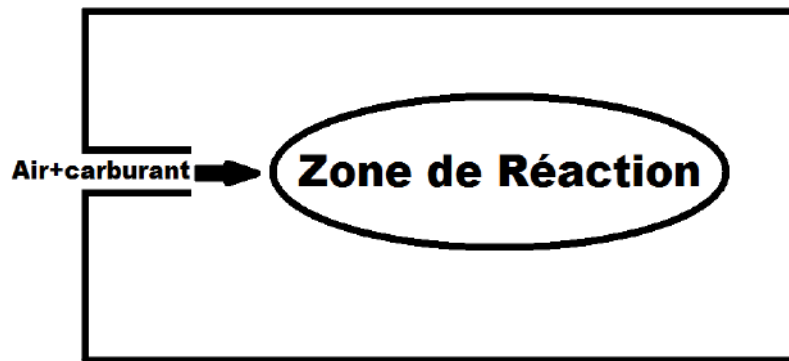


FIGURE II.2 – Flamme de pré-mélange.

### II.2.3 Flamme partiellement pré-mélangée

Ce type de flamme est intermédiaire entre les deux premiers types. De manière générale le carburant est stocké séparément du comburant. Le mélange est injecté à travers deux courants différents en amont du front de flamme ou ils sont supposés se mélanger.

## II.3 Équations gouvernantes

Les écoulements réactifs sont gouvernés par des équations de conservations de la quantité de mouvement, de masse, de l'énergie et des espèces chimiques. Ces équations sont présentées avant de développer les approches de modélisation qui concerne les différents phénomènes physiques dans la combustion turbulente de diffusion.

### II.3.1 Équations de la continuité

L'équation de la continuité est définie comme la loi de la conservation de masse appliquée à un fluide traversant un volume de contrôle infinitésimal fixe.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{II.1})$$

L'équation de conservation de masse pour espèce  $k$  s'écrit :

$$\frac{\partial \rho Y_K}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_{K,i}) Y_K) = \dot{\omega}_K \quad (\text{II.2})$$

$V_{K,i}$  est la vitesse de diffusion de la composante  $i$  de l'espèce  $k$  et  $\dot{\omega}_K$  est le taux de production de l'espèce  $k$ .

On définit la vitesse de diffusion  $V_{K,i}$  par la loi de Fick comme suit :

$$V_{K,i} = -D_K \frac{\partial Y_K}{\partial x_i} \quad (\text{II.3})$$

Avec  $K : 1, \dots, N_k$  et  $D_k$  est le coefficient de diffusion de l'espèce  $k$  dans le mélange.

### II.3.2 Équations de la conservation de la quantité de mouvement

L'équation de la conservation de la quantité de mouvement, également connue sous le nom de l'équation de Navier-Stokes, est l'équation de mouvement des substances visqueuses. La conservation est dérivée en appliquant la deuxième loi de Newton à un fluide passant à travers un volume de contrôle infinitésimal, ainsi il décrit les changements de la quantité de mouvement dans l'espace et le temps. Elle est la même pour les flux réactifs et non réactifs. Elle s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (\text{II.4})$$

Avec :

- $x_i, x_j$  : les coordonnées cartésiennes dans la direction  $i$  et  $j$ .
- $\rho$  : la densité.
- $P$  : la pression statique
- $u_i, u_j$  : les composants de la vitesse dans les directions  $i$  et  $j$ .
- $\tau_{ij}$  : le tenseur visqueux, définit par :

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (\text{II.5})$$

### II.3.3 Équations de conservation de l'énergie

La loi de la conservation de l'énergie pour un écoulement réactif est donnée par l'équation :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i E) = \dot{\omega}_T - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\sigma_{ij} u_i) + \dot{Q} \quad (\text{II.6})$$

Avec :  $\dot{\omega}_T$  est le dégagement de chaleur dû à la combustion.

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,K}^0 \dot{\omega}_K \quad (\text{II.7})$$

Avec :  $\Delta h_{f,K}^0$  est l'enthalpie de formation,  $q_i$  est le flux de chaleur, elle est définie par la relation suivante :

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \rho \sum_{k=1}^N h_{s,K} Y_K V_{K,i} \quad (\text{II.8})$$

Avec :

- $h_{s,K}$  : l'enthalpie spécifique de l'espèce  $k$ .
- $\dot{Q}$  : le terme source de chaleur.
- $E$  : l'énergie totale, définit par :

$$E = h - \frac{p}{\rho} = e_s + \frac{1}{2} u_i u_i \quad (\text{II.9})$$

Avec :  $h$  est l'enthalpie,  $e_s$  est l'enthalpie sensible.

## II.4 Modélisation de la turbulence

Dans un écoulement turbulent les molécules bougent de façon aléatoire le long des trajectoires. Les équations précédentes appliquées à des phénomènes turbulents ne peuvent pas être résolues directement. Bien que les fluctuations soient chaotiques les variables de l'écoulement sont de nature déterminante. La simulation numérique des écoulements turbulents continue à rencontrer toujours des problèmes significatifs. Malgré les performances des supercalculateurs modernes, La résolution directe (*DNS*) des équations instationnaires de Navier-Stokes n'est applicable que pour des cas relativement simples à bas nombres de Reynolds. Par conséquent, l'approximation de la turbulence reste la seule issue. Pour cela, une large gamme de modèles de turbulence est développée et l'effort continue jusqu'à ce jour.

Le développement des moyens de calculs numériques permet d'étudier la plupart des phénomènes physiques en particulier les cas turbulents en se basant sur la modélisation. Il existe cinq classes principales des modèles de turbulence :

1. Modèle algébrique.
2. A une équation.
3. A plusieurs équations.
4. Fermeture du second ordre *RSM* (Reynolds Stress models)
5. Simulation des grandes échelles *LES* (Large Eddy Simulation).

### II.4.1 Équations de Navier-Stokes moyennées au sens de Favre

Pour réaliser  $N$  expériences indépendantes portant sur le même écoulement. A chaque expérience, on va enregistrer la valeur de la quantité qui nous intéresse à la même position et au même temps soit  $f^{(i)}(\vec{x}, t)$ . La moyenne d'ensemble de la quantité  $f$  en  $(\vec{x}, t)$  sera donnée par :

$$\overline{f(\vec{x}, t)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f^{(i)}(\vec{x}, t) \quad (\text{II.10})$$

A partir de cet opérateur de moyenne, on définit la décomposition de Reynolds d'une quantité quelconque de l'écoulement  $f(x, t)$  en deux parties distinctes :  $f = \bar{f} + f'$

- Par construction,  $\bar{f}' = 0$ .
- $\bar{f}$  : est la valeur moyenne. Il s'agit d'une moyenne temporelle sur une longue période  $t$  dans le cas d'un écoulement stationnaire,  $f'$  est la fluctuation.

Comme on souhaite obtenir des équations moyennées, si on utilise la décomposition de Reynolds employée pour les équations incompressibles :

- Pour un terme comme  $\rho f$  on aura :  $\rho f = \bar{\rho} \bar{f} + \bar{\rho} f' + \rho' \bar{f} + \rho' f'$
- et donc :  $\overline{\rho f} = \bar{\rho} \bar{f} + \overline{\rho' f'}$

Cette moyenne sera difficile à utiliser en écoulement compressible, en effet on souhaite que les équations moyennées gardent la même forme. Favre a donc défini un nouvel opérateur de moyenne (dit pondéré par la masse) donnée par :

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} \quad (\text{II.11})$$

La partie fluctuante de  $f$  sera donnée par :  $f = \tilde{f} + f''$  avec  $\tilde{f}'' = 0$

L'écriture des équations de Navier-Stokes moyennées en utilisant la moyenne Favre est montrée ci-dessous :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{II.12})$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial (\bar{\tau}_{ij} - R_{ij})}{\partial x_j} \quad (\text{II.13})$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h})}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j'' h''}) + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij} \tilde{u}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (k_f \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j}) \quad (\text{II.14})$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial (J_{ij})}{\partial x_j} + R_i \quad (\text{II.15})$$

Où :  $\rho$  est la densité du fluide ( $kg/m^3$ ),  $u$  est la vitesse ( $m/s$ ),  $p$  est la pression statique ( $Pa$ ),  $R_{ij}$  et  $\tau_{ij}$  sont respectivement la viscosité et le tenseur des forces visqueuses ( $Pa$ ),  $h$ ,  $k_f$  et  $T$  sont respectivement l'enthalpie spécifique ( $kJ/kg$ ), la conductivité thermique ( $W/mK$ ) et la température ( $K$ ),  $h_i$  est l'enthalpie spécifique de l'espèce  $i$  ( $kJ/kg$ ),  $J_{ij}$  est le flux de diffusion (full multicomponent diffusion and thermal diffusion) de l'espèce  $i$  dans la direction  $j$  ( $kg/m^2s$ ),  $N$  est le nombre total des espèces gazeux,  $S_h$  est la source d'énergie causé par la réaction chimique ( $kW/m^3$ ),  $Y_i$  est la fraction massique de l'espèce  $i$ ,  $R_i$  est le taux de production de l'espèce  $i$  par la réaction chimique ( $kg/m^3s$ ).

## II.4.2 Modélisation de la turbulence par l'approches RANS

Nous avons utilisé dans notre thèse pour le traitement de la turbulence, le modèle de turbulence *SST k- $\omega$*  qui est inclus dans le package du Ansys Fluent 12 [34]. C'est un modèle de turbulence à deux équations qui est utilisé pour de nombreuses applications thermodynamiques. C'est un modèle hybride combinant les modèles Wilcox  $k - \omega$  et  $k - \varepsilon$  [36]. Une fonction de mélange, *F1*, active le modèle Wilcox près du mur et le modèle  $k - \varepsilon$  dans le flux libre. Cela permet de s'assurer que le modèle approprié est utilisé dans tout le champ d'écoulement :

- Le modèle  $k - \omega$  est bien adapté pour simuler l'écoulement dans la sous-couche visqueuse et le modèle  $k - \varepsilon$  est idéal pour prédire le comportement de l'écoulement dans les régions éloignées du mur.

Les équations gouvernantes du modèle  $k - \omega$  *SST* sont définies par :

- Équation de l'énergie cinétique de la turbulence :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = P_k - \beta^* k \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\nu + \sigma_k \nu_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (II.16)$$

- Taux de dissipation spécifique :

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + U_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = \alpha S^2 - \beta \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\nu + \sigma_\omega \nu_T) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2(1 - F_1) \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \quad (II.17)$$

- Fonction de mélange  $F_1$  :

$$F_1 = \tanh \left\{ \left\{ \min \left[ \max \left( \frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\sigma_{\omega 2} k}{CD_{k\omega} y^2} \right] \right\}^4 \right\} \quad (\text{II.18})$$

Avec :  $F_1=1$  à l'intérieur de la couche limite et 0 dans le flux libre.

$$CD_{k\omega} = \max \left( 2\rho\sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i}, 10^{-10} \right) \quad (\text{II.19})$$

- Viscosité cinématique des tourbillons :

$$\nu_T = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, SF_2)} \quad (\text{II.20})$$

- Fonction de mélange  $F_2$  :

$$F_2 = \tanh \left[ \left[ \max \left( \frac{2\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right) \right]^2 \right] \quad (\text{II.21})$$

- Limiteur de production  $P_k$  :

$$P_k = \min \left( \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j}, 10\beta^* k \omega \right) \quad (\text{II.22})$$

## II.5 Modélisation de la combustion

Le choix de modèle de combustion est un étape très importante à prendre en considération, pour avoir une modélisation réussite. Pour décrire l'interaction entre la turbulence et la chimie dans la chambre de combustion d'une microturbine à gaz, le modèle ED-FR (Eddy Dissipation-Finite Rate) [37] est le plus adapté dans le cas de la flamme de diffusion et pour une cinétique chimique plus détaillé. Ce modèle est utilisé uniquement pour les écoulements tourbillonnaires, il calcule à la fois le taux d'Arrhenius et le taux de mélange, il utilise le plus petit des deux.

Pour la deuxième étude, on a choisi le modèle PPDF (Presumed Probability Density Function) pour simuler le processus de combustion, le modèle produit des résultats satisfaisant pour les écoulements réactifs non pré-mélangés et turbulents [38].

### Le modèle Finite rate :

Le taux de réaction de l'élément  $i$  est calculé selon la formule :

$$Ri = M_i \sum_{r=1}^{N_R} \hat{R}_{i,r} \quad (\text{II.23})$$

Avec :  $M_i$  est la masse molaire de l'élément  $i$  et  $\hat{R}_{i,r}$  est le taux molaire d'Arrhenius de création/destruction de l'espèce  $i$  dans la réaction  $r$ .

Considérant la réaction  $r$  s'écrit dans la forme générale suivante :



Avec :

- $N$  : Nombre des espèces chimiques dans le système.
- $\nu'_{i,r}, \nu''_{i,r}$  : le coefficient stœchiométrique de réactant  $i$  et de produit  $i$  dans la réaction  $r$  respectivement.
- $A_i$  : le symbole désignant l'espèce  $i$ .
- $k_{f,r}, k_{b,r}$  : Constantes de taux d'avance et de recule de la réaction  $r$  respectivement.

Pour une réaction non réversible, le taux molaire de création/destruction de l'espèce  $i$  en réaction  $r$  est donné par :

$$\hat{R}_{i,r} = \Gamma(\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r}) \left( k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{(\eta'_{j,r} + \eta''_{j,r})} \right) \quad (\text{II.25})$$

Avec :  $(C_{j,r})$  est la concentration molaire de l'espèce  $j$  dans la réaction  $r$ .  $(\eta'_{j,r})$  est l'exposant du taux des réactifs  $j$  dans la réaction  $r$ .  $(\eta''_{j,r})$  est l'exposant du taux des produits  $j$  dans la réaction  $r$ .

Pour une réaction réversible, le taux molaire de création/destruction de l'espèce  $i$



en réaction  $r$  est donné par :

$$\hat{R}_{i,r} = \Gamma(\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r}) \left( k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta'_{j,r}} - k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta''_{j,r}} \right) \quad (\text{II.26})$$

Avec  $\Gamma$  représente l'effet net de troisième corps sur le taux de réaction. il est défini par :

$$\Gamma = \sum_j^N \gamma_{j,r} C_j \quad (\text{II.27})$$

Où  $\gamma_{j,r}$  est l'efficacité du troisième corps de l'espèce  $j$  dans la réaction  $r$ .

La constante de taux de  $k_{f,r}$ , est calculée en utilisant l'expression d'Arrhenius.

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_r/RT} \quad (\text{II.28})$$

Si la réaction est réversible, le calcul de taux de réaction de retour  $k_{f,r}$  se fait selon la formule :

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{K_r} \quad (\text{II.29})$$

Où  $K_r$  est la constante d'équilibre pour la réaction  $r$ , calculé par :

$$K_r = \exp \left( \frac{\Delta S_r^0}{R} - \frac{\Delta H_r^0}{RT} \right) \left( \frac{P_{atm}}{RT} \right)^{\sum_{i=1}^N (\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r})} \quad (\text{II.30})$$

### Le modèle Eddy dissipation :

Basé sur le travail de Magnussen et al. [37], le taux net de production de l'espèce  $i$  due à la réaction  $r$ ,  $R_{i,r}$  est défini par la petite valeur des deux équations présenté en dessous :

$$R_{i,r} = \nu'_{i,r} M_i A \rho \frac{\varepsilon}{k} \left( \frac{Y_R}{\nu'_{R,r} M_{w,R}} \right) \quad (\text{II.31})$$

$$R_{i,r} = \nu'_{i,r} M_i A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j \nu''_{j,r} M_{w,j}} \quad (\text{II.32})$$

- $Y_P$  : la fraction massique de n'importe quelle espèce dans les produits  $P$ .
- $Y_R$  : la fraction massique d'un réactant particulier  $R$ .
- $A$  : Une constante empirique égale à 4.0
- $B$  : Une constante empirique égale à 0.5

Le modèle ED-FR a été utilisé avec un mécanisme de réaction qui contient 21 espèces ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}_3$ ,  $\text{HCO}$ ,  $\text{CH}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_3\text{O}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{C}_3\text{H}_7$ ,  $\text{C}_3\text{H}_8$ , et  $\text{N}_2$ ) et 86 réactions. Le mécanisme réactionnel est une version réduite de GRIMECH 3.0 [39]. Il est obtenu par éliminations des espèces dont leurs fractions massiques est inférieure à 0.001. Il est utilisé pour la combustion de mélange carburant d'hydrogène-gaz naturel avec l'air.

Le mécanisme réduit comporte les réactions nécessaires pour reproduire de près les principales caractéristiques de la combustion dans une microturbine à gaz. Il a été prouvé que les prédictions obtenues en utilisant ce mécanisme sont très proches aux résultats expérimentaux, particulièrement sur la distribution de la température dans la Chambre de Combustion.

## Le modèle PPDF :

Pour la deuxième étude de comparaison, le modèle chimique utilisé est le PPDF (presumed probability density function) qui produit des résultats satisfaisant pour les écoulement réactifs non pré-mélangé et turbulent. Dix espèces chimiques ont été résolues en utilisant l'équilibre chimique : ( $CH_4$ ,  $O_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $H_2$ ,  $OH$ ,  $N_2$ ,  $N_2O$ ,  $NO$ ).

Les fluctuations turbulentes des réactants et la température sont décrites en utilisant le PDF présumé. Les taux de réaction sont obtenus par l'intégration de PDF présumé. Ce modèle a l'avantage de prendre en considération l'influence des tourbillons sur les taux de réaction. Pour la combustion non pré-mélangée, le carburant et l'air sont injectés séparément dans la chambre de combustion. Il est supposé que le temps nécessaire pour la convection et la diffusion est beaucoup plus grand pour celui de la réaction, de ce fait, le processus réactionnel est principalement déterminé par le processus de mélange turbulent. Pour cette situation, un scalaire  $f$  nommé fraction de mélange, est utilisé pour décrire le processus de mélange. Pour cela, au lieu de résoudre l'équation de transport, une équation pour le facteur de mélange est résolue :

$$\frac{\partial(\overline{\rho f u_j})}{\partial x_j} = \frac{\partial[(\mu_t/\sigma_t)(\partial \bar{f}/\partial x_j)]}{\partial x_j} \quad (II.33)$$

La fraction de mélange  $f$  peut aussi s'écrire en termes de fraction massique, comme :

$$f = \frac{Y_k - Y_{k,O}}{Y_{k,F} - Y_{k,O}} \quad (II.34)$$

Avec :  $Y_k$  est la mass fraction de l'élément  $k$ ,  $F$  et  $O$  signifient l'entrée de carburant et l'entrée d'air respectivement.

## II.6 Modèles NOx

Le mécanisme chimique réduit qui a été utilisé dans notre étude comprend la chimie de l'azote, d'où la prédiction de la concentration de  $NO$  dans les produits de la combustion. La formation de  $NO$  thermique est calculée par l'utilisation du mécanisme de Zeldovich [40] qui contient une formulation étendue à trois réactions avec une hypothèse de régimes quasi stationnaires pour la concentration de l'atome d'azote.



Avec :

$$k_{f,1} = 1.8 \times 10^8 e^{-38370/T}$$

$$k_{r,1} = 3.8 \times 10^7 e^{-425/T}$$

$$k_{f,2} = 1.8 \times 10^4 e^{-4680/T}$$

$$k_{r,2} = 3.81 \times 10^3 e^{-20820/T}$$

$$k_{f,3} = 7.1 \times 10^7 e^{-450/T}$$

$$k_{r,3} = 1.7 \times 10^8 e^{-24560/T}$$

Dans les expressions ci-dessus,  $k_{f,1}$ ,  $k_{f,2}$  et  $k_{f,3}$  sont les constantes de vitesse des réactions, et  $k_{r,1}$ ,  $k_{r,2}$ , et  $k_{r,3}$  sont les constantes de vitesse des réactions de retour correspondantes. Toutes ces constantes ont des unités de  $m^3/gmol \cdot s$ .

La vitesse nette de la formation de  $NO$  est définie par :

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_{f,1}[O][N_2] + k_{f,2}[N][O_2] + k_{f,3}[N][OH] - k_{r,1}[NO][N] - k_{r,2}[NO][O] - k_{r,3}[NO][H] \quad (II.38)$$

Toutes les concentrations ont une unité de  $gmol/m^3$ .

# Chapitre III

## Procédures numériques

### Sommaire

---

III.1 Méthode des volumes finis et discrétisation . . . . .	43
III.2 Description du problème . . . . .	43
III.3 Géométrie et maillage . . . . .	46
III.4 Conditions aux limites . . . . .	49
III.5 Configuration des paramètres numériques . . . . .	52
III.6 Comparaison des modèles de turbulence . . . . .	53
III.7 Validation des résultats primaire . . . . .	54

---

### III.1 Méthode des volumes finis et discrétisation

Parmi les différentes méthodes de discrétisation, la présente étude utilise celle des volumes finis, ou le code de calcul CFD ANSYS Fluent 16 est utilisé pour faire la discrétisation des équations différentielles aux dérivées partielles. Cette méthode de discrétisations a été développée par Patankar [41] qui est recommandée pour la résolution des équations de Navier-Stokes.

La méthode des volumes finis est caractérisée par son avantage à satisfaire la conservation de masse, de quantité, de mouvement et d'énergie dans tous les volumes finis ainsi dans tout le domaine de calcul. Elle facilite la linéarisation des termes non linéaires dans les équations de conservation, telle que le terme source par exemple.

La méthode consiste à partager le domaine de calcul en plusieurs volumes, où chaque volume entoure un nœud. En utilisant différents schémas d'approximations, on peut intégrer les termes des équations différentielles modélisant sur chaque volume de contrôle, où les valeurs et les quantités sont stockées aux nœuds du volume de contrôle. Les équations algébriques produites expriment la conservation des quantités pour le volume de contrôle et pour tout le domaine de calcul.

### III.2 Description du problème

La microturbine à gaz de type ELLIOTT TA 80R (voir figure III.1) a été étudiée. Elle est conçue pour produire une énergie électrique d'une puissance de 80kW. Dans le présent travail, la chambre de combustion de type RQL (Rich-Quick quench-Lean) a été réalisée la même que celle d'origine. Les dimensions réelles de la Chambre de Combustion ont été fournies par Fantozzi et al. [42].

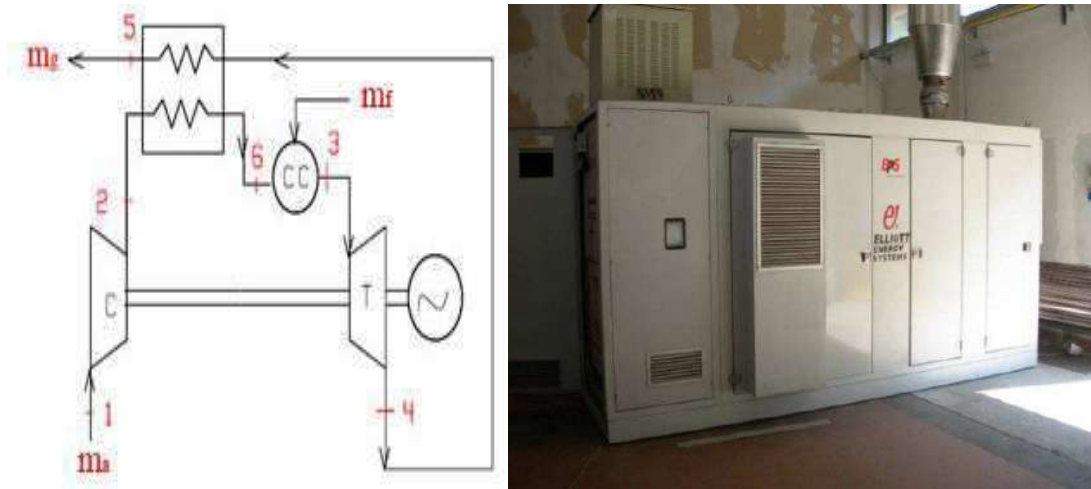


FIGURE III.1 – Microturbine à gaz ELLIOTT TA 80R [42].

La chambre de combustion est de forme cylindrique (voir figure III.2), Un système bien conçu à base de cavités qui permettent un meilleur mélange carburant-air, une flamme mieux stabilisée, une réduction des émissions et un rendement de combustion élevé. Pour cette étude, comme la chambre de combustion est cylindrique, un domaine de  $30^\circ$  a été obtenu par périodicité, il est représenté sur la figure III.3(a). Le domaine contient un seul injecteur de carburant et un seul tube de mélange. La technique RQL (voir figure III.3(b)) consiste à brûler le combustible bien au-dessus les conditions stœchiométriques dans un premier stade (Rich zone) afin d'éviter l'apparition simultanée de température élevée et de disponibilité d'oxygène, tous deux responsables de la production de NO thermique. Le CO et les hydrocarbures non brûlés générés dans la première étape seront oxydés sous conditions et températures plus basses dans la zone pauvre (Lean zone). La transition de la zone riche à la zone pauvre est obtenue par l'introduction de jets d'air qui diluent le mélange en un second stade appelé zone de trempe (Quick-quench), où le flux est accéléré dans afin de limiter le temps de séjour dans cette zone potentiellement stœchiométrique [43].



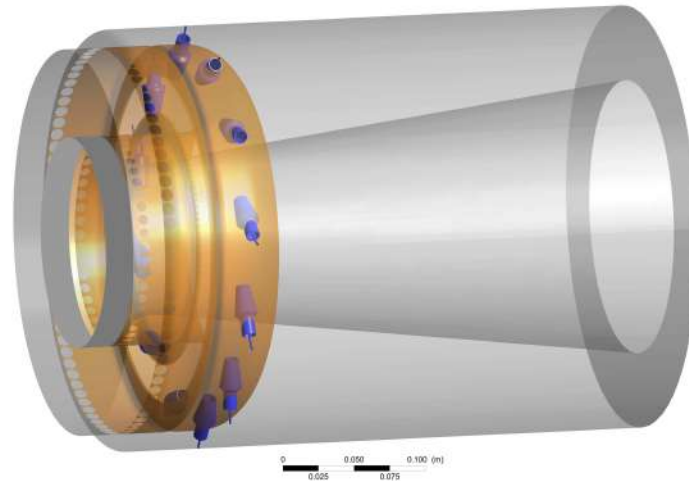


FIGURE III.2 – Chambre de combustion de la MGT ELLIOTT TA 80R.

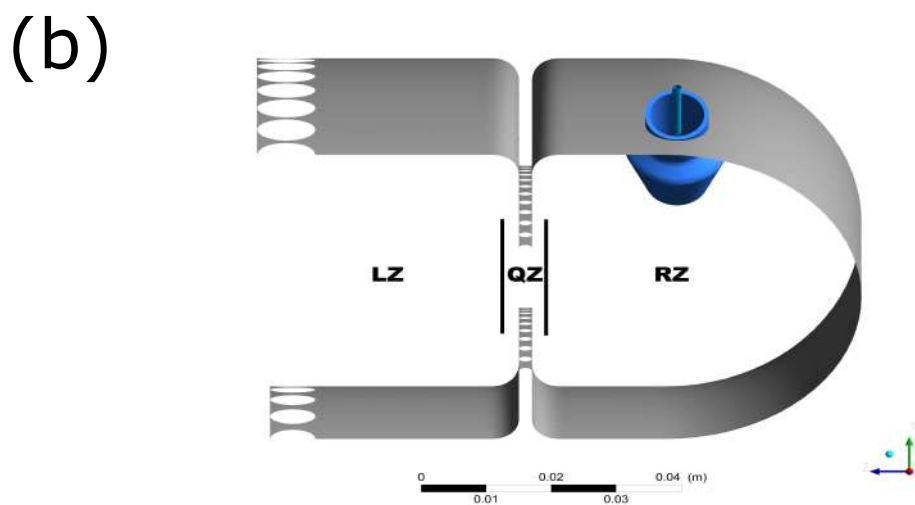
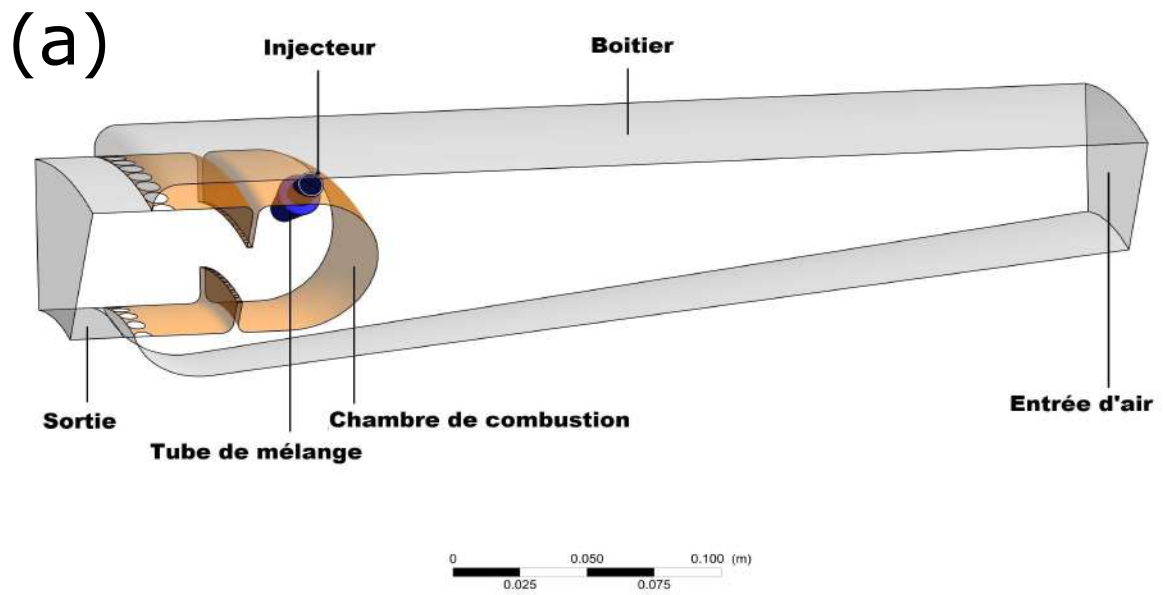


FIGURE III.3 – (a)Domaine périodique de la chambre de combustion. (b)Zones RQL.

La chambre de combustion est conçue spécialement pour la combustion du gaz naturel, elle contient 12 injecteurs de carburant répartis de façon uniforme sur le périmètre de la chambre à l'intérieur des tubes de mélange (rich zone). La zone de dilution (lean zone) est constituée de 84 trous avec 9mm de diamètre sur la partie supérieure et 48 trous avec 7mm de diamètre sur la partie inférieure de la CC. La zone secondaire (ou Quick-quench zone) contient 144 trous ( $d=2\text{mm}$ ) sur la partie supérieure et 120 trous ( $d=2\text{mm}$ ) sur la partie inférieure. La chambre de combustion, les injecteurs ainsi que les tubes de mélange ont été conçus par un matériau Alloy-X.

L'injecteur pour la combustion de gaz naturel est conçu d'une façon spéciale, avec 3 trous qui injectent le carburant face aux parois intérieures du tube de mélange. Il existe un autre type d'injecteurs peut être utilisé pour la combustion de gaz de synthèse. Il contient un seul trou dirigé vers la zone primaire de la CC (voir figure III.4).

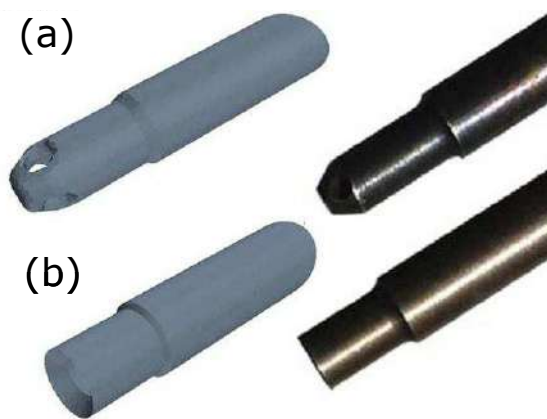


FIGURE III.4 – (a)Injecteur pour gaz naturel. (b)Injecteur pour gaz de synthèse. [42].

### III.3 Géométrie et maillage

Un maillage 3D tétraédrique est réalisé en utilisant Ansys Meshing. Des mailles plus fines à l'intérieur de tube de mélange où la réaction chimique de la combustion aura lieu. Ainsi, Des mailles plus fine à l'intérieur de la chambre de combustion qu'à l'extérieur. Un raffinement au niveau des trous de dilution, là où les propriétés physico-chimiques de l'écoulement change rapidement. La structure finale de maillage contient 1,607,287 éléments. Le maillage représente 1/12 -ème de volume total de la chambre de combustion, en profitant de la périodicité cylindrique voir figure III.5.

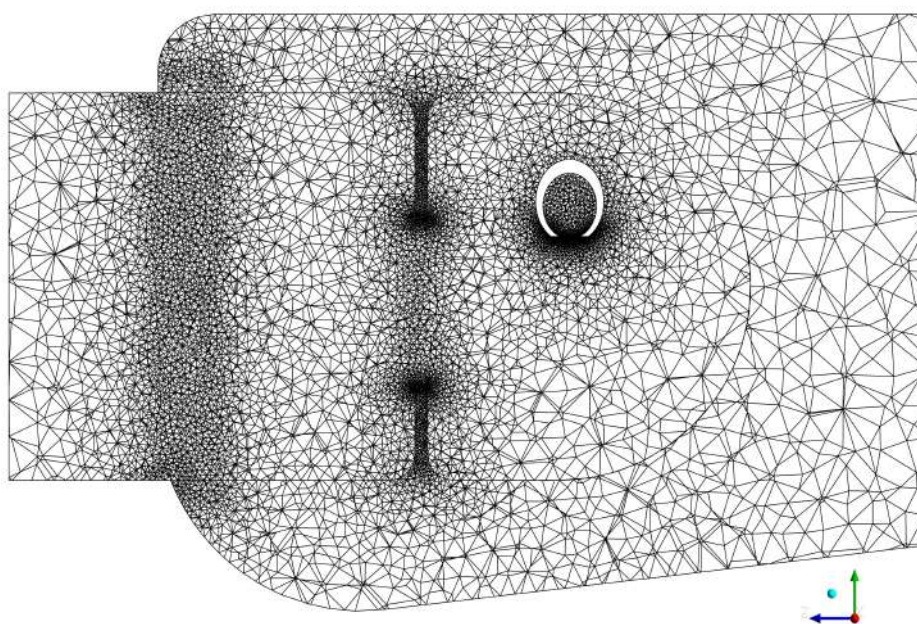
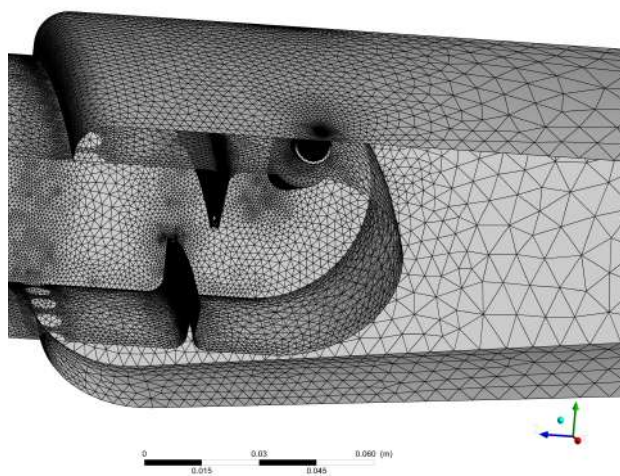
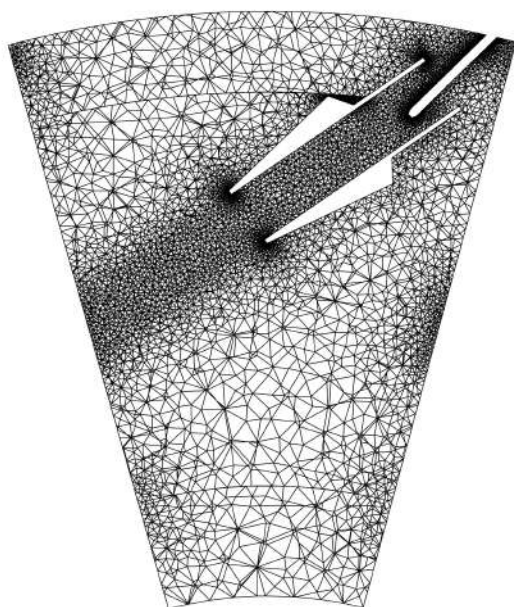
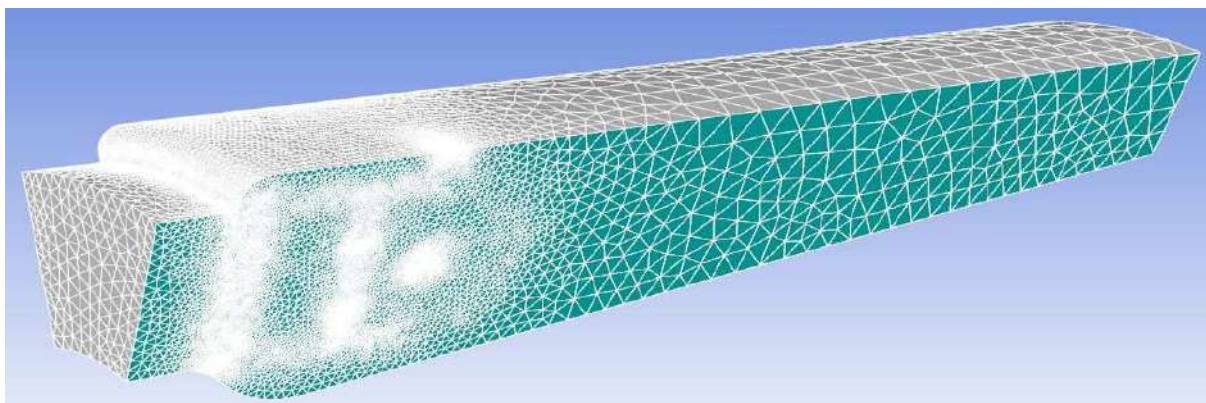


FIGURE III.5 – Maillage de la chambre de combustion.

Un test d'indépendance de maillage par rapport à la solution a été effectué en comparant les résultats obtenus en utilisant 6 grilles différents, variant de 0.6 à 3.1 millions d'élément. Les six maillages ont été réalisés en gardant le même facteur de variation de dimension de la maille surtout dans les zones de raffinement. Le test de maillage est représenté sur la figure III.6. Il a été constaté que la solution devenait indépendante de maillage à partir de 1,6 millions d'éléments. Dans la figure III.7 montre les courbes de la vitesse d'écoulement ( $W$ ) en fonction de 3 maillages et suivant la longueur de la chambre. On peut remarquer que la courbe de 1,6 millions d'éléments superpose sur la courbe de 3.1 éléments. De ce fait, on a adopté le maillage avec celui de 1,6 éléments car il donne des résultats précis avec un temps de calcul plus court.

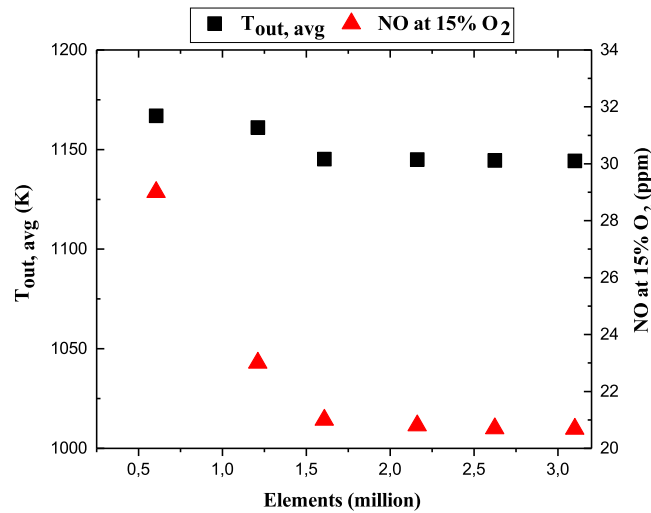


FIGURE III.6 – Analyse de la sensibilité de maillage.

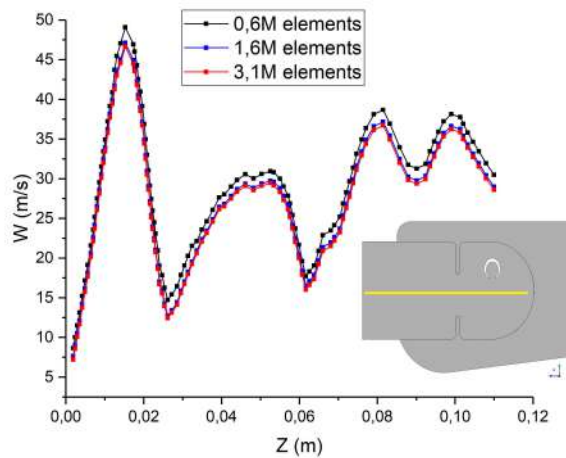


FIGURE III.7 – Analyse de maillage sur la vitesse de l'écoulement.



Pour la deuxième étude de comparaison, Star CCM+ nous a permis un maillage 3D cartésien en multi bloc (voir figure III.8). Des mailles plus fines à l'intérieur de tube de mélange ou la réaction chimique de la combustion aura lieu. On a défini des volumes de contrôle de maillage qui portent des mailles plus fines. Un nombre total de 1,345,710 éléments ont été utilisés.

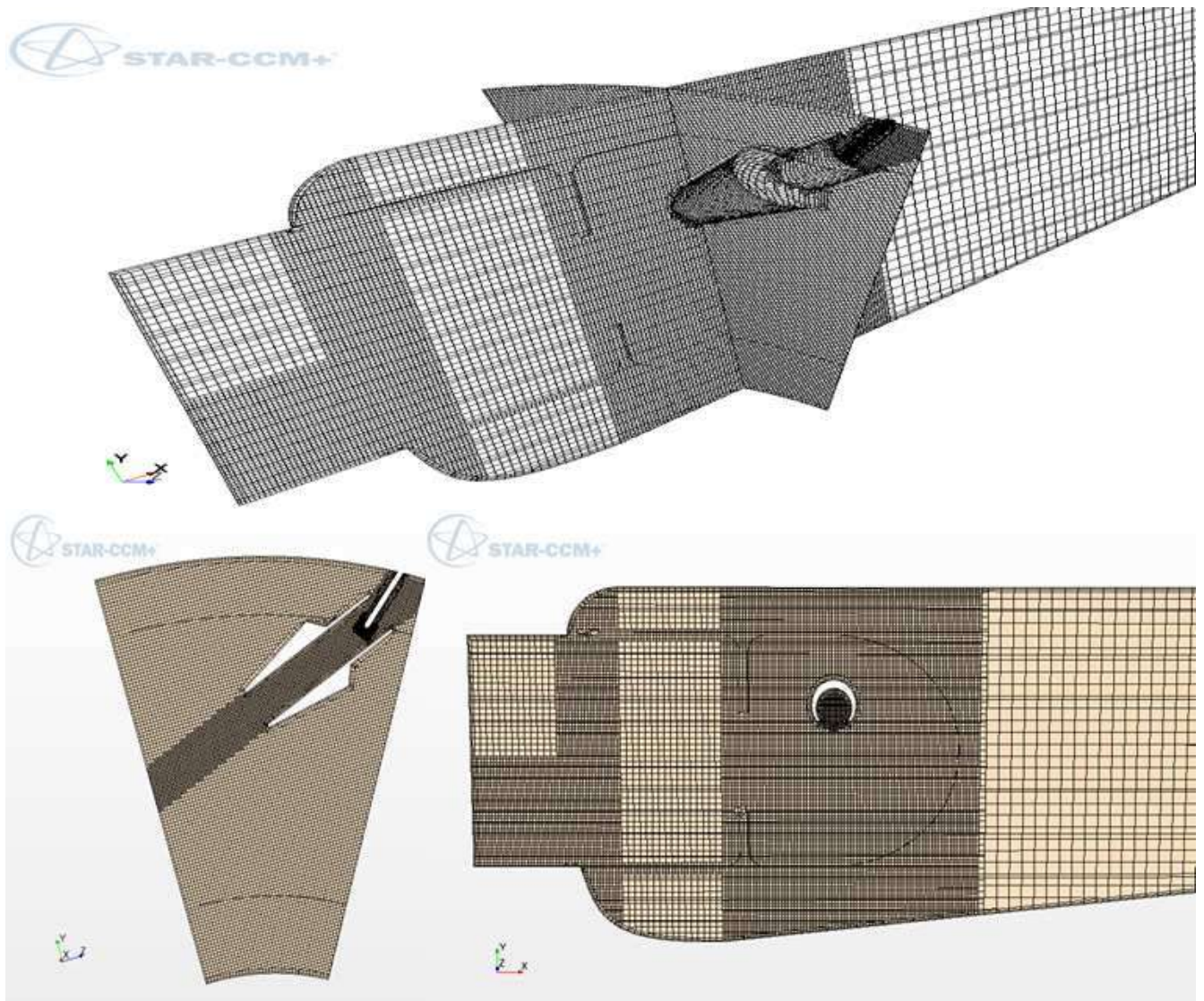


FIGURE III.8 – Maillage de la chambre de combustion en utilisant Star CCM+.

### III.4 Conditions aux limites

Dans ce travail, les mêmes conditions aux limites utilisées par Fantozzi et al. [42] lorsque micro turbine à gaz est en charge maximale (80kw), ont été adoptées et présentées dans le tableau III.1 :

TABLEAU III.1 – Conditions aux limites du domaine en charge maximale.

Paramètre (Unit)	Valeur
$\dot{m}_f(kg/s)$	0.000553
$\dot{m}_a(kg/s)$	0.0665
$T_f(K)$	290
$P_f(bar)$	5.8
$T_a(K)$	812
$P_a(bar)$	3.834

La composition et les propriétés de gaz naturel et de l'hydrogène [44] sont présentées sur le tableau III.2. On peut remarquer que même si la densité de gaz naturel est 8 fois grandes par rapport à celle de l'hydrogène, ce dernier a le plus grand pouvoir calorifique.

TABLEAU III.2 – Comparaison de compositions et propriétés.

Composition (mass molaire)	Gaz Naturel	Hydrogène
$CH_4$	0.92	–
$C_2H_6$	0.037	–
$C_3H_8$	0.01	–
$C_4H_{10}$	0.0025	–
$H_2$	–	1
$CO_2$	0.15	–
$N_2$	0.029	–
<b>Mass molaire (g/mole)</b>	17.34	2.02
<b>PCI (kJ/kg)</b>	47182	120971

La figure III.9 montre la variation de la fraction massique du gaz naturel par rapport à la fraction molaire de l'hydrogène dans le mélange carburant. On peut remarquer qu'à 80% d'hydrogène dans le mélange, la fraction massique du gaz naturel reste supérieure à 0.65.

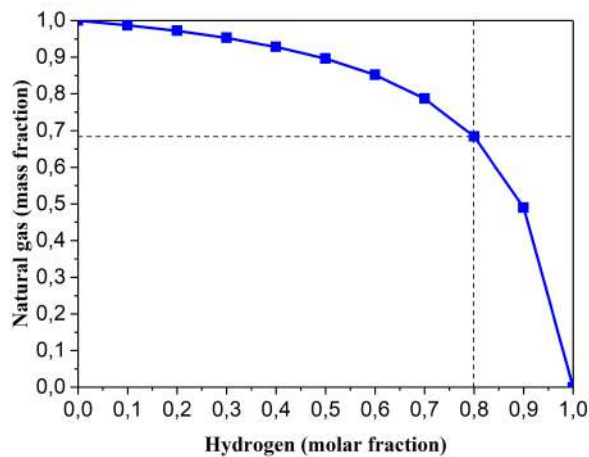


FIGURE III.9 – Fraction massique de GN vs. Hydrogène dans le mélange.

On a supposé que les parois de la chambre de combustion (liner) à un baffle avec une épaisseur 0. Une surface lisse, stationnaire et imperméable. Une conductivité thermique celle d'Alloy X (*UNS N06002*) égale à  $93,06 \text{ (W m}^{-1} \text{ K}^{-1}\text{)}$  a été spécifiée sur les parois de la CC. Ceci, pour que la quantité de chaleur transférée à travers la CC peut être calculée. Le boîtier a été supposé être lisse, imperméable et non adiabatique.

Pour la deuxième étude de comparaison en utilisant STAR CCM+, on a utilisé les mêmes conditions aux limites présentées auparavant. Le tableau III.3 représente la composition de gaz de synthèse choisi pour cette étude [45]. Le gaz de synthèse est un gaz extrait par pyrolyse de la matière organique. L'avantage de gaz de synthèse c'est qu'il est riche en hydrogène et pauvre en carbone donc production faible de CO et il est 3 fois plus économique que le gaz naturel. Le désavantage de gaz de synthèse c'est qu'il est très toxique avant combustion (il contient un pourcentage important de CO) et il est plus rapide à bruler que le gaz naturel donc difficile à stocker. La figure III.10 montre la variation de la fraction massique du gaz de synthèse par rapport à la fraction molaire de l'hydrogène dans le mélange carburant.

TABLEAU III.3 – Composition et propriétés de gaz de synthèse.

Espèces	Fraction molaire
$CH_4$	0.21
$CO$	0.29
$CO_2$	0.38
$H_2$	0.07
$N_2$	0.05
$PCI$ (kJ/kg)	9000

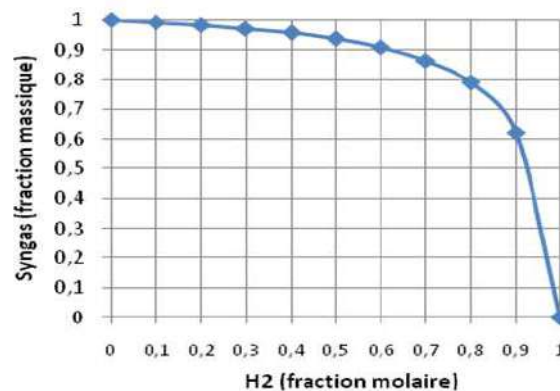


FIGURE III.10 – Fraction massique de SG vs. Hydrogène dans le mélange.

### III.5 Configuration des paramètres numériques

Dans ce travail, pour réaliser les différentes simulations numériques, on a utilisé les paramètres de configurations présenté ci-dessous :

- Type de solveur "pressure based", calcul instationnaire, l'effet de la gravité est négligeable. Type de gaz utilisé "gaz parfait".
- Pression opérationnelle est 376400 kPa, Pression de sortie est la pression atmosphérique, température minimale est 298k.
- Traitement de l'énergie est non adiabatique, l'état de relaxation est l'équilibre chimique.
- Schéma utilisé pour le couplage pression-vitesse est "SIMPLE", discrétisation spatiale pour le gradient c'est "Least square cell based", pour la pression c'est "PRESTO!" et "deuxième ordre upwind" pour les autres paramètres.



- Facteur de sous relaxation pour la pression est 0.3, pour la densité est 1, pour le moment est 0.7, pour les coefficients de turbulence c'est 0.8 et 1 pour les autres paramètres.
- Méthode d'initialisation "initialisation hybride". Pas de temps utilisé est 0.01s, maximum itérations pour chaque pas de temps est 10.

Pour une simulation avec 2000 itérations, il faut environ 16,54 heures *CPU* sur 12 cœurs de traitement. La solution convergente est atteinte lorsque les résidus soient inférieures, à  $10^{-4}$  pour la continuité, à  $10^{-6}$  pour l'énergie, à  $10^{-5}$  pour le moment et à  $10^{-5}$  pour la turbulence.

Remarque : Il n'y a pas une valeur précise de  $Y^+$ , en raison que le maillage a été réalisé par une méthode de maillage automatique optimal pour ce cas de géométrie.

## III.6 Comparaison des modèles de turbulence

Une étude sur trois différents modèles de turbulence a été réalisée afin de comparer leurs performances et choisir le modèle le plus adapté. Cette étude est faite pour la combustion du gaz naturel / Air dans un régime instationnaire en 3D. Une comparaison entre le modèle  $k - \varepsilon$  standard (3D), le modèle  $k - \omega$  SST (3D) et le modèle *LES* (3D) est montré sur la figure III.11. Elle représente la distribution du champ de vitesse tangentielle suivant l'axe de  $z$ , pour les 3 modèles de turbulence.

A première vue, on constate qu'il y a des régions (zone bleu) où la vitesse est négative, cela indique qu'il existe des vortex importants dans la chambre de combustion. On peut remarquer que lorsqu'on a utilisé le modèle *LES*, les tourbillons dans la zone riche sont bien détectés. Or, le modèle  $k - \omega$  SST a bien détecté les tourbillons dans la zone riche mieux que le modèle  $k - \varepsilon$ .

Due au manque des résultats expérimentaux pour validation concernant la distribution de vitesse ou de température dans la chambre de combustion. Par conséquent, dans la suite des calculs, on a adopté le modèle de turbulence  $k - \omega$  SST.

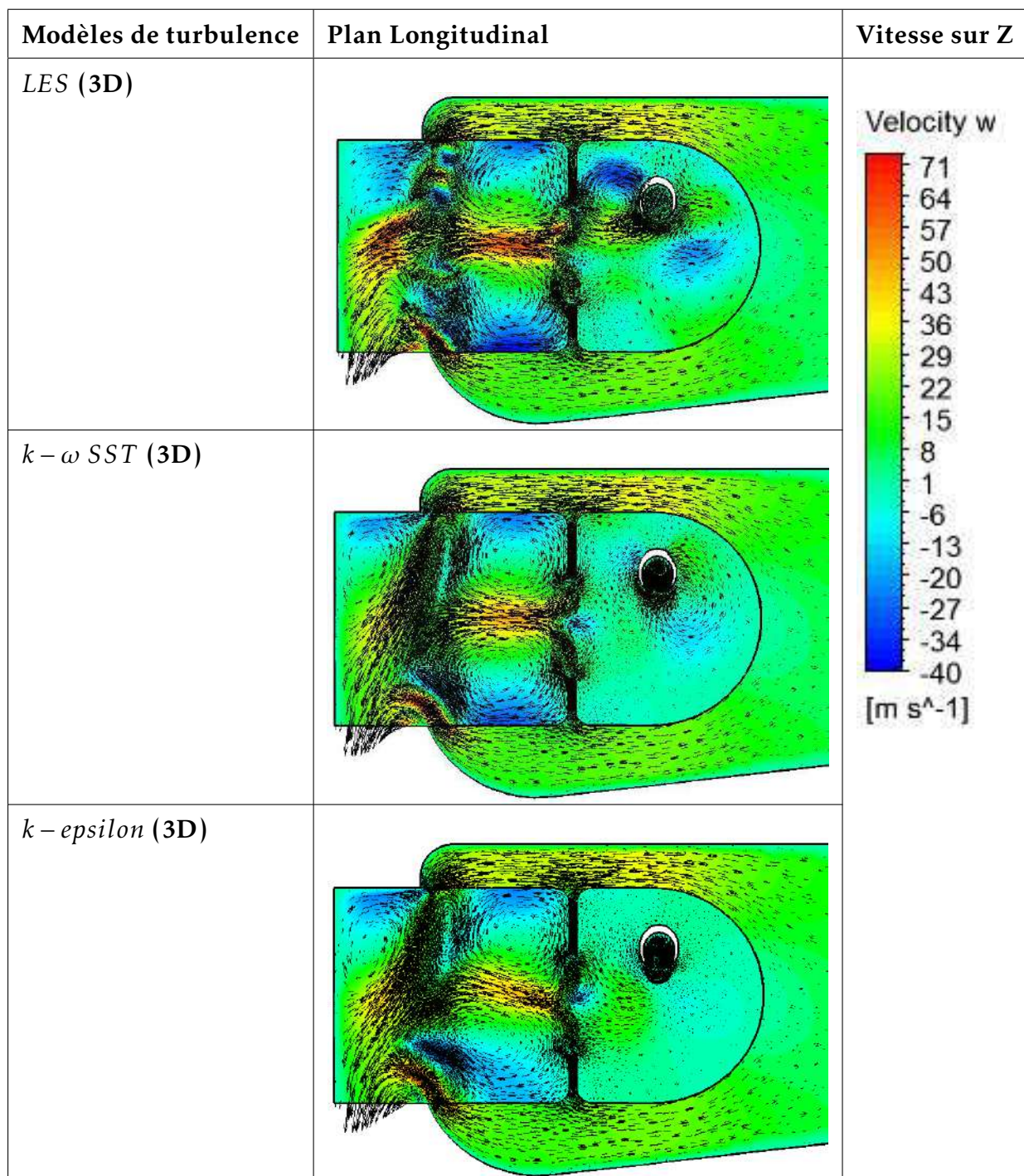


FIGURE III.11 – Profiles de vitesses par rapport aux modèles de turbulence.

### III.7 Validation des résultats primaire

Pour confirmer la faisabilité et l'exactitude de l'analyse numérique, une comparaison avec les résultats expérimentaux sont effectués pour la validation. Fantozzi et al.

[42] ont étudié la combustion de gaz naturel/air dans la même chambre de combustion RQL, avec la variation de puissance de 10 kW à 80 kW. Les données disponibles pour les conditions aux limites qui correspondent à des charges de 10 kW, 40 kW et 80 kW sont présentées dans les travaux de Laranci et al. [46]. La température moyenne de sortie et le débit volumétrique de  $CO_2$  de la chambre de combustion sont illustrés à la Figure III.12. Les résultats numériques montrent une bonne concordance avec les résultats expérimentaux. Cependant, seulement le résultat celui en charge maximale (80kW) est le plus intéressant. En outre, pour les résultats de 10kW et 40 kW, on croit que cette concordance entre le numérique et l'expérimentale n'a pas de signification en raison d'une pénurie des données expérimentales réelles pour réaliser ces simulations.

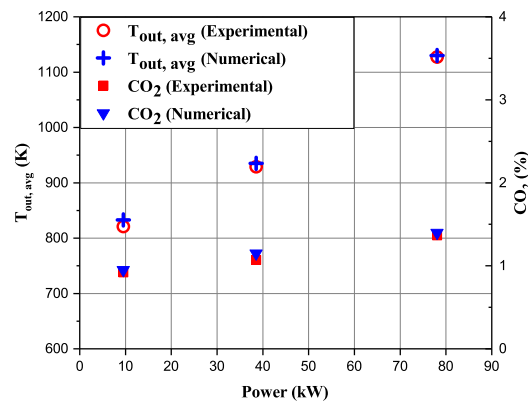
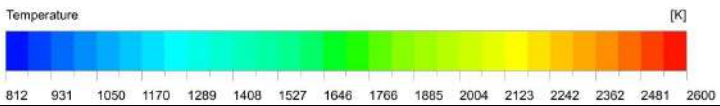
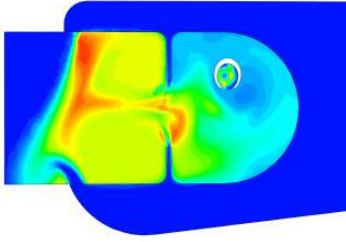
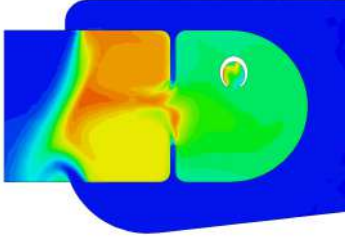


FIGURE III.12 – Comparaison de la température moyenne de sortie et de la fraction molaire de  $CO_2$  pour des résultats numériques et expérimentaux [42]

La comparaison entre la présente simulation avec le mécanisme réduit de GRI-MECH 3.0, avec le mécanisme réactionnel de 9-étapes et les données expérimentales [42] sont affichées dans le tableau III.4. Le mécanisme de 9 étapes est basé sur 9 réactions chimiques, y compris :

- Les mécanismes de réaction en deux étapes pour le  $CH_4$  et le  $CO$  l'oxydation [47].
- Les mécanismes de réaction en quatre étapes : l'oxydation du  $CH_4$ , la dissociation du  $CH_4$  dans l'eau, l'oxydation de  $H_2$  et la dissociation du  $CO$  dans l'eau [48].
- Trois réactions réversibles représentant le mécanisme de Zeldovich pour la formation de  $NO$ . [40] ont été ajoutées.

TABLEAU III.4 – Comparaison des paramètres à la sortie de CC.

			
			
Paramètres de sortie	Exp. data [42]	Mécanisme réduit de GRIMECH 3.0	Mécanisme à 9-étapes
$T_{out}$ (K)	1126	1124	1129
$O_2$ (fraction molaire)	0.184	0.179	0.183
$CO_2$ (fraction molaire)	0.0137	0.0139	0.0144
CO ppm à 15% $O_2$	97	9	92
NO ppm à 15% $O_2$	48	5908	59

La combustion du gaz naturel avec de l'air dans la chambre de combustion à pleine charge montre une bonne concordance entre les données expérimentales et les simulations actuelles, dans le cas des fractions molaires  $O_2$  et  $CO_2$  et de la température de sortie. Cependant, la simulation actuelle avec le mécanisme réduit de GRIMECH 3.0 montre une valeur sous-estimée du monoxyde de carbone (CO), et une valeur surestimée de l'oxyde nitrique (NO), malgré le fait qu'il s'agissait du schéma chimique le plus détaillé. Les mêmes phénomènes ont été observés par Cameretti et al. [45]. En outre, le mécanisme de réaction à 9 étapes utilisé a donné des valeurs plus proches de NO et CO à celles des données expérimentales.

La distribution de la température indique que l'utilisation du mécanisme réduit de GRIMECH 3.0 a permis d'obtenir un profil de température beaucoup plus lisse que dans le cas du mécanisme de réaction à 9 étapes. Ceci peut être justifié par le fait que le mécanisme réduit de GRIMECH 3.0 étant le schéma le plus détaillé, le taux de formation des produits de combustion finaux pour le processus d'auto-inflammation est plus faible que dans le cas du mécanisme de réaction à 9 étapes.

Rappelons que l'objectif de la présente simulation est d'étudier l'effet de la substitution de l'hydrogène dans le gaz naturel, sur la performance de la combustion dans la chambre de combustion RQL. Le mécanisme réduit de GRIMECH 3.0 a été utilisé en raison de sa bonne distribution par rapport au profil de température, malgré l'écart entre les émissions de  $CO$  et de  $NO$ . La principale préoccupation est la description de l'effet de substitution de l'hydrogène sur la variation des polluants.

# Chapitre IV

## Résultats et discussions

### Sommaire

---

<b>IV.1 La combustion du mélange Gaz naturel-Hydrogène . . . . .</b>	<b>59</b>
IV.1.1 Injection de carburant à débit massique constant . . . . .	59
IV.1.2 Injection de carburant à vitesse constante . . . . .	64
<b>IV.2 Comparaison sur les effets d'addition d'hydrogène . . . . .</b>	<b>69</b>
IV.2.1 La combustion de gaz naturel-Hydrogène (STAR CCM+) . . .	69
IV.2.2 La combustion de gaz de synthèse-Hydrogène (STAR CCM+) .	72
<b>IV.3 Conclusions . . . . .</b>	<b>76</b>

---

## IV.1 La combustion du mélange Gaz naturel-Hydrogène

Dans ce travail, une simulation numérique (CFD) tridimensionnel de la combustion de mélange carburant gaz naturel-hydrogène avec de l'air a été résolue en utilisant ANSYS Fluent (version 16.0). Les équations ont été résolues en régime permanent.

Tous les cas ont été calculés avec un débit massique d'air égal à  $0,065 \text{ kg/s}$  à  $812 \text{ K}$  et  $3,834 \text{ bar}$ , le débit massique pour le gaz naturel est égal à  $0,000553 \text{ kg/s}$  à  $290 \text{ K}$  et  $5,8 \text{ bar}$ . Le rapport d'équivalence global est proche de  $0,135$  et l'apport total de chaleur est d'environ  $310 \text{ kW}$ . Pour étudier les caractéristiques de la chambre de combustion alimentée avec le carburant mélangé ( $GN/H_2$ ), le pourcentage d'hydrogène est utilisé comme paramètre. Plusieurs simulations ont été effectuées pour diverses valeurs de la fraction molaire de l'hydrogène, en commençant par  $0\%$  jusqu'à  $90\%$  avec un pas de  $10\%$ . Les résultats calculés dans le premier cas présentent l'effet de la variation de l'hydrogène sur les phénomènes de combustion à un débit massique de carburant fixe, tandis que dans le second cas présentent l'effet de l'hydrogène sur les phénomènes de combustion à une vitesse fixe du carburant.

### IV.1.1 Injection de carburant à débit massique constant

Les profils de température sont présentés dans le plan longitudinal 2D de l'axe central et dans la section perpendiculaire qui traverse l'injecteur de combustible de la chambre de combustion. La figure IV.1 montre les distributions de température dans les deux plans pour les quantités de  $0\%$ ,  $20\%$ ,  $40\%$ ,  $60\%$  et  $80\%$  d'hydrogène. La température augmente graduellement au fur et à mesure que la quantité d'hydrogène augmente.



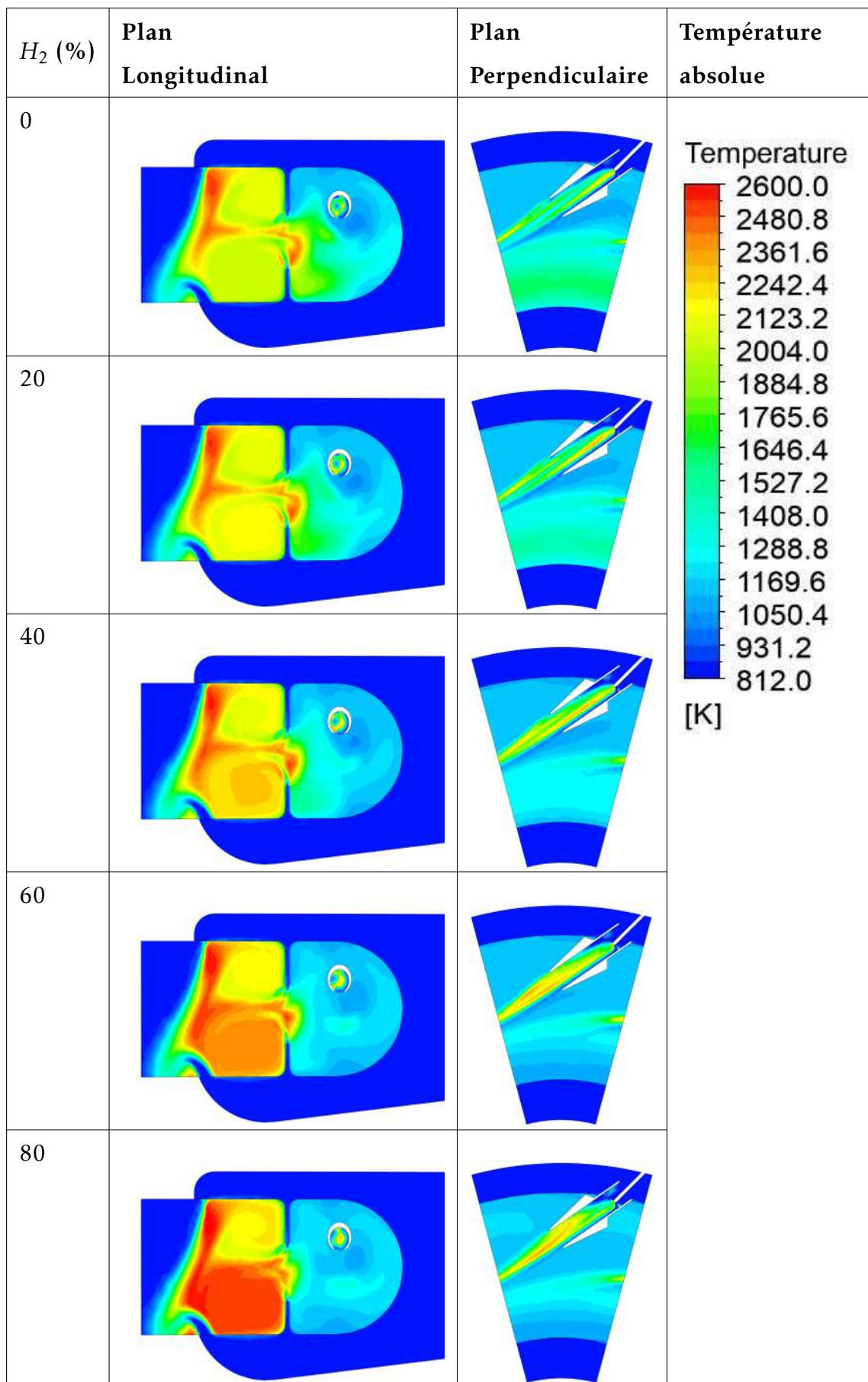


FIGURE IV.1 – Distribution de la température à débit massique constant.



En raison de l'augmentation du dégagement de chaleur du combustible mélangé, qui est une conséquence de l'augmentation de la quantité d'hydrogène qui a un pouvoir calorifique nettement supérieur. Plus précisément, la température moyenne dans la zone riche diminue continuellement, contrairement à la zone pauvre où elle augmente continuellement. Cette différence est due à la faible densité et à la grande diffusivité de l'hydrogène.

La figure IV.2 montre clairement que l'hydrogène peut facilement atteindre la zone pauvre avant d'être consommé, tandis que le méthane, qui est le principal composant du gaz naturel, est consommé entre le tube mélangeur et la zone riche.

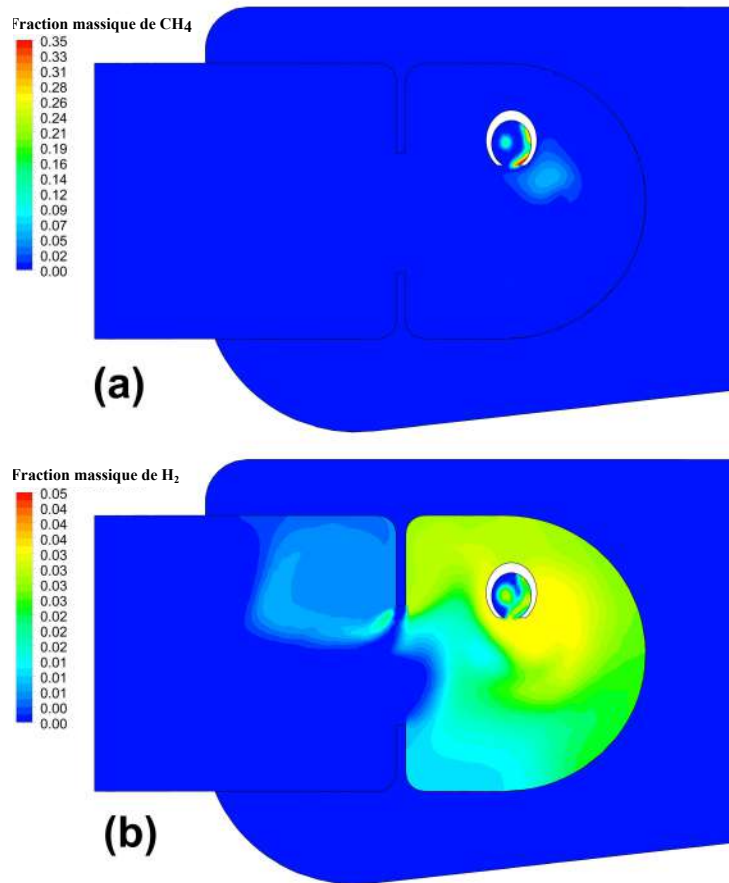


FIGURE IV.2 – Distribution des fractions massiques de (a)  $CH_4$  et de (b)  $H_2$  à 40% d'hydrogène.

Les variations de température moyenne dans la zone riche ( $T_{rz,avg}$ ), la zone pauvre ( $T_{lz,avg}$ ), la sortie de la chambre de combustion ( $T_{out,avg}$ ) et le facteur de forme ( $PF$ ) en fonction du pourcentage d'hydrogène sont représentées sur la figure IV.3. Les résultats montrent qu'avec l'augmentation des pourcentages d'hydrogène, la température moyenne dans la zone riche diminue continuellement de 1483 K à 1192 K, tandis que

la température moyenne dans la zone pauvre augmente de 2082 K à 2351 K. Comme la densité du carburant mélangé diminue avec le remplacement de l'hydrogène, la vitesse à l'entrée du carburant augmente continuellement pour maintenir le débit de carburant constant. Par conséquent, la zone à haute température se déplace vers la zone pauvre. En raison de la haute diffusivité de l'hydrogène, la température moyenne de sortie de la chambre de combustion augmente continuellement de 1124 K à 1320 K.

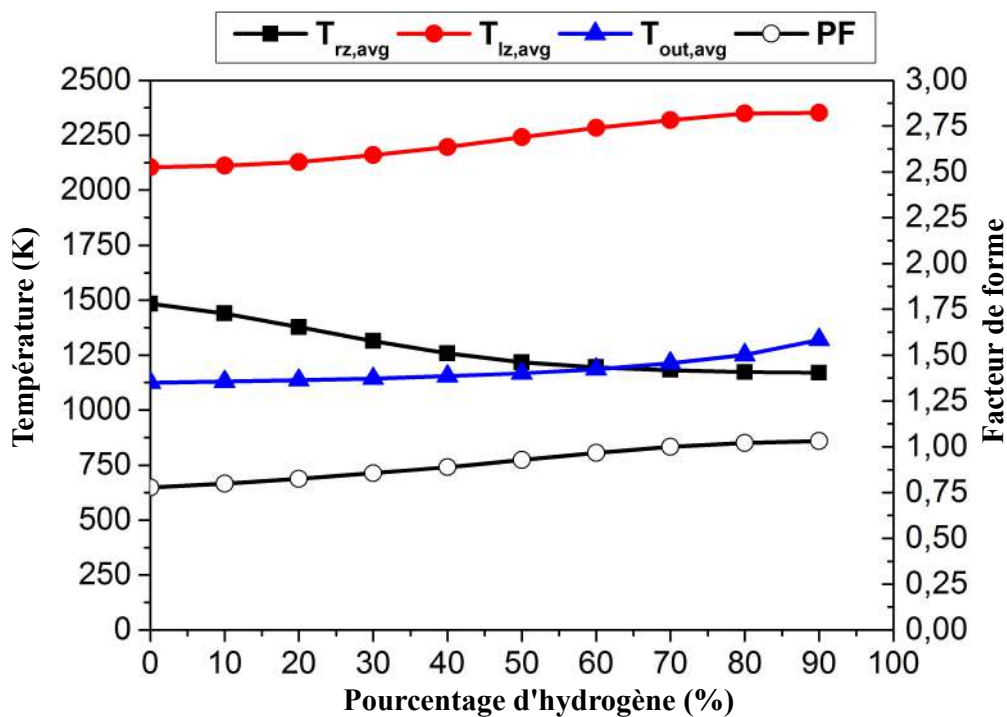


FIGURE IV.3 – Variations de la température et de facteur de forme à débit massique constant.

La température élevée à la sortie de la chambre de combustion et l'entrée de turbine, cela augmente puissance de la turbine. Par ailleurs, des températures élevées à la sortie de la chambre de combustion peuvent ne pas satisfaire la résistance thermique des aubes de la turbine.

Pour démontrer la fluctuation de la température à la sortie de la chambre de combustion, le facteur de forme ( $PF$ ) a été calculé, il est défini comme :  $PF = (T_{out,max} - T_{out,avg})/T_{out,avg}$ . A un débit de carburant fixe, avec des pourcentages d'hydrogène en augmentation, le facteur de forme augmente continuellement de 0,77 à 1,03. Les distributions de température à la sortie de la chambre de combustion pour le cas d'une substitution d'hydrogène de 0% et 40% sont illustrées à la figure IV.4. Pour le cas de

0% d'hydrogène, il montre clairement quelques points chauds près du mur à la sortie de la chambre de combustion, en raison d'un problème de refroidissement causé par la conception de la chambre de combustion de la boîte, probablement dans la zone de dilution. Dans le cas d'une substitution d'hydrogène à 40, les points chauds s'étendent jusqu'au milieu de la surface de la sortie de la chambre de combustion. Dans ce cas, une modification de conception à la zone de dilution de la chambre de combustion de la canette est nécessaire puisque la température élevée peut ne pas satisfaire la résistance thermique de la turbine.

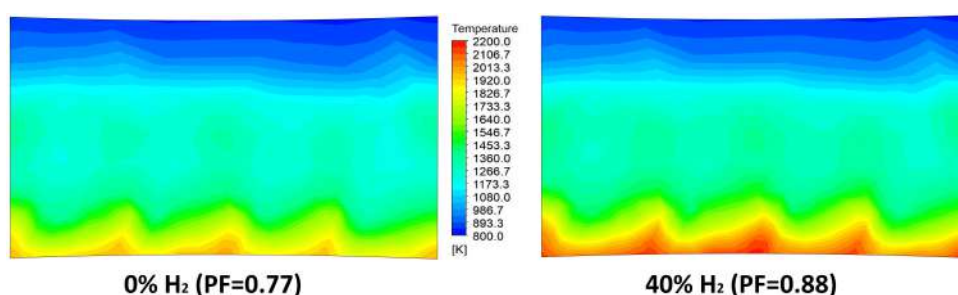


FIGURE IV.4 – Distribution de la température à la sortie de la chambre de combustion.

La figure IV.5 illustre les émissions de NO et CO corrigées à 15% O<sub>2</sub> à un débit massique de carburant constant. Les émissions de CO diminuent avec l'augmentation de la teneur en hydrogène. On s'attend à ce qu'il en soit ainsi puisque le carbone devient moins abondant lorsque le pourcentage d'hydrogène est plus élevé. Cependant, les émissions de NO (NO<sub>x</sub> thermique) augmentent avec le pourcentage d'hydrogène, probablement en raison de l'augmentation de la température causée par le dégagement de chaleur de l'hydrogène.

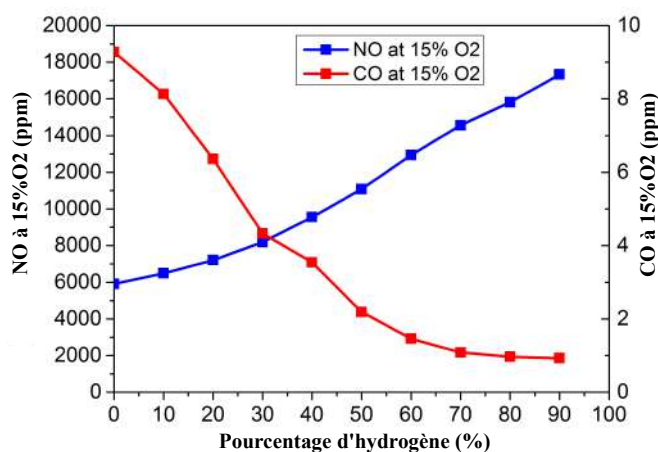


FIGURE IV.5 – Émissions de CO et NO avec GRIMECH 3.0 réduit à débit massique constant.

La figure IV.6 illustre la variation des émissions de  $\text{CO}_2$  et de  $\text{NO}_x$  avec changement de % d'ajout d'hydrogène pour une flamme de méthane entièrement pré-mélangée, à un débit fixe. Ces résultats obtenus par Hussain et al. [49]. D'un point de vue qualitatif, les mêmes variations peuvent être observées dans les deux cas.

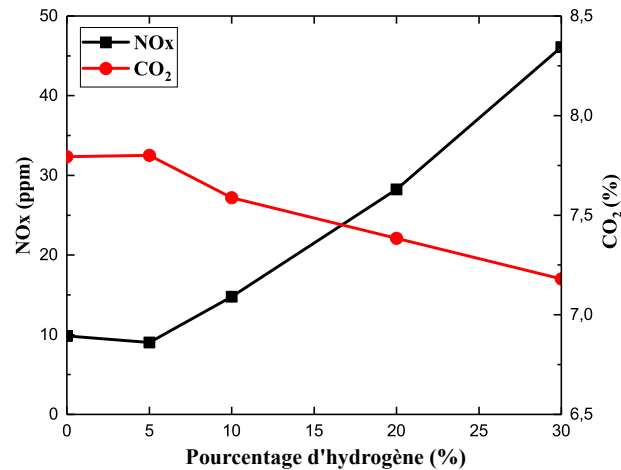


FIGURE IV.6 – Émissions de  $\text{CO}_2$  et de  $\text{NO}$  avec un débit massique d'injection constant [49].

#### IV.1.2 Injection de carburant à vitesse constante

Dans le premier cas, où l'injection de carburant se fait à un débit fixe; la vitesse, l'apport de chaleur et la température de sortie de la chambre de combustion augmentent avec l'augmentation du pourcentage d'hydrogène, améliorant les performances de la combustion en termes de puissance de sortie, avec le risque de ne pas satisfaire la résistance thermique de la turbine et les réglementations environnementales. Dans cette partie, la vitesse d'injection du carburant est maintenue constante et égale à 100  $m/s$  (correspond à un débit massique de 0,000553  $kg/s$ ). Par conséquent, l'augmentation du pourcentage d'hydrogène a fait diminuer le débit massique du carburant à mesure que la densité du carburant mélangé diminuait.

La figure IV.7 montre les distributions de température dans les plans longitudinal et perpendiculaire pour 0%, 20%, 40%, 60% et 80% en hydrogène. La température augmente graduellement en raison de l'augmentation du dégagement de chaleur du combustible mélangé.

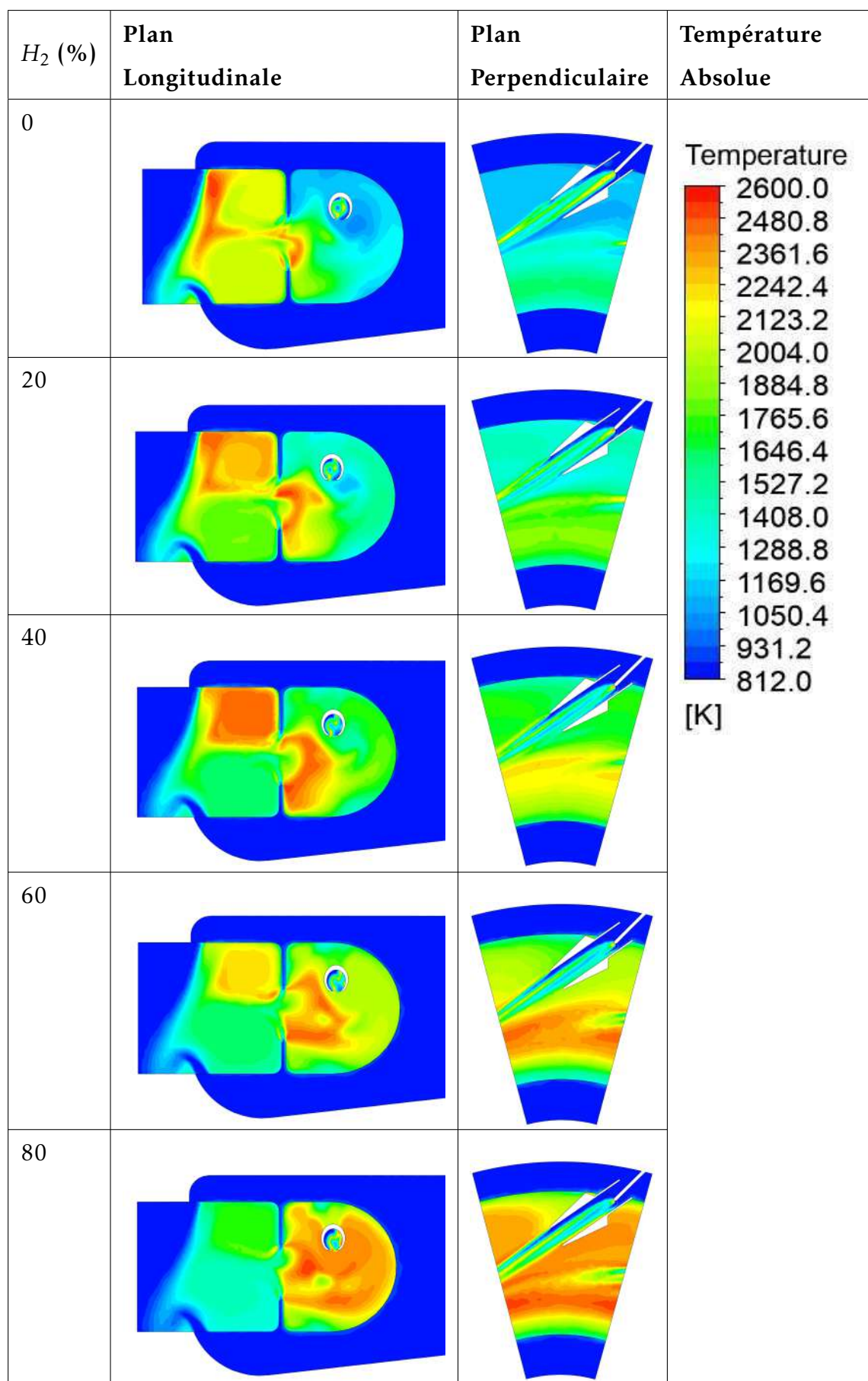


FIGURE IV.7 – Distribution de la température à vitesse constante.

La température moyenne dans la zone riche augmente continuellement, tandis qu'elle diminue dans la zone pauvre avec l'augmentation de l'hydrogène. C'est une conséquence de la forte réactivité de l'hydrogène et de la diminution du débit de carburant. Par conséquent, la majeure partie du combustible est consommée dans la zone riche avec l'air primaire provenant du tube mélangeur.

Les variations de température moyenne dans la zone riche ( $T_{rz,avg}$ ), la zone pauvre ( $T_{lz,avg}$ ), la sortie de la chambre de combustion ( $T_{out,avg}$ ) et le facteur de forme ( $PF$ ) en pourcentage d'hydrogène sont représentées sur la figure IV.8. La température moyenne dans la zone riche augmente continuellement pour atteindre 2265 K à 90 % d'hydrogène. En outre, la température moyenne de la zone pauvre diminue continuellement jusqu'à une valeur de 1484 K à 90 % d'hydrogène. C'est une conséquence de la réactivité élevée du combustible mélangé, lorsque la quantité d'hydrogène augmente, elle cause la diminution de débit massique du combustible en même temps.

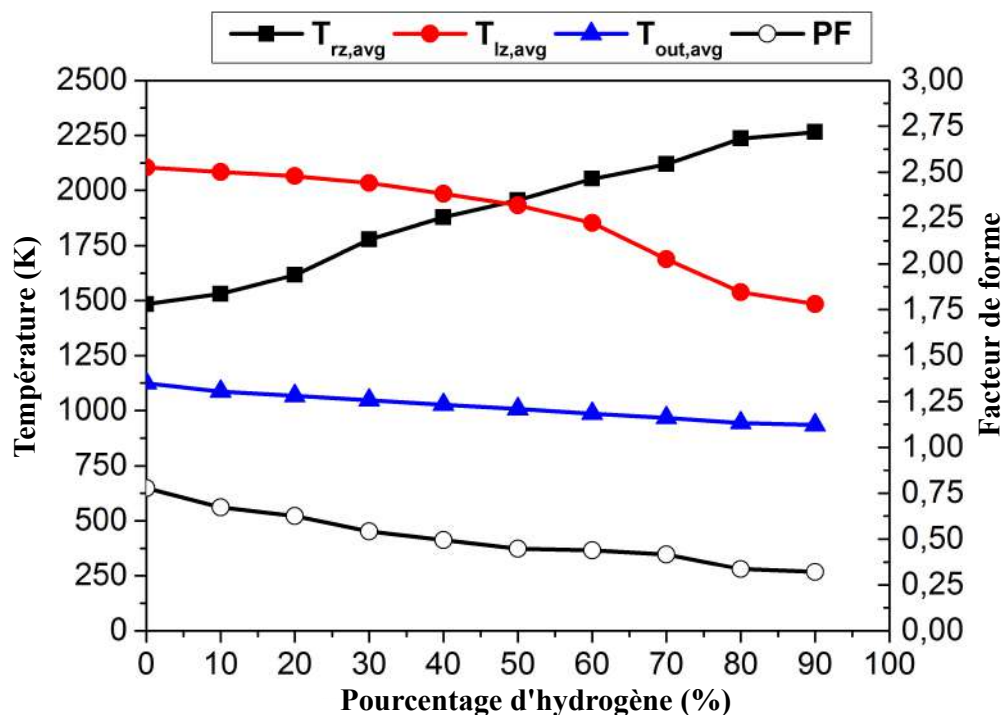


FIGURE IV.8 – Variations de la température et de facteur de forme à vitesse constante.

Lorsque le pourcentage d'hydrogène augmente dans le mélange à une vitesse fixe, la température moyenne de sortie de la chambre de combustion diminue continuellement jusqu'à 935 K. Par conséquent, le facteur de forme diminue jusqu'à 0,32 à 90 % d'hydrogène. Par conséquent, la répartition de la température à la sortie de la chambre



de combustion a amélioré l'efficacité du système de refroidissement, comme le montre la figure IV.9. Cependant, une température basse à la sortie de la chambre de combustion diminue la performance de combustion en termes de puissance de sortie, ce qui entraîne une pénurie de puissance à un pourcentage d'hydrogène plus élevé.

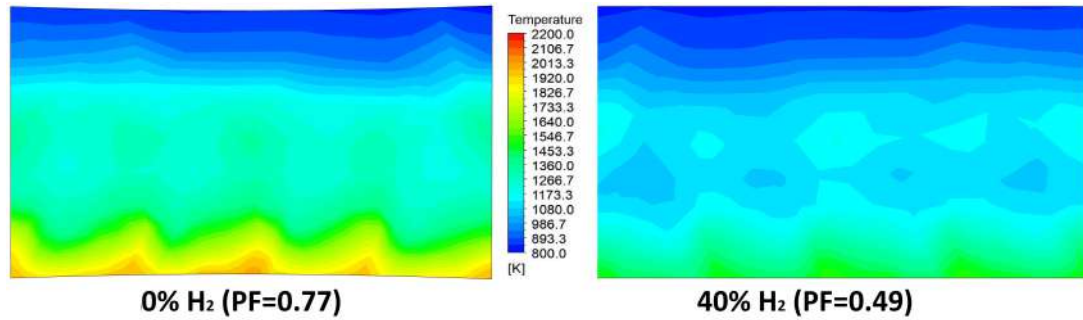


FIGURE IV.9 – Distribution de la température à la sortie de la chambre de combustion.

La figure IV.10 illustre les émissions de *NO* et *CO* corrigées à 15% *O*<sub>2</sub> avec différents pourcentages d'hydrogène à la sortie de la chambre de combustion en utilisant le schéma réduit GRIMECH 3.0. Les émissions de *CO* et de *NO* diminuent avec l'augmentation du pourcentage d'hydrogène. Le monoxyde de carbone diminue en raison de la diminution du carbone dans le carburant mélangé, le gaz naturel étant remplacé par l'hydrogène. De plus, l'oxyde nitrique diminue en raison de la baisse de la température de sortie.

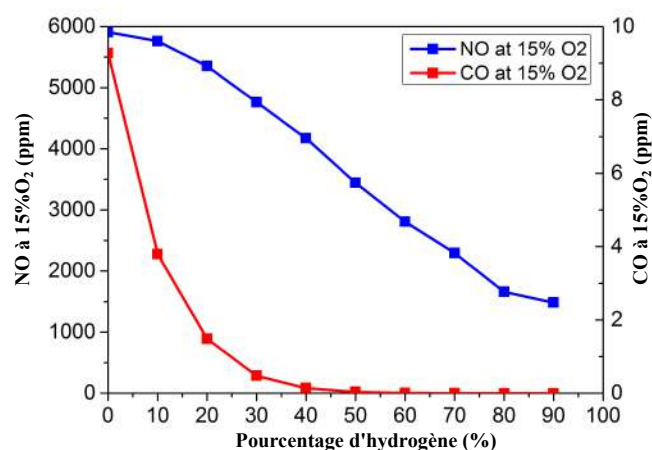


FIGURE IV.10 – Émissions de *CO* et *NO* avec GRIMECH 3.0 réduit à vitesse constante.

Comme le GRIMECH 3.0 réduit dans les simulations actuelles a été adopté, on s'attendait à un écart dans l'ampleur des émissions polluantes. Par conséquent, le mécanisme de réaction à 9 étapes est utilisé dans des simulations semblables à celles utilisées auparavant afin d'obtenir le même ordre de grandeur que les données expérimentales pour les émissions en  $NO$  et  $CO$ . Les émissions de  $NO$  et de  $CO$  sont illustrées à la Fig. IV.11. Avec seulement 10 % d'hydrogène dans le carburant mélangé, les émissions de  $CO$  passent de 92 à 37 ppm à 15%  $O_2$ , les émissions de  $NO$  passent de 59 à 51 ppm à 15%  $O_2$ . Il en va de même pour le facteur de tendance, qui passe de 0,77 à 0,67. Suite à ces résultats, l'ajout d'hydrogène au gaz naturel réduit les émissions de  $NO$  et de  $CO$ , et une meilleure distribution de la température à la sortie. Cependant, la température moyenne de sortie passe de 1124 K à 1086 K, ce qui indique une diminution de la production de chaleur. Par conséquent, la turbine peut subir une perte de puissance, avec l'augmentation d'hydrogène dans le carburant mélangé.

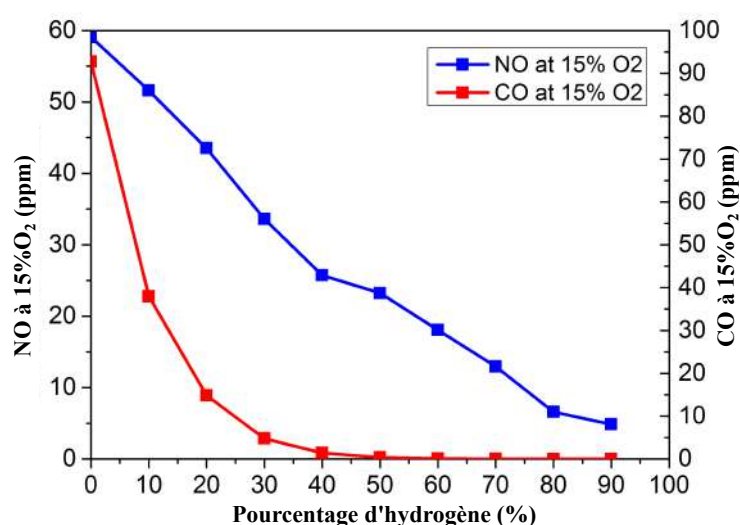


FIGURE IV.11 – Émissions de  $CO$  et  $NO$  avec 9-steps.

La figure IV.12 illustre l'effet du pourcentage de substitution de l'hydrogène sur les émissions de  $NO_x$ . Le carburant mélangé  $CH_4/H_2$  est injecté à une vitesse d'entrée de carburant fixe (80 m/s). Ces résultats ont été réalisés par Shih et al. [50]. D'un point de vue qualitatif, les mêmes variations peuvent être observées dans les deux cas.



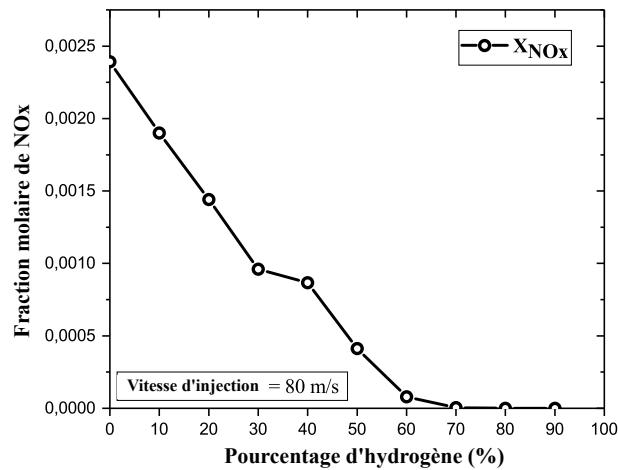


FIGURE IV.12 – Émissions de  $NOx$  en fonction du pourcentage d'hydrogène [50]

## IV.2 Comparaison sur les effets d'addition d'hydrogène

Dans ce travail, une simulation numérique (CFD) tridimensionnel de la combustion de mélange carburant gaz naturel-hydrogène a été comparée avec la combustion de gaz de synthèse-hydrogène, cette dernière a été résolue en utilisant Star CCM+. Les équations ont été résolues en régime permanent.

le pourcentage d'hydrogène est utilisé comme paramètre. Plusieurs simulations ont été effectuées pour diverses valeurs de la fraction molaire de l'hydrogène, en commençant par 0% jusqu'à 90% avec un pas de 10%. Les résultats calculés dans les deux cas présentent l'effet de la variation de l'hydrogène sur les phénomènes de combustion à un débit massique de carburant fixe.

### IV.2.1 La combustion de gaz naturel-Hydrogène (STAR CCM+)

Les profils de température sont présentés dans le plan longitudinal 2D de l'axe central et dans la section perpendiculaire qui traverse l'injecteur de combustible de la chambre de combustion. La figure IV.13 montre les distributions de température dans les deux plans pour les quantités de 0%, 40%, 60% et 80% d'hydrogène.

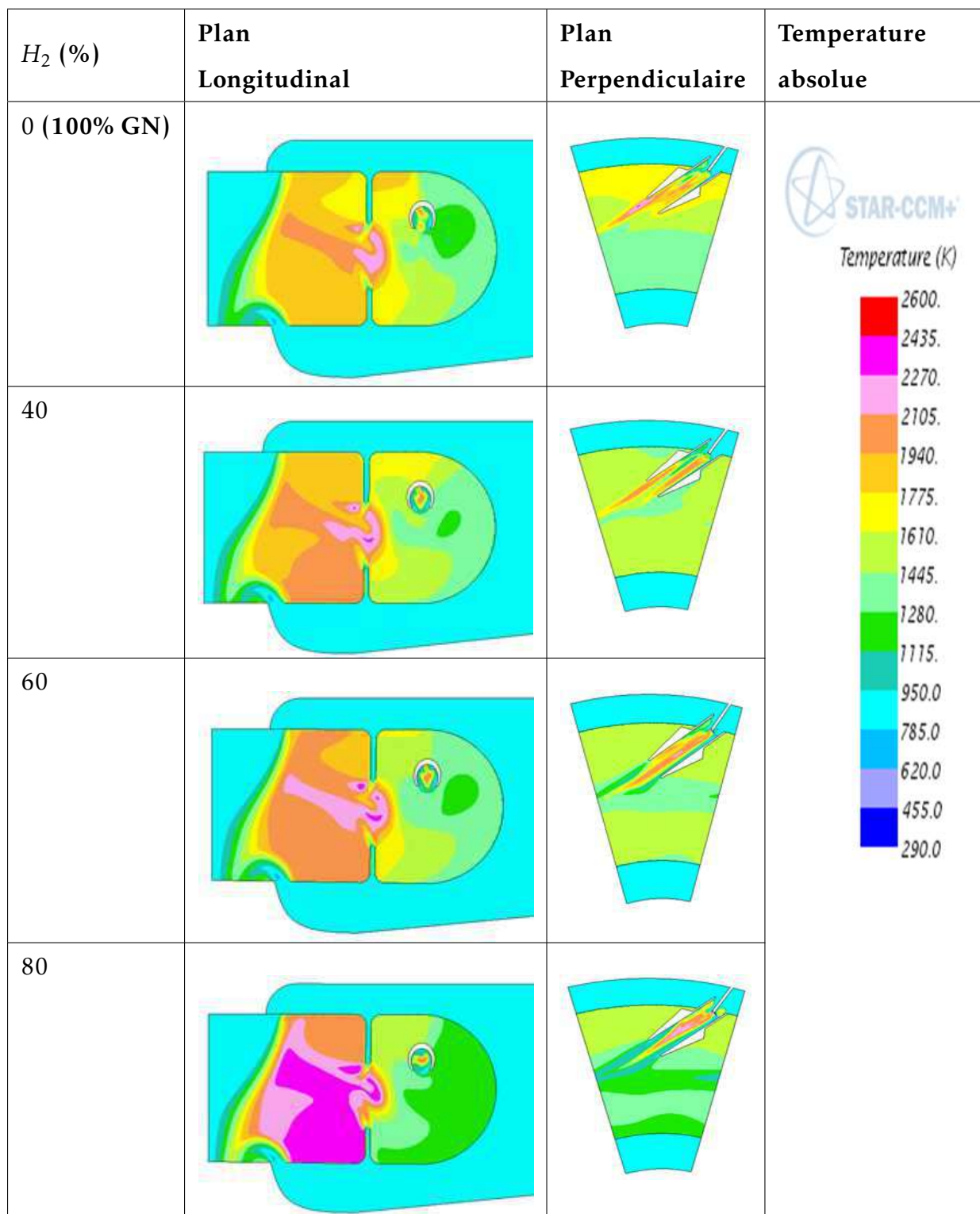


FIGURE IV.13 – Distribution de la température à débit massique constant (STAR CCM+).

Les mêmes fluctuations sur la distribution de la température en fonction de pourcentage d'hydrogène que celles obtenues auparavant lorsque Ansys Fluent a été utilisé.

Les variations de température moyenne dans la zone riche ( $T_{rz,avg}$ ), la zone pauvre ( $T_{lz,avg}$ ), la sortie de la chambre de combustion ( $T_{out,avg}$ ) et le facteur de forme ( $PF$ ) en fonction du pourcentage d'hydrogène sont représentées sur la figure IV.14. Les mêmes résultats que ceux discutés auparavant ont été obtenus ici.

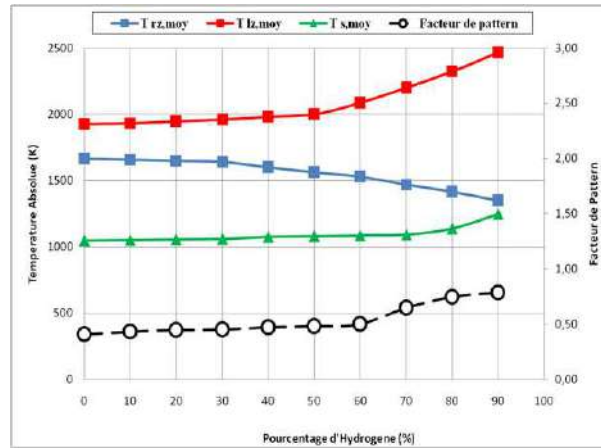


FIGURE IV.14 – Variations de la température et de facteur de forme à débit massique constant (STAR CCM+).

Pour démontrer la fluctuation de la température à la sortie de la chambre de combustion, le facteur de forme ( $PF$ ) a été calculé est présenté sur la figure IV.15.

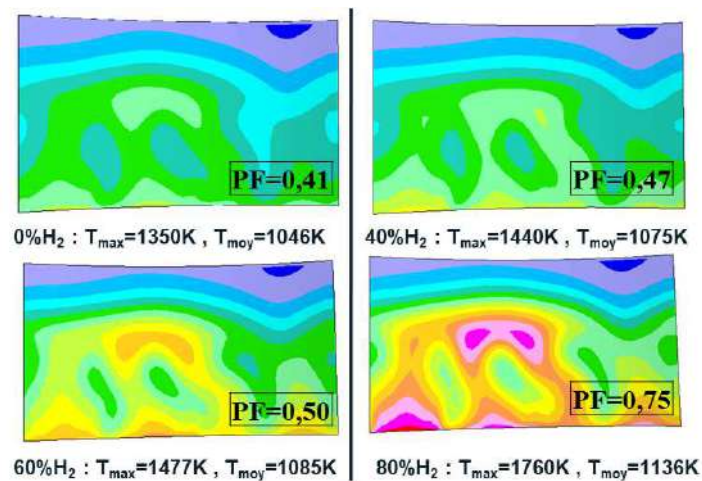


FIGURE IV.15 – Distribution de la température à la sortie de la chambre de combustion (STAR CCM+).

La figure IV.16 illustre les émissions de  $NO$  et  $CO$  à un débit massique de carburant constant. Les émissions de  $CO$  diminuent avec l'augmentation de la teneur en hydrogène. On s'attend à ce qu'il en soit ainsi puisque le carbone devient moins abondant lorsque le pourcentage d'hydrogène est plus élevé. Cependant, les émissions de  $NO_x$

augmentent avec le pourcentage d'hydrogène, probablement en raison de l'augmentation de la température causée par le dégagement de chaleur de l'hydrogène.

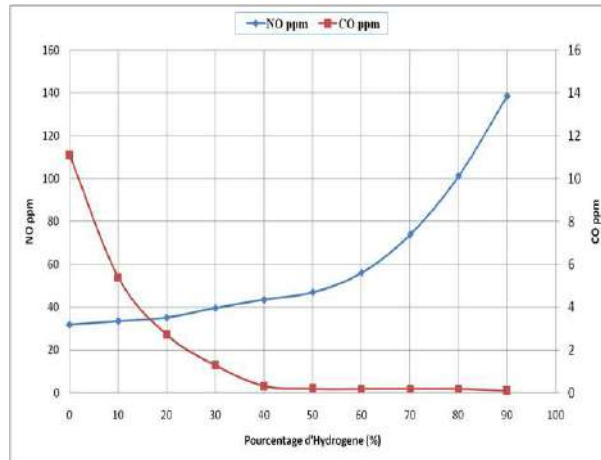


FIGURE IV.16 – Émissions de CO et NO (STAR CCM+).

## IV.2.2 La combustion de gaz de synthèse-Hydrogène (STAR CCM+)

Les profils de température sont présentés dans le plan longitudinal 2D de l'axe central et dans la section perpendiculaire qui traverse l'injecteur de combustible de la chambre de combustion. La figure IV.17 montre les distributions de température dans les deux plans pour les quantités de 0%, 40%, 60% et 80% d'hydrogène. Les résultats montrent qu'avec l'augmentation de pourcentage d'hydrogène la température dans la zone riche augmente grâce à l'apport de chaleur de mélange gazeux jusqu'à 60%  $H_2$  ou il atteint son maximum. Après 60%  $H_2$  la température dans la zone riche diminue, car le mélange gazeux devient beaucoup plus léger, donc il se déplace vers la zone pauvre pour être brûlé. Dans la zone pauvre, la température augmente progressivement jusqu'à 80%  $H_2$  après elle diminue rapidement. Cela est dû au mélange fuel-air qui devient pauvre donc il y aura une extinction de la flamme.

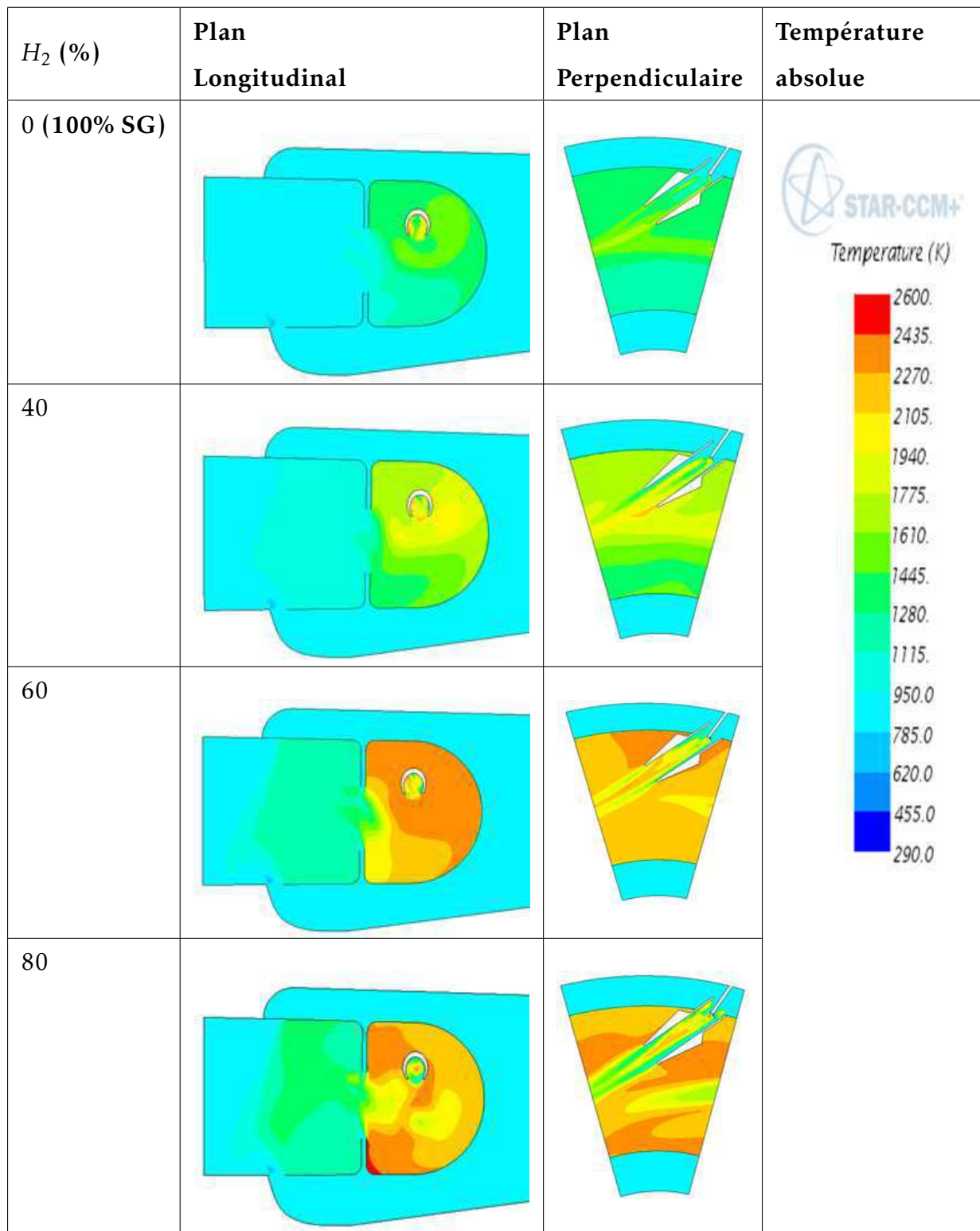


FIGURE IV.17 – Distribution de la température à débit massique constant (STAR CCM+).

Les variations de température moyenne dans la zone riche ( $T_{rz,avg}$ ), la zone pauvre ( $T_{lz,avg}$ ), la sortie de la chambre de combustion ( $T_{out,avg}$ ) et le facteur de forme ( $PF$ ) en fonction du pourcentage d'hydrogène sont représentées sur la figure IV.18.

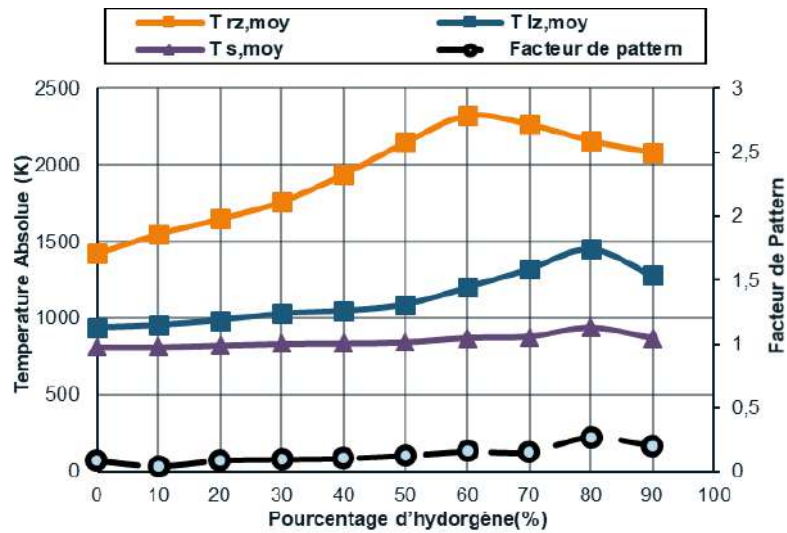


FIGURE IV.18 – Variations de la température et de facteur de forme à débit massique constant (STAR CCM+).

Pour démontrer la fluctuation de la température à la sortie de la chambre de combustion, le facteur de forme ( $PF$ ) a été calculé et est présenté sur la figure IV.19. Les images montrent bien l'augmentation faible de la température à la sortie de la chambre, on peut remarquer que le facteur de pattern est beaucoup moins variable avec la combustion de gaz de synthèse que la combustion de gaz naturel. La distribution de la température est presque uniforme avant 80%  $H_2$ , mais elle reste inférieure à la température requise pour le fonctionnement de la turbine en charge maximale

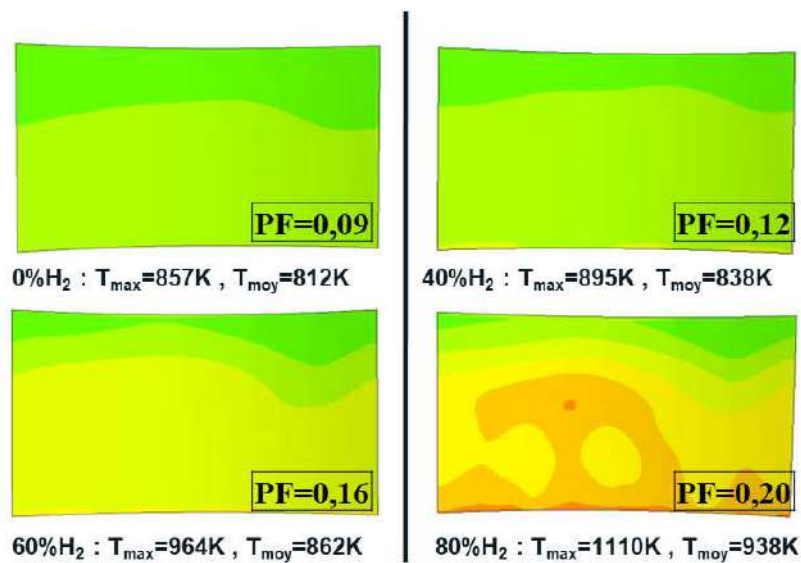


FIGURE IV.19 – Distribution de la température à la sortie de la chambre de combustion (STAR CCM+).



La figure IV.20 illustre les émissions de NO et CO à un débit massique de carburant constant. Les émissions de CO sont relativement nul cela revient à la composition de gaz de synthèse, comme il est riche en CO, ce dernier se transforme rapidement en CO<sub>2</sub> lors de combustion. Cependant, les émissions de NO<sub>x</sub> augmentent avec le pourcentage d'hydrogène, probablement en raison de l'augmentation de la température causée par le dégagement de chaleur de l'hydrogène. Toutefois, la quantité des émissions de NO sont faible par rapport à celles du gaz naturel, cela est due à la température faible à la sortie de CC.

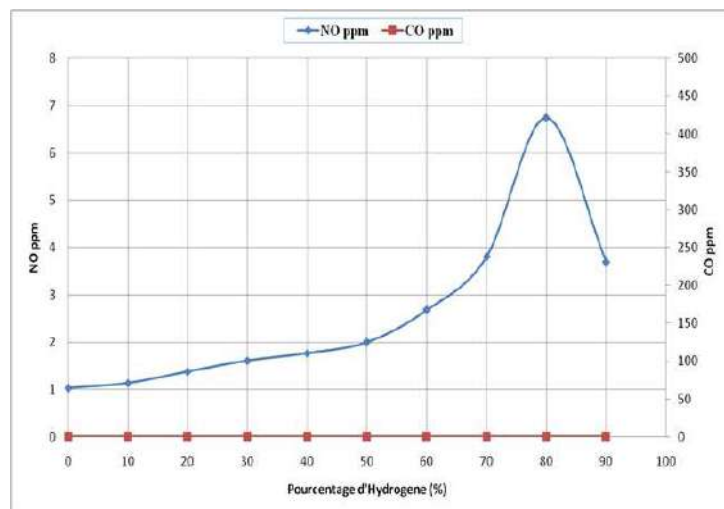


FIGURE IV.20 – Émissions de CO et de NO (STAR CCM+).

La température moyenne à l'entrée de la turbine reste inférieure à celle requise pour le fonctionnement en charge maximal ( $T_{\text{moy}} < 1124\text{K}$ ). Par conséquent, la chambre de combustion actuelle (RQL) n'est pas conçue pour la combustion de ce type de gaz de synthèse. Dans ce cas, l'injecteur radiale (IV.21a) conçu pour le gaz naturel doit être remplacé par un injecteur axial (IV.21b) afin d'augmenter le débit massique de gaz de synthèse.

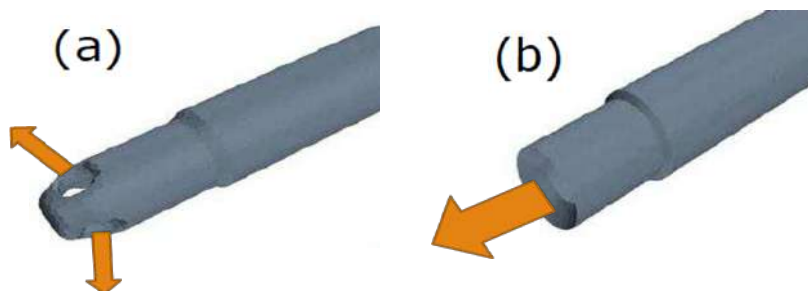


FIGURE IV.21 – L'injecteur radial (a) et L'injecteur axial (b)

## IV.3 Conclusions

La comparaison des résultats obtenus de la combustion du gaz naturel avec de l'hydrogène, par l'utilisation de l'outil d'Ansys Fluent et l'utilisation de STAR CCM+, nous a permis d'avoir des résultats relativement identiques, notamment sur les fluctuations de la température dans la chambre de combustion, ainsi que la distribution de la température dans la zone riche et la zone pauvre. Ceci montre l'efficacité des deux logiciels pour reproduire qualitativement les mêmes résultats et qui sont acceptables sur l'aspect quantitative.

La différence entre les résultats obtenus d'ANSYS Fluent et de STAR CCM, pour la température et les émissions polluantes à la sortie de la chambre de combustion revient au modèle choisi de la turbulence, au modèle choisi de la combustion, ainsi aux différents paramètres choisis pour configurer la procédure de calcul avec des deux logiciels. Il est important de préciser que le logiciel STAR CCM+ utilise par défaut une fonction polynômiale pour le calcul de la température d'ordre plus élevé que celle de la procédure de calcul d'Ansys Fluent.

Les premiers résultats montrent que l'utilisation d'un schéma détaillé pour la réaction de combustion produit des profils beaucoup plus lisses en termes de distribution de température. Cependant, le schéma de mécanisme plus complexe produit le plus d'écarts dans les résultats d'émissions de polluants : en sous-estimant la valeur  $CO$  et en surestimant la formation du  $NO$ .

Lorsque le carburant mélangé est injecté avec un débit massique constant, la température à la sortie de la chambre de combustion augmente avec l'accroissement du taux d'hydrogène. Cependant, les zones chaudes de température à la sortie de la chambre de combustion peuvent ne pas satisfaire la résistance thermique des aubes de la turbine. Pour cela, une modification de la géométrie dans la zone de dilution peut être nécessaire dans ce cas.

Lorsque le carburant mélangé est injecté avec une vitesse constante, les émissions polluantes telles que  $CO$  et  $NO$  qui dépendent directement de l'effet de la température et l'effet de dosage de l'oxydant, diminuent avec l'augmentation du pourcentage d'hy-



drogène. De plus, la répartition de la température à la sortie devient plus uniforme. Cependant, la diminution de la température moyenne à la sortie diminue la puissance de la microturbine à gaz.

Le résultat le plus intéressant est qu'avec seulement 10 % d'hydrogène ajouté au gaz naturel, les émissions de *CO* et de *NO* sont réduites d'environ 60 % et 14 % respectivement.

L'effet d'addition de l'hydrogène dans le gaz de synthèse, a donné des bons résultats en ce qui concerne l'absence des émissions toxique, et la répartition de la température à la sortie. Par ailleurs, l'apport de chaleur faible diminue la puissance produite par la turbine. L'injecteur radial peut être remplacé par un injecteur axial afin d'augmenter le débit massique d'injection de fuel.

## **Conclusion générale**

Ce travail de thèse a permis d'étudier la modélisation de la combustion dans les microturbines à gaz. La microturbine de type TA80R a été choisie pour cette étude et la chambre de combustion du type RQL a été étudiée numériquement. En effet, une investigation a été menée sur les effets de l'introduction d'hydrogène dans le carburant mélangé avec des proportions diverses sur, pour voir la répartition de la température à l'intérieur de la chambre de combustion, ainsi que la formation des émissions polluantes et la distribution de la température à l'entrée de la turbine. Cette investigation a consisté de comparer les différentes possibilités de substitution d'hydrogène dans le carburant mélangé de 10% à 90% avec un pas de 10%.

Les objectifs visés dans ce travail ont été atteints dans leurs majorités, car nous avons réalisé une investigation pour :

- Une modélisation de la combustion dans une chambre de combustion d'une microturbine à gaz, en utilisant des méthodes RANS, où deux outils de calculs ont été utilisés.
- Contrôler l'amélioration des performances de la combustion en jouant sur les mélanges carburés.
- Vérifier la validation et réaliser une étude comparative sur des résultats obtenus.

Dans les résultats primaires, une version réduite du mécanisme de réaction de GRI-MECH 3.0 a été élaborée pour décrire les différentes interactions chimiques. D'après les résultats obtenus, ce mécanisme a bien prédit la distribution de la température moyenne à l'entrée de la turbine. En outre, le mécanisme réduit a produit le plus d'écarts sur les valeurs des émissions polluantes : en sous-estimant la valeur  $CO$  et en surestimant la valeur  $NO$ . Cet écart a été justifié par le fait que ce mécanisme étant le schéma le plus détaillé, donc le taux de formation des produits de la combustion pour le processus d'auto-inflammation est très faible. Ainsi, une comparaison avec le mécanisme de réaction à 9 étapes a montré que ses valeurs numériques en termes d'émissions polluantes sont plus proches à celles de l'expérimentales.

Dans la première partie de cette étude, là où l'injection du carburant mélangé s'est faite à un débit massique constant. Lors de la substitution de l'hydrogène, la température moyenne dans la zone riche a diminué, tandis que la température moyenne dans

la zone pauvre a augmenté. Cela revient à l'apport important de chaleur de l'hydrogène substitué mais aussi à sa grande diffusivité grâce à sa faible densité. Par ailleurs, l'apparition des zones de haute température à la sortie de la chambre de combustion a montré qu'il existe un problème de refroidissement, plus précisément dans la zone de dilution et cela risque de ne pas satisfaire la résistance thermique des aubes de la turbine, donc une modification de sa conception géométrique est nécessaire dans ce cas. Par ailleurs, la diminution de la production de CO est bénéfique pour la performance de la combustion. Par contre, la production importante de NO reste un problème majeur qui risque de ne pas satisfaire les réglementations environnementales.

Dans la deuxième partie de cette étude, là où l'injection du carburant mélangé s'est faite à une vitesse constante. Avec la substitution de l'hydrogène, la température moyenne dans la zone riche a augmenté, tandis que la température moyenne dans la zone pauvre a diminué. C'est une conséquence de la forte réactivité de l'hydrogène, aussi de la diminution du débit du carburant mélangé causé par sa faible densité. Par ailleurs, la distribution relativement uniforme de la température moyenne et le facteur de forme à la sortie de la chambre de combustion a montré l'efficacité de la zone de dilution. Cependant, un pourcentage d'hydrogène élevé dans le carburant mélangé risque d'entraîner une pénurie de puissance. Le résultat le plus intéressant est lors de la combustion d'hydrogène/gaz naturel, on a obtenu : qu'avec seulement 10 % d'hydrogène ajouté au gaz naturel, les émissions de CO et de NO sont réduites d'environ 60 % et 14 % respectivement.

Dans la deuxième étude, le logiciel de simulation Star CCM+ a été utilisé par raison qu'il contient un polynôme d'ordre sept pour le calcul de la température, donc plus précis par rapport à Ansys Fluent (qui a été utilisé pour la première étude) car ce dernier contient un polynôme d'ordre cinq. La comparaison entre les résultats des deux logiciels sur la combustion du  $GN-H_2$  a montré qu'il y a une différence négligeable notamment sur la distribution de la température. Par ailleurs, la comparaison entre les valeurs des émissions polluantes a montré que la fluctuation des courbes est la même mais décalées en termes de magnitude.

L'effet d'addition de l'hydrogène dans le gaz de synthèse, là où l'injection du carburant mélangé s'est faite à une vitesse constante. La fluctuation la plus importante est après 60% d'hydrogène substitué, la température a augmenté dans la zone pauvre jusqu'à 80% avant qu'elle diminue rapidement. Cela est dû au mélange carburant-air qui devient pauvre et qui provoque par la suite une extinction de la flamme. Par conséquent, la chambre de combustion actuelle n'est pas conçue pour la combustion du gaz de synthèse. Dans ce cas, l'injecteur radial conçu pour le gaz naturel doit être remplacé par un injecteur axial afin d'augmenter le débit massique d'injection du carburant.

Sur la base de nos résultats, les perspectives de ce travail pourraient porter sur :

- Une étude d'optimisation de la conception de la chambre de combustion de type RQL pour la combustion d'un carburant mélangé moins coûteux, comme le gaz de synthèse ou le gaz de synthèse - hydrogène.

# **Annexes**

## **Annexe A**

### **Propriétés thermodynamiques**

Le tableau A.1 donne la masse molaire, l'enthalpie de formation et la chaleur spécifique à pression constante correspondant à la température 298 K pour les différentes espèces considérées dans cette étude.

TABLEAU A.1 – Propriétés thermodynamiques des espèces  $s$  [51]

Espèce $s$	$M_s \left( \frac{g}{mole} \right)$	$H_{f,298} \left( \frac{kJ}{mole} \right)$	$C_{p,298} \left( \frac{J}{K mole} \right)$
CH <sub>4</sub>	16.04246	-74.600	35.691
CO <sub>2</sub>	44.00950	-393.510	37.135
CO	28.01010	-110.535	29.141
H <sub>2</sub> O	18.01528	-241.826	33.588
H <sub>2</sub>	2.01588	235.168	29.556
H	1.00794	217.999	20.786
O	15.99940	249.175	21.912
O <sub>2</sub>	31.99880	0.000	29.378
OH	17.00734	37.278	29.886
HO <sub>2</sub>	33.00674	12.020	34.893
CH <sub>2</sub>	14.02658	390.365	35.015
CH <sub>3</sub>	15.03452	146.658	38.417
HCO	29.01804	42.398	34.591
CH <sub>2</sub> O	30.02649	-115.914	–
CH <sub>3</sub> O	31.03392	13.000	47.012
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	28.05316	52.500	42.887
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	29.06110	118.658	50.484
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	30.06904	37.039	53.78
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	43.08768	100.500	71.211
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	44.09562	-104.680	73.589
N <sub>2</sub>	28.01340	0.000	29.124
NO	30.00610	91.271	29.862
N	14.00670	472.680	20.786

Les données thermodynamiques sont stockés comme polynômes qui s'adaptent à la chaleur spécifique  $C_p/R$  (), l'enthalpie  $h/RT$ , et l'entropie  $s/R$ . Il y a sept polynômes pour chacune des deux plages de température. Ainsi, pour chaque espèce, il y a 14 coefficients en tout. Les unités sont présentées comme suite :  $T(K)$ ,  $C_p(cal/moleK)$ ,  $s(cal/moleK)$ ,  $h(Kcal/mole)$ .



$$\frac{C_p}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{h}{RT} = a_1 + \frac{a_2}{2} T + \frac{a_3}{3} T^2 + \frac{a_4}{4} T^3 + \frac{a_5}{5} T^4 + \frac{a_6}{T} \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{s}{R} = a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3}{2} T^2 + \frac{a_4}{3} T^3 + \frac{a_5}{4} T^4 + a_7 \quad (\text{A.3})$$

Les bases thermodynamiques données dans les tableaux A.3 sont présentées selon le format illustré dans le tableau A.2.

TABLEAU A.2 – Format des bases thermodynamiques [51]

Commentaires	Lignes
nom de l'espèce, code (date), formule, phase (G pour gaz), T° inférieur, T° supérieur, T° intermédiaire	1
a1,a2,a3,a4 et a5 pour la plage de la température supérieur	2
a6 et a7 pour la plage de la température supérieur, a1,a2 et a3 pour la plage de la température inférieur	3
a4,a5,a6 et a7 pour la plage de la température inférieur	4

TABLEAU A.3 – Base thermodynamique de NASA Glenn [51]

O L 1/90O 1 G 200.000 3500.000 1000.000	1
2.56942078E+00-8.59741137E-05 4.19484589E-08-1.00177799E-11 1.22833691E-15	2
2.92175791E+04 4.78433864E+00 3.16826710E+00-3.27931884E-03 6.64306396E-06	3
-6.12806624E-09 2.11265971E-12 2.91222592E+04 2.05193346E+00	4
O2 TPIS89O 2 G 200.000 3500.000 1000.000	1
3.28253784E+00 1.48308754E-03-7.57966669E-07 2.09470555E-10-2.16717794E-14	2
-1.08845772E+03 5.45323129E+00 3.78245636E+00-2.99673416E-03 9.84730201E-06	3
-9.68129509E-09 3.24372837E-12-1.06394356E+03 3.65767573E+00	4
H L 7/88H 1 G 200.000 3500.000 1000.000	1
2.50000001E+00-2.30842973E-11 1.61561948E-14-4.73515235E-18 4.98197357E-22	2
2.54736599E+04-4.46682914E-01 2.50000000E+00 7.05332819E-13-1.99591964E-15	3
2.30081632E-18-9.27732332E-22 2.54736599E+04-4.46682853E-01	4
H2 TPIS78H 2 G 200.000 3500.000 1000.000	1
3.33727920E+00-4.94024731E-05 4.99456778E-07-1.79566394E-10 2.00255376E-14	2
-9.50158922E+02-3.20502331E+00 2.34433112E+00 7.98052075E-03-1.94781510E-05	3
2.01572094E-08-7.37611761E-12-9.17935173E+02 6.83010238E-01	4
OH RUS 78O 1H 1 G 200.000 3500.000 1000.000	1
3.09288767E+00 5.48429716E-04 1.26505228E-07-8.79461556E-11 1.17412376E-14	2
3.85865700E+03 4.47669610E+00 3.99201543E+00-2.40131752E-03 4.61793841E-06	3
-3.88113333E-09 1.36411470E-12 3.61508056E+03-1.03925458E-01	4
H2O L 8/89H 2O 1 G 200.000 3500.000 1000.000	1
3.03399249E+00 2.17691804E-03-1.64072518E-07-9.70419870E-11 1.68200992E-14	2
-3.00042971E+04 4.96677010E+00 4.19864056E+00-2.03643410E-03 6.52040211E-06	3
-5.48797062E-09 1.77197817E-12-3.02937267E+04-8.49032208E-01	4
HO2 L 5/89H 1O 2 G 200.000 3500.000 1000.000	1
4.01721090E+00 2.23982013E-03-6.33658150E-07 1.14246370E-10-1.07908535E-14	2
1.11856713E+02 3.78510215E+00 4.30179801E+00-4.74912051E-03 2.11582891E-05	3
-2.42763894E-08 9.29225124E-12 2.94808040E+02 3.71666245E+00	4
CO TPIS79C 1O 1 G 200.000 3500.000 1000.000	1
2.71518561E+00 2.06252743E-03-9.98825771E-07 2.30053008E-10-2.03647716E-14	2
-1.41518724E+04 7.81868772E+00 3.57953347E+00-6.10353680E-04 1.01681433E-06	3
9.07005884E-10-9.04424499E-13-1.43440860E+04 3.50840928E+00	4
CO2 L 7/88C 1O 2 G 200.000 3500.000 1000.000	1
3.85746029E+00 4.41437026E-03-2.21481404E-06 5.23490188E-10-4.72084164E-14	2
-4.87591660E+04 2.27163806E+00 2.35677352E+00 8.98459677E-03-7.12356269E-06	3
2.45919022E-09-1.43699548E-13-4.83719697E+04 9.90105222E+00	4

HCO L12/89H 1C 1O 1 G 200.000 3500.000 1000.000	1
2.77217438E+00 4.95695526E-03-2.48445613E-06 5.89161778E-10-5.33508711E-14	2
4.01191815E+03 9.79834492E+00 4.22118584E+00-3.24392532E-03 1.37799446E-05	3
-1.33144093E-08 4.33768865E-12 3.83956496E+03 3.39437243E+00	4
CH2 L S/93C 1H 2 G 200.000 3500.000 1000.000	1
2.87410113E+00 3.65639292E-03-1.40894597E-06 2.60179549E-10-1.87727567E-14	2
4.62636040E+04 6.17119324E+00 3.76267867E+00 9.68872143E-04 2.79489841E-06	3
-3.85091153E-09 1.68741719E-12 4.60040401E+04 1.56253185E+00	4
CH2O L 8/88H 2C 1O 1 G 200.000 3500.000 1000.000	1
1.76069008E+00 9.20000082E-03-4.42258813E-06 1.00641212E-09-8.83855640E-14	2
-1.39958323E+04 1.36563230E+01 4.79372315E+00-9.90833369E-03 3.73220008E-05	3
-3.79285261E-08 1.31772652E-11-1.43089567E+04 6.02812900E-01	4
CH3 L11/89C 1H 3 G 200.000 3500.000 1000.000	1
2.28571772E+00 7.23990037E-03-2.98714348E-06 5.95684644E-10-4.67154394E-14	2
1.67755843E+04 8.48007179E+00 3.67359040E+00 2.01095175E-03 5.73021856E-06	3
-6.87117425E-09 2.54385734E-12 1.64449988E+04 1.60456433E+00	4
CH3O 121686C 1H 3O 1 G 300.00 3000.00 1000.000	1
0.03770799E+02 0.07871497E-01-0.02656384E-04 0.03944431E-08-0.02112616E-12	2
0.12783252E+03 0.02929575E+02 0.02106204E+02 0.07216595E-01 0.05338472E-04	3
-0.07377636E-07 0.02075610E-10 0.09786011E+04 0.13152177E+02	4
CH4 L 8/88C 1H 4 G 200.000 3500.000 1000.000	1
7.48514950E-02 1.33909467E-02-5.73285809E-06 1.22292535E-09-1.01815230E-13	2
-9.46834459E+03 1.84373180E+01 5.14987613E+00-1.36709788E-02 4.91800599E-05	3
-4.84743026E-08 1.66693956E-11-1.02466476E+04-4.64130376E+00	4
C2H4 L 1/91C 2H 4 G 200.000 3500.000 1000.000	1
2.03611116E+00 1.46454151E-02-6.71077915E-06 1.47222923E-09-1.25706061E-13	2
4.93988614E+03 1.03053693E+01 3.95920148E+00-7.57052247E-03 5.70990292E-05	3
-6.91588753E-08 2.69884373E-11 5.08977593E+03 4.09733096E+00	4
C2H5 L12/92C 2H 5 G 200.000 3500.000 1000.000	1
1.95465642E+00 1.73972722E-02-7.98206668E-06 1.75217689E-09-1.49641576E-13	2
1.28575200E+04 1.34624343E+01 4.30646568E+00-4.18658892E-03 4.97142807E-05	3
-5.99126606E-08 2.30509004E-11 1.28416265E+04 4.70720924E+00	4
C2H6 L 8/88C 2H 6 G 200.000 3500.000 1000.000	1
1.07188150E+00 2.16852677E-02-1.00256067E-05 2.21412001E-09-1.90002890E-13	2
-1.14263932E+04 1.51156107E+01 4.29142492E+00-5.50154270E-03 5.99438288E-05	3
-7.08466285E-08 2.68685771E-11-1.15222055E+04 2.66682316E+00	4

N L 6/88N 1 G 200.000 6000.000 1000.000	1
0.24159429E+01 0.17489065E-03-0.11902369E-06 0.30226245E-10-0.20360982E-14	2
0.56133773E+05 0.46496096E+01 0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00	3
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.56104637E+05 0.41939087E+01	4
NO RUS 78N 1O 1 G 200.000 6000.000 1000.000	1
0.32606056E+01 0.11911043E-02-0.42917048E-06 0.69457669E-10-0.40336099E-14	2
0.99209746E+04 0.63693027E+01 0.42184763E+01-0.46389760E-02 0.11041022E-04	3
-0.93361354E-08 0.28035770E-11 0.98446230E+04 0.22808464E+01	4
N2 121286N 2 G 300.000 5000.000 1000.000	1
0.02926640E+02 0.14879768E-02-0.05684760E-05 0.10097038E-09-0.06753351E-13	2
-0.09227977E+04 0.05980528E+02 0.03298677E+02 0.14082404E-02-0.03963222E-04	3
0.05641515E-07-0.02444854E-10-0.10208999E+04 0.03950372E+02	4
C3H8 L 4/85C 3H 8 G 300.000 5000.000 1000.000	1
0.75341368E+01 0.18872239E-01-0.62718491E-05 0.91475649E-09-0.47838069E-13	2
-0.16467516E+05-0.17892349E+02 0.93355381E+00 0.26424579E-01 0.61059727E-05	3
-0.21977499E-07 0.95149253E-11-0.13958520E+05 0.19201691E+02	4
C3H7 L 9/84C 3H 7 G 300.000 5000.000 1000.000	1
0.77026987E+01 0.16044203E-01-0.52833220E-05 0.76298590E-09-0.39392284E-13	2
0.82984336E+04-0.15480180E+02 0.10515518E+01 0.25991980E-01 0.23800540E-05	3
-0.19609569E-07 0.93732470E-11 0.10631863E+05 0.21122559E+02	4

## **Annexe B**

### **Mécanismes réactionnels**

TABLEAU B.1 – Le mécanisme de 9 étapes avec 11 espèces et 9 réactions.

$r$	Réaction	$k_{f,r}$ (directe)		
		$A$	$\beta$	$T_a$
1	$\text{CH}_4 + \frac{3}{2} \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + 2 \text{H}_2\text{O}$	$5.012 \times 10^{11}$	0.000	47801
2	$\text{CO} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2$	$1.000 \times 10^{15}$	0.000	40000
3	$\text{CH}_4 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + 2 \text{H}_2$	$4.400 \times 10^{13}$	0.000	30000
4	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + 3 \text{H}_2$	$3.000 \times 10^{10}$	0.000	30000
5	$\text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$	$2.500 \times 10^{18}$	-1.000	40000
6	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}_2$	$2.750 \times 10^{11}$	0.000	20000
7	$\text{N}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{N}$	$1.470 \times 10^{13}$	0.300	-75286
8	$\text{N} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{NO} + \text{O}$	$6.400 \times 10^9$	1.000	-6285
9	$\text{N} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{H}$	$3.800 \times 10^{13}$	0.000	0

## **Annexe C**

### **Le mécanisme *Reduced GRIMECH 3.0***

[illegible]

Reduced version of GRI-MECH 3.0 21 species ; 86 reactions.

Meziane-LMESC Usthb August, 2018

[illegible]

## ELEMENTS

O H C N

END

## SPECIES

CH4	O2	CO2	CO	H2O
H2	H	O	OH	HO2
CH2	CH3	HCO	CH2O	CH3O
C2H4	C2H5	C2H6	C3H7	C3H8

N2

END

## REACTIONS

0+H+M<=>0H+M	5.000E+17	-1.000	0.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
0+H2<=>H+0H	5.000E+04	2.670	6290.00
0+H02<=>0H+02	2.000E+13	0.000	0.00
0+CH2<=>H+HCO	8.000E+13	0.000	0.00
0+CH3<=>H+CH20	8.430E+13	0.000	0.00
0+CH4<=>0H+CH3	1.020E+09	1.500	8600.00
CH4+1.502=>C0+2H20	5.012E+11	0.000	47801.00
CH4+0.502=>C0+2H2	4.400E+13	0.000	30000.00
CH4+H20=>C0+3H2	3.000E+10	0.000	30000.00
0+C0+M<=>C02+M	6.020E+14	0.000	3000.00
H2/2.00/ O2/6.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/3.50/ C2H6/3.00/			
0+HCO<=>0H+C0	3.000E+13	0.000	0.00
0+HCO<=>H+C02	3.000E+13	0.000	0.00
0+CH20<=>0H+HCO	3.900E+13	0.000	3540.00



$O + C_2H_4 \rightleftharpoons CH_3 + HCO$	1.920E+07	1.830	220.00
$O + C_2H_5 \rightleftharpoons CH_3 + CH_2O$	1.320E+14	0.000	0.00
$O + C_2H_6 \rightleftharpoons OH + C_2H_5$	8.980E+07	1.920	5690.00
$CO + 0.5O_2 \rightleftharpoons CO_2$	1.000E+15	0.000	40000.00
$O_2 + CH_2O \rightleftharpoons H_2O + HCO$	1.000E+14	0.000	40000.00
$H + O_2 + M \rightleftharpoons H_2O + M$	2.800E+18	-0.860	0.00
$O_2/0.00/ \quad H_2O/0.00/ \quad CO/0.75/ \quad CO_2/1.50/ \quad C_2H_6/1.50/ \quad N_2/0.00/$			
$H + 2O_2 \rightleftharpoons H_2O + O_2$	3.000E+20	-1.720	0.00
$H + O_2 + H_2O \rightleftharpoons H_2O + H_2O$	9.380E+18	-0.760	0.00
$H + O_2 + N_2 \rightleftharpoons H_2O + N_2$	3.750E+20	-1.720	0.00
$H + O_2 \rightleftharpoons O + OH$	8.300E+13	0.000	14413.00
$2H + M \rightleftharpoons H_2 + M$	1.000E+18	-1.000	0.00
$H_2/0.00/ \quad H_2O/0.00/ \quad CH_4/2.00/ \quad CO_2/0.00/ \quad C_2H_6/3.00/$			
$2H + H_2 \rightleftharpoons 2H_2$	9.000E+16	-0.600	0.00
$2H + H_2O \rightleftharpoons H_2 + H_2O$	6.000E+19	-1.250	0.00
$2H + CO_2 \rightleftharpoons H_2 + CO_2$	5.500E+20	-2.000	0.00
$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$	2.200E+22	-2.000	0.00
$H_2/0.73/ \quad H_2O/3.65/ \quad CH_4/2.00/ \quad C_2H_6/3.00/$			
$H + H_2O_2 \rightleftharpoons O_2 + H_2$	2.800E+13	0.000	1068.00
$H + H_2O_2 \rightleftharpoons 2OH$	1.340E+14	0.000	635.00
$H + CH_2 (+M) \rightleftharpoons CH_3 (+M)$	2.500E+16	-0.800	0.00
LOW / 3.200E+27    -3.140    1230.00/			
TROE/ 0.6800    78.00    1995.00    5590.00 /			
$H_2/2.00/ \quad H_2O/6.00/ \quad CH_4/2.00/ \quad CO/1.50/ \quad CO_2/2.00/ \quad C_2H_6/3.00/$			
$H + CH_3 (+M) \rightleftharpoons CH_4 (+M)$	1.270E+16	-0.630	383.00
LOW / 2.477E+33    -4.760    2440.00/			
TROE/ 0.7830    74.00    2941.00    6964.00 /			
$H_2/2.00/ \quad H_2O/6.00/ \quad CH_4/2.00/ \quad CO/1.50/ \quad CO_2/2.00/ \quad C_2H_6/3.00/$			
$H + CH_4 \rightleftharpoons CH_3 + H_2$	6.600E+08	1.620	10840.00
$H + HCO (+M) \rightleftharpoons CH_2O (+M)$	1.090E+12	0.480	-260.00
LOW / 1.350E+24    -2.570    1425.00/			
TROE/ 0.7824    271.00    2755.00    6570.00 /			

H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
H+HCO<=>H2+CO	7.340E+13	0.000	0.00
H+CH2O(+M)<=>CH3O(+M)	5.400E+11	0.454	2600.00
LOW / 2.200E+30 -4.800 5560.00/			
TR0E/ 0.7580 94.00 1555.00 4200.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
H+CH2O<=>HCO+H2	2.300E+10	1.050	3275.00
H+CH3O<=>OH+CH3	3.200E+13	0.000	0.00
H+C2H4(+M)<=>C2H5(+M)	1.080E+12	0.454	1820.00
LOW / 1.200E+42 -7.620 6970.00/			
TR0E/ 0.9753 210.00 984.00 4374.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
H+C2H5(+M)<=>C2H6(+M)	5.210E+17	-0.990	1580.00
LOW / 1.990E+41 -7.080 6685.00/			
TR0E/ 0.8422 125.00 2219.00 6882.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
H+C2H6<=>C2H5+H2	1.150E+08	1.900	7530.00
H2+CO(+M)<=>CH2O(+M)	4.300E+07	1.500	79600.00
LOW / 5.070E+27 -3.420 84350.00/			
TR0E/ 0.9320 197.00 1540.00 10300.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
OH+H2<=>H+H2O	2.160E+08	1.510	3430.00
H2+0.502<=>H2O	2.500E+18	-1.000	40000.00
2OH<=>O+H2O	3.570E+04	2.400	-2110.00
OH+H2O<=>O2+H2O	2.900E+13	0.000	-500.00
OH+CH2<=>H+CH2O	2.000E+13	0.000	0.00
OH+CH3<=>CH2+H2O	5.600E+07	1.600	5420.00
OH+CH4<=>CH3+H2O	1.000E+08	1.600	3120.00
OH+CO<=>H+CO2	4.760E+07	1.228	70.00
OH+HCO<=>H2O+CO	5.000E+13	0.000	0.00
CO+H2O<=>CO2+H2	2.750E+11	0.000	20000.00
OH+CH2O<=>HCO+H2O	3.430E+09	1.180	-447.00

OH+C2H6<=>C2H5+H2O	3.540E+06	2.120	870.00
H02+CH2<=>OH+CH2O	2.000E+13	0.000	0.00
H02+CH3<=>O2+CH4	1.000E+12	0.000	0.00
H02+CH3<=>OH+CH3O	2.000E+13	0.000	0.00
H02+CO<=>OH+CO2	1.500E+14	0.000	23600.00
CH2+O2<=>OH+HCO	1.320E+13	0.000	1500.00
CH2+H2<=>H+CH3	5.000E+05	2.000	7230.00
CH2+CH3<=>H+C2H4	4.000E+13	0.000	0.00
CH2+CH4<=>2CH3	2.460E+06	2.000	8270.00
CH3+O2<=>O+CH3O	2.675E+13	0.000	28800.00
CH3+O2<=>OH+CH2O	3.600E+10	0.000	8940.00
2CH3(+M)<=>C2H6(+M)	2.120E+16	-0.970	620.00
LOW / 1.770E+50 -9.670 6220.00/			
TROE/ 0.5325 151.00 1038.00 4970.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
2CH3<=>H+C2H5	4.990E+12	0.100	10600.00
CH3+HCO<=>CH4+CO	2.648E+13	0.000	0.00
CH3+CH2O<=>HCO+CH4	3.320E+03	2.810	5860.00
CH3+C2H6<=>C2H5+CH4	6.140E+06	1.740	10450.00
HCO+H2O<=>H+CO+H2O	2.244E+18	-1.000	17000.00
HCO+M<=>H+CO+M	1.870E+17	-1.000	17000.00
H2/2.00/ H2O/0.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
HCO+O2<=>H02+CO	7.600E+12	0.000	400.00
CH3O+O2<=>H02+CH2O	4.280E-13	7.600	-3530.00
C2H5+O2<=>H02+C2H4	8.400E+11	0.000	3875.00
CH3+C2H5(+M)<=>C3H8(+M)	.9430E+13	0.000	0.00
LOW/ 2.710E+74 -16.82 13065.0 /			
TROE/ .1527 291.0 2742.0 7748.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
O+C3H8<=>OH+C3H7	1.930E+05	2.680	3716.00
H+C3H8<=>C3H7+H2	1.320E+06	2.540	6756.00
OH+C3H8<=>C3H7+H2O	3.160E+07	1.800	934.00

CH3+C3H8<=>C3H7+CH4	0.903E+00	3.650	7154.00
CH3+C2H4(+M)<=>C3H7(+M)	2.550E+06	1.600	5700.00
LOW/ 3.00E+63 -14.6 18170./			
TROE/ .1894 277.0 8748.0 7891.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
O+C3H7<=>C2H5+CH2O	9.640E+13	0.000	0.00
H+C3H7(+M)<=>C3H8(+M)	3.613E+13	0.000	0.00
LOW/ 4.420E+61 -13.545 11357.0/			
TROE/ .315 369.0 3285.0 6667.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
H+C3H7<=>CH3+C2H5	4.060E+06	2.190	890.00
H02+C3H7<=>O2+C3H8	2.550E+10	0.255	-943.00
H02+C3H7=>OH+C2H5+CH2O	2.410E+13	0.000	0.00
CH3+C3H7<=>2C2H5	1.927E+13	-0.320	0.00
END			

## **Annexe D**

### **Logiciels utilisés**

TABLEAU D.1 – Liste des différents logiciels utilisés dans l’élaboration de cette thèse

Tâche	Logiciel	Licence
Logiciel de simulation	Ansys Fluent	Licence
	STAR CCM+	Licence
Éditeur de texte	Visual Studio Code	Open source
Graphes	Origin Pro 9	Licence
Contours et iso-surfaces	CFD Post	Licence
Rédaction de la thèse et de l’article	TeXstudio	Open source
Éditeur d’équation	MathType	Essai gratuit
Illustration des schémas	Inkscape	Open source

## **Annexe E**

### **Article**

Available online at [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)

ScienceDirect

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/he](http://www.elsevier.com/locate/he)

# Numerical study of blended fuel natural gas-hydrogen combustion in rich/quench/lean combustor of a micro gas turbine

Sidahmed Meziane\*, Abdelhalim Bentebbiche

LMESC, University of Science and Technology Houari Boumediene, BP 32 El Alia, 16111 Bab Ezzouar, Algeria

## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 24 January 2019

Received in revised form

3 April 2019

Accepted 13 April 2019

Available online 9 May 2019

### Keywords:

Combustion

Micro gas turbine

Blended fuel

CFD

## ABSTRACT

In this work, an investigation of the effect of natural gas-hydrogen blended fuel on the combustion performance of a Rich/Quench/Lean (RQL) can combustor. Actually, a CFD numerical simulations have been performed for various volumetric fractions of hydrogen addition varying from 0% to 90% with a step of 10%. Therefore, a reduced GRIMECH 3.0 mechanism was adopted as the reaction scheme of the combustion process. When the blended fuel is injected at a constant mass flow rate, the outlet temperature becomes higher. However, the distribution of outlet temperature may not satisfy the turbine blades thermal resistance. Otherwise, when the blended fuel is injected at a constant velocity, the distribution of outlet temperature becomes more uniform. Additionally, the pollutant emissions as CO and NO decrease continually. However, the decreasing in the average outlet temperature may decreases the power output of the micro gas turbine. Furthermore, modifications in the design of the can combustor are necessary, especially in the dilution zone and the fuel injector.

© 2019 Hydrogen Energy Publications LLC. Published by Elsevier Ltd. All rights reserved.

## Introduction

In the last decade, micro gas turbines providing up to 1 MW of reliable electrical power, have gained a lot of interest in the industry market. Probably due to their design technology, which includes compactness, reduced weight, and more economical installation and maintenance. Additionally, the interest of using micro gas turbines as a new source for electrical power generation has become dominant since the natural gas is the commonly used fuel, it is the primary fuel of choice for its availability, low costs and low exhaust gas emissions [1]. However, natural gas (NG) reserves are decreasing with the increase in the current fuel consumption

due to technological advancement. Consequently, the demands for alternative fuels are the main concerns in the near future. Hydrogen or blended fuels have been considered as one of the main attractive solutions for having fewer pollutant emissions with the same or better combustion performance compared to NG. On the other hand, modern pollution control technologies are still needed to satisfy the environmental regulations [2]. Different methods are being used in order to mass produce hydrogen. According to its abundance, hydrogen can be extracted from a variety of materials and compounds or be produced by utilizing a wide range of methods including some clean approaches [3]. Advancement in technology and improvement in manufacturing are going to lead to development of hydrogen fuel based transport sector

\* Corresponding author.

E-mail address: [smeziane@usthb.dz](mailto:smeziane@usthb.dz) (S. Meziane).

<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.04.128>

0360-3199/© 2019 Hydrogen Energy Publications LLC. Published by Elsevier Ltd. All rights reserved.



in Algeria [4]. Despite the positive environmental effects, hydrogen has the disadvantage of reduced power output due to low heating value on volume basis and high level of NOx emission [5].

In the last few years, several numerical and experimental studies have been proposed using hydrogen as a fuel due to its chemical characteristics, which includes high reactivity, low ignition temperature, a very short ignition time, a wide flammability limits and a high energy release. The combustion characteristics resulting from non-premixed hydrogen-air are a high temperature that exceeds the 2000 K, and a high production of NO emissions, that can be lowered by increasing the amount of air [6]. Verification and validation of the chemical kinetic models for hydrogen oxidation were carried out through investigations on the ignition delay time on pressure, temperature and equivalence ratio for hydrogen-oxygen mixtures. The developed code makes it possible to simulate combustion phenomena relevant to propulsion applications and to study its peculiarities [7]. A numerical investigation is conducted to study an  $H_2$ - $O_2$  rocket nozzle flow in chemical and vibrational nonequilibrium. The utilized 9 reactions kinetic model demonstrates a good modeling of the chemical nonequilibrium [8]. A comparative analysis of hydrogen/air combustion CFD modeling for 3D and 2D computational domain. It is established that the use of 2D approach mesh leads to a significant deviations of the obtained results from real ones and can be used only for a preliminary evaluation of the characteristics of the combustion process [9]. An investigation carried out on a lean premixed burner with a pure hydrogen supplied. The best arrangement can limit the NOx emissions to 17 ppm but with an outlet velocity about 120 m/s [10]. An approach to improve premixed hydrogen/air combustion characteristics in micro combustor with slits on both sides of the bluff body. The results show that the increase of controllable flow ratio and angle of bluff body can improve combustion efficiency and decrease velocity extinction limit [11].

Regarding the use of hydrogen-hydrocarbon as a fuel with air as the oxidizer, the combustion results in a micro gas turbine show the ability to reach a good combustion performance. The main challenges with utilizing the hydrogen/NG blends are related to the safety concerns. Finding the optimum  $H_2$ /NG ratio without any safety issues can be highly beneficial. However, there is no formula for this ratio despite many experimental and numerical simulations conducted on this topic [12]. Experimental results obtained from natural gas combustion in a low swirl burner and hot water boiler have been used as boundary condition for CFD modeling. Results show that in the case when hydrogen addition to natural gas by 25%, 50% and 75%, the NOx emission level increases by 92.81%, 219.72% and 360% [13]. The Mitsubishi Heavy Industries Ltd.(MHI) Group succeeded in a co-firing test of 30 vol%  $H_2$ . This co-firing makes it possible to reduce  $CO_2$  emissions during power generation by about 10% in comparison with natural gas thermal power generation [14]. An improvement of premixed gas turbine combustion system fuel flexibility with increased hydrogen consumption. The tests demonstrated the ability of the system to operate below 2 ppm NOx and 9 ppm CO with the addition of  $H_2$  to NG [15]. A study on the effect of hydrogen substitution indicated that the

flame temperature increases when a small amount of Methane is replaced by hydrogen, which is conducive to the efficiency of the engine [16]. An investigation showed that the hydrogen addition effect to acoustically excited ethylene and methane flames, considerably reduced heat release oscillations [17]. Rajpara et al. [18] reported that hydrogen addition to methane, increases flame temperature, decreases flame dimensions and reduces CO emissions with marginal increase in NOx emissions.

In this context, a numerical model of an RQL can combustor of a micro gas turbine ELLIOTT TA 80R was realized, which is able to produce an electrical power of 80kW. The main challenge in the design of a MGT is to create structures in the CC that allow the mixing of the gas. A well designed cavity-based trapped vortex enables a better fuel-air mixing, a better stabilized flame, lower emission and high efficient combustion to be achievable [19]. The characteristics of the RQL technique [20] have been numerically and experimentally studied in different works: a CFD simulation to compare natural gas vs. syngas (SG) combustion on the performance of RQL can combustor, where the authors used a 9-step chemical scheme and a  $k - \epsilon$  turbulence model. The results show a good agreement between numerical and experimental data for NG combustion. Additionally, the syngas combustion has less CO and NO pollutant emissions compared to NG. However, a modification in the fuel injector for the use of SG is needed to maintain the required CC outlet temperature [21]. A numerical analysis of the use of Vegetable Oil Tars mixture in the RQL can combustor was studied. The results of the combustion products show less CO emissions at the outlet, but high NO emissions, this due to the difficulty of the mixture evaporation, which can be avoided by increasing the fuel inlet temperature to 120C [22]. To improve the combustion process of natural gas, a new design was tested by increasing the length of the liner, adding more dilution holes and eliminating the mixing tubes of the RQL can combustor. Results show that the new design can achieve the required outlet temperature with lower CO and NO emissions [23]. In the earlier works, the numerical approach was used to improve the operational lifetime changing its design [24], then followed by the experimental data [25].

In our present study, a 3D CFD simulation adapted the same model of the can combustor, using a 30° of the volume due to the cylindrical periodicity. The used fuel is a mixture of natural gas and hydrogen. A reduced GRIMECH 3.0 mechanism was adopted for the reaction scheme of the combustion process, including 21 species with 134 reactions. The objective of our study is to examine the effect of using blended fuel (natural gas/hydrogen) on the combustion performance of the RQL can combustor. The temperature distribution and the pollutants emissions are presented and discussed.

## The micro gas turbine and the can combustor

The RQL can combustor on which this study was performed is the same as the original one used in [26]. The periodic domain is shown in Fig. 1(a). The domain is 30 annular sector of the combustor which contains one fuel injector, one mixing tube, the CC liner and the casing. The RQL zones are shown in

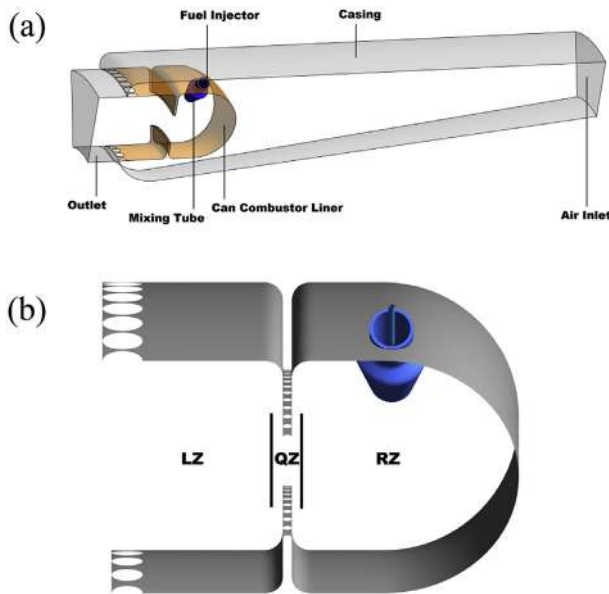


Fig. 1 – (a) The periodical domain of Can combustor of Elliot TA 80 R. (b) RQL combustor.

Fig. 1(b). The technique consists of burning the fuel far above the stoichiometric conditions in a first stage (Rich zone) in order to avoid the simultaneous occurrence of high temperature and oxygen availability, both responsible for the production of thermal NO. The CO and unburned hydrocarbons generated in the first stage will be oxidized under smoother conditions and lower temperatures in the lean zone. The transition from rich zone to lean zone is obtained through the introduction of air jets which dilute the mixture in a second stage called quench zone, where the flow is accelerated in

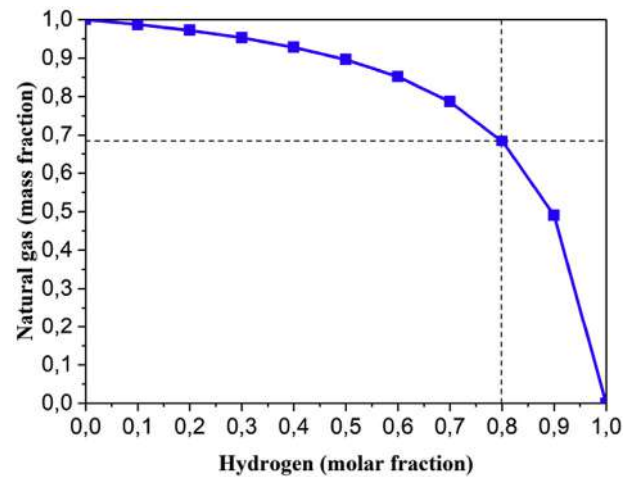


Fig. 2 – Mass fraction of NG versus Hydrogen in the blended fuel.

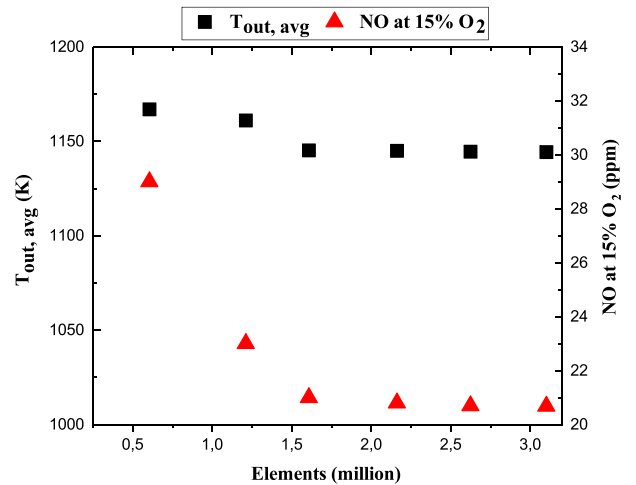


Fig. 3 – Mesh analysis.

Table 1 – Boundary conditions at full load for the periodical domain.

Parameter (Unit)	Values
$\dot{m}_f$ (kg/s)	0.000553
$\dot{m}_a$ (kg/s)	0.0665
$T_f$ (K)	290
$P_f$ (bar)	5.8
$T_a$ (K)	812
$P_a$ (bar)	3.834

Table 2 – : Comparison of fuel compositions and properties.

composition (molar fraction)	Natural gas	Hydrogen
CH <sub>4</sub>	0.92	—
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0.037	—
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0.01	—
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0.0025	—
H <sub>2</sub>	—	1
CO <sub>2</sub>	0.15	—
N <sub>2</sub>	0.029	—
Molar mass (g/mole)	17.34	2.02
LHV (kJ/kg)	47,182	120,971

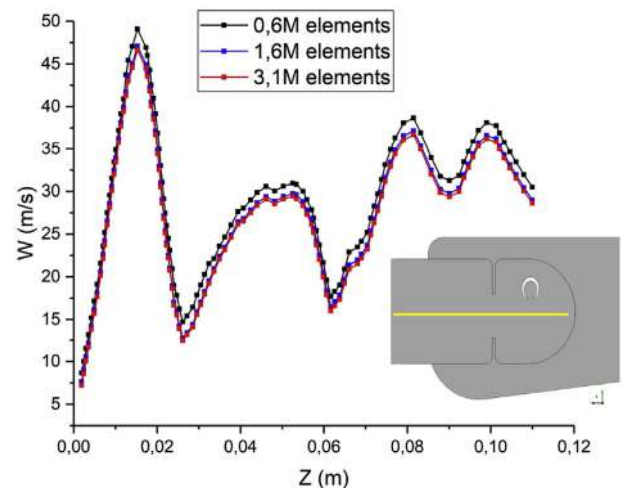


Fig. 4 – Mesh validation analysis.

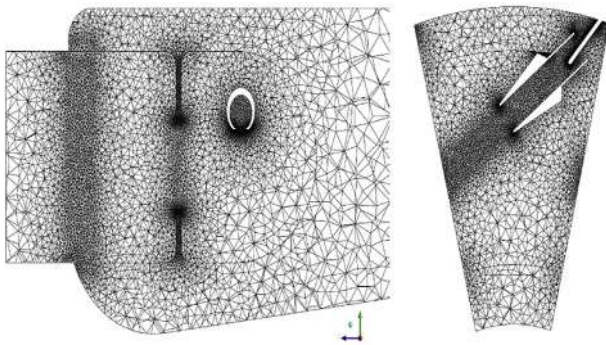
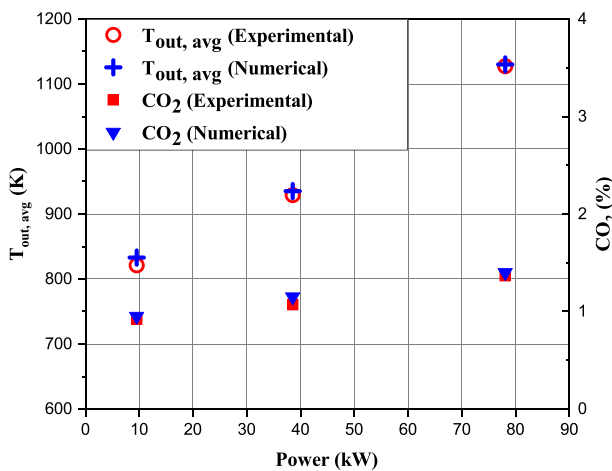


Fig. 5 – Mesh of the combustion chamber.

Fig. 6 – Comparison average outlet temperature and  $CO_2$  volumetric fraction of combustor between experimental [21] and numerical results.

order to limit the residence time in this potentially stoichiometric zone [27].

### The boundary conditions

The same boundary conditions for the can combustor at full load as in [21] are adopted in the current simulation and listed in Table 1. The composition and properties of natural gas and hydrogen [28] shown in Table 2. Even if the density of the natural gas is 8 times much greater than hydrogen, the hydrogen has an important lower heating value than NG. Fig. 2 shows the comparison between the mass fraction of NG and the molar fraction of hydrogen in the blended fuel. Natural gas density is 8 times greater than hydrogen, thus even at 80% of hydrogen volumetric fraction in the blended fuel, the NG mass fraction is still higher than 0.65.

### The modeling

A mesh analysis done by simulating six different grids ranging from 0,6 to 3,1 millions elements. Fig. 3 illustrates the average outlet temperature ( $T_{out, avg}$ ) and the NO emission corrected at 15% $O_2$  computed for each mesh. Observing the grid with 1,6 million elements,  $T_{out, avg}$  and NO become substantially independent from the mesh. Furthermore, by comparing the axial velocity profiles (yellow line) on three different grids Fig. 4. The results show that the grid with 1,6 million elements is closer to the finer grid with 3.1 million elements. Hence, This mesh (1,6 million elements) is adopted since it gives accurate predictions with a shorter computation time.

The grid structure is shown in Fig. 5. A total number of 1,607,287 tetrahedral mesh elements were used. Finer cells are located inside the mixing tube where a strong reaction is

Table 3 – Comparison between parameters at outlet of CC.

<div style="text-align: right; margin-bottom: 5px;"> </div>			
Outlet Parameters	Exp. data [21]	Current simulation with GRIMECH 3.0 reduced scheme	Current simulation with 9-steps reaction scheme
$T_{out}$ (K)	1126	1124	1129
$O_2$ (mole fraction)	0.184	0.179	0.183
$CO_2$ (mole fraction)	0.0137	0.0139	0.0144
CO ppm at 15% $O_2$	97	9	92
NO ppm at 15% $O_2$	48	5908	59

expected, as well as in the combustor liner holes where the characteristics of the flow change rapidly. The grids are much denser inside the combustor compared to those outside the combustor liner.

The combustor liner was assumed smooth, stationary, impermeable walls with a no-slip condition. A thermal conductivity equal to  $93.06 \text{ (W m}^{-1} \text{ K}^{-1}\text{)}$  was specified to the liner which was made of Alloy-X (UNS N06002), so the amount of heat transferred across the liner can be calculated. The casing

was assumed to be a smooth, impermeable, non-adiabatic and no-slip condition.

In this work, a three-dimensional CFD simulation of blended fuel natural gas-hydrogen combustion with air was performed. The steady state equations were solved using ANSYS Fluent code (version 12.0) [29], which uses a finite volume method and SIMPLE algorithm [30]. The gravitational effect was ignored. The mathematical equations are based on the conservations of mass (1), momentum (2) and additional

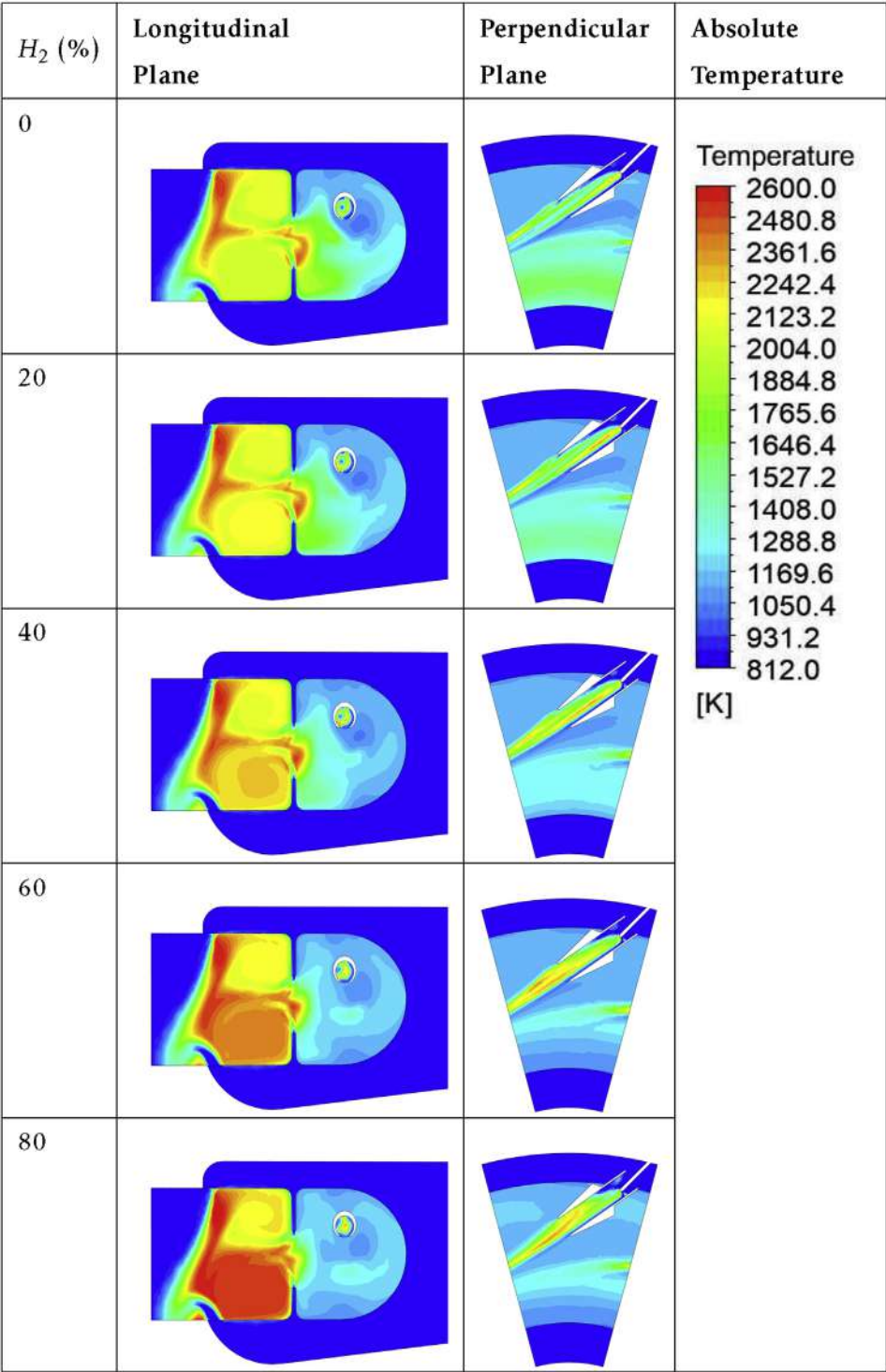


Fig. 7 – Temperature profiles at a constant fuel flow rate.



conservation equations, such as energy (3) and species concentrations (4). Those equations are written in a steady state as [16]:

$$\frac{\partial(\overline{\rho u_j})}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\overline{\rho u_j u_i})}{\partial x_j} = -\frac{\partial(\overline{p})}{\partial x_i} + \frac{\partial(\overline{t_{ij}} + \overline{\tau_{ij}})}{\partial x_j} \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\overline{\rho u_j h})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( k_f \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} - \sum_{i=1}^N h_i J_{ij} \right) + u_j \frac{\partial(\overline{p})}{\partial x_j} + S_h \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\overline{\rho u_j Y_i})}{\partial x_j} = -\frac{\partial(J_{ij})}{\partial x_j} + R_i \quad (4)$$

Where  $\rho$  is the fluid density ( $\text{kg/m}^3$ ),  $u$  is the velocity ( $\text{m/s}$ ),  $p$  is the static pressure ( $\text{Pa}$ ),  $t_{ij}$  and  $\tau_{ij}$  are respectively the viscous and Reynolds stress tensors ( $\text{Pa}$ ),  $h$ , and  $T$  are respectively the specific enthalpy ( $\text{kJ/kg}$ ), thermal conductivity ( $\text{W/mK}$ ) and temperature ( $\text{K}$ ) of the fluid mixture,  $h_i$  is the specific enthalpy of species  $i$  ( $\text{kJ/kg}$ ),  $J_{ij}$  is the diffusion flux (full multicomponent diffusion and thermal diffusion) of species  $i$  in the  $j$  direction ( $\text{kg/m}^2\text{s}$ ),  $N$  is the total number of gas species,  $S_h$  is the source of energy caused by chemical reaction ( $\text{kW/m}^3$ ),  $Y_i$  is mass fraction of species  $i$ ,  $R_i$  is the net rate of production of species  $i$  by chemical reaction ( $\text{kg/m}^3\text{s}$ ).

Most authors prefer to use  $k-\varepsilon$  model for turbulent closure, it has been validated intensively by industrial and academic applications [31]. The  $k-\varepsilon$  gives an acceptable numerical results comparing to experimental, in a very short computational time comparing to LES model [32]. In the present numerical study, the  $k-\omega$  model for turbulence was adopted for its good behaviour in the stagnation region and the region with a strong acceleration [33]. Also, the SST  $k-\omega$  model takes less computational time and less memory storage comparing to the LES model.

The reaction mechanism used for the turbulent combustion of Natural gas/Hydrogen and Air is a reduced version of GRIMECH 3.0 [34]. This reduced mechanism was obtained by eliminating all species that have a mass fraction less than 0.001. The resulting reaction mechanism includes 21 species which are:  $\text{CH}_4$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}_3$ ,  $\text{HCO}$ ,  $\text{CH}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_3\text{O}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{C}_3\text{H}_7$ ,  $\text{C}_3\text{H}_8$ , and  $\text{N}_2$ , for a total number of 134 reactions. Additionally, Thermal NO based on the Zeldovich mechanism [35] was adopted. Eddy dissipation/Finite Rate model for turbulence-chemistry interactions was assumed [36]. The Eddy Dissipation/Finite rate model has been proved to be quite reliable in case of diffusion flames.

For one simulation with 2000 iterations, it takes approximately 16,54 CPU hours on 12 processing cores. The converged solution is reached when the residuals, for continuity, is  $10^{-4}$ , for Energy is  $10^{-6}$ , for momentum is  $10^{-5}$  and for turbulence is  $10^{-5}$ .

To confirm the feasibility and accuracy of the numerical simulation, a comparison to the experimental results are carried out for the validation. Fantozzi et al. [21] studied the

combustion of natural gas/air in the same RQL can combustor, with the variation of power output from 10 kW to 80 kW. The available data for boundary conditions corresponding to 10 kW, 40 kW and 80 kW are presented in the work of Laranci et al. [37]. The average outlet temperature and the  $\text{CO}_2$  volumetric fraction of the combustor are showed in Fig. 6. The numerical results show a good agreement with experimental results, which verify the reasonableness of the presented numerical model. The comparison between the present simulation with the reduced GRIMECH 3.0 scheme, with the 9-steps scheme and the experimental data from [21] are shown in Table 3. The 9-steps scheme is based on 15 reactions, including: the two-step reaction mechanisms for  $\text{CH}_4$  and  $\text{CO}$  oxidation [38], the four-step reaction mechanisms as the oxidation of  $\text{CH}_4$ , the dissociation of  $\text{CH}_4$  in water, the  $\text{H}_2$  oxidation and the dissociation of  $\text{CO}$  in water [39]. Three reversible reactions representing the Zeldovich mechanism for the formation of  $\text{NO}$  [35] were added.

The combustion of natural gas with air in the can combustor at full load shows a good agreement between the experimental data and the current simulations, in the case of outlet temperature,  $\text{O}_2$  and  $\text{CO}_2$  mole fractions. However, the current simulation with reduced GRIMECH 3.0 scheme shows an underestimated value of carbon monoxide ( $\text{CO}$ ), and an overestimated value of nitric oxide ( $\text{NO}$ ), despite the fact that it is the most detailed scheme. The same phenomena were noticed in [40]. On the other hand, the utilized 9-steps reaction mechanism gave the nearest values of  $\text{NO}$  and  $\text{CO}$  to those

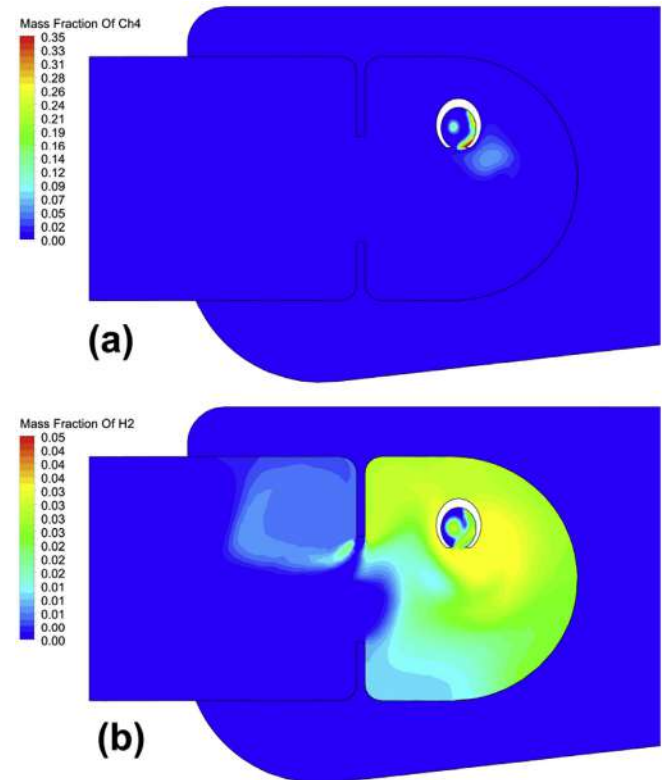


Fig. 8 – Distributions of mass fraction of (a)  $\text{CH}_4$  and (b)  $\text{H}_2$  at 40% hydrogen percentage.

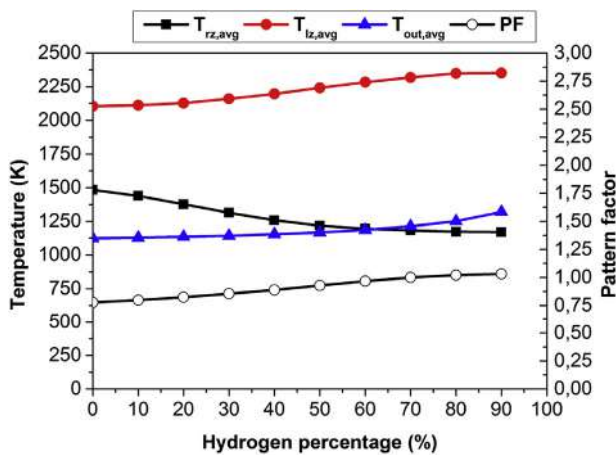


Fig. 9 – The variations of average temperatures and the pattern factor in the can combustor at a constant fuel flow rate.

from the experimental data. The temperature distributions indicate that the use of reduced GRIMECH 3.0 scheme resulted in a much smoother temperature profile than in the case of the 9-steps reaction mechanism. This can be justified by the fact that the reduced GRIMECH 3.0 scheme being the most detailed scheme results in a lower formation rate of the final combustion products for the early self-ignition process than in the case of the 9-steps reaction mechanism.

It should be reminded that the objective of the present simulation is to study the effect of hydrogen substitution in natural gas, on the combustion performance of the RQL combustor model. The reduced GRIMECH 3.0 scheme was used because of its good distributions in temperature profile, despite the deviation in CO and NO emissions magnitude. The main concern is the description of the hydrogen substitution effect on pollutants variation.

## Results and discussions

All the cases were computed with a mass flow of air equal to 0.065 kg/sat 812 K and 3.834 bar, the mass flow for natural gas is equal to 0.000553 kg/sat 290 K and 5.8 bar. The overall equivalence ratio is near to 0.135 and the total heat input is around 310 kW. To study the characteristics of the can combustor fuelled with the blended fuel (GN/H<sub>2</sub>), the

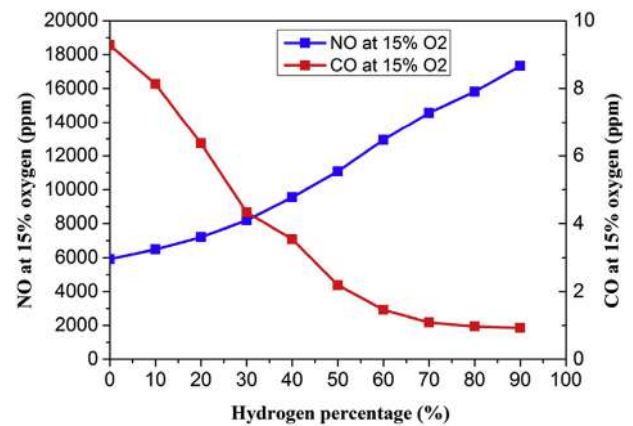


Fig. 11 – CO and NO emissions with GRIMECH 3.0 reduced scheme at constant mass flow rate.

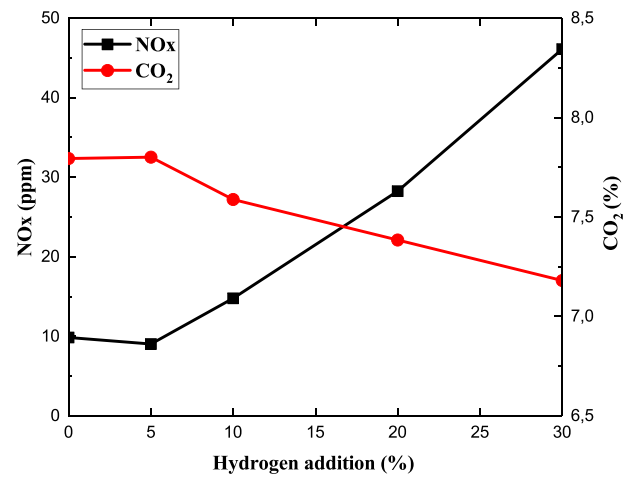


Fig. 12 – CO<sub>2</sub> and NO emissions constant mass flow rate [17].

percentage of hydrogen is used as a parameter. Several simulations were conducted for various values of hydrogen mole fraction, starting with 0% until 90% with a step of 10%. The computed results in the first case present the effect of hydrogen variation on the combustion phenomena at a fixed fuel flow rate, while in the second case present the effect of hydrogen on the combustion phenomena at a fixed fuel velocity.

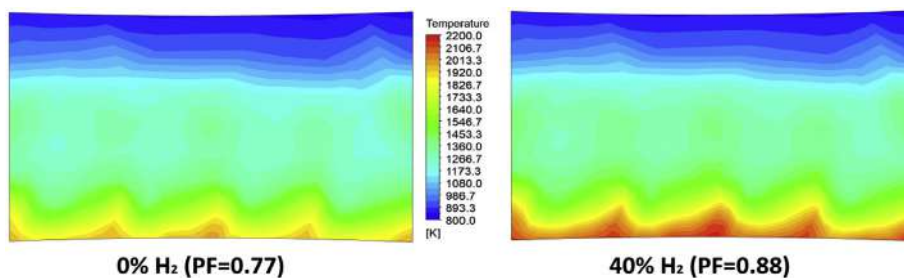


Fig. 10 – The distribution of outlet temperature of the combustor for the cases of 0% and 40% hydrogen at a constant fuel flow rate.

### Fuel injection at a constant mass flow rate

The temperature profiles are presented in the longitudinal 2D centreline plane and in the perpendicular section slicing through the combustors fuel injector. Fig. 7 shows the temperature distributions in the two planes for the amounts of 0%, 20%, 40%, 60% and 80% of hydrogen percentages. The

temperature increases gradually as the amount of hydrogen increases. Due to the increase in heat release from the blended fuel, which is a consequence of the increasing amount of hydrogen which has an important lower heating value. More precisely, the average temperature in the rich zone is continually decreasing, unlike the lean zone where it is continually increasing. This difference is caused by the low

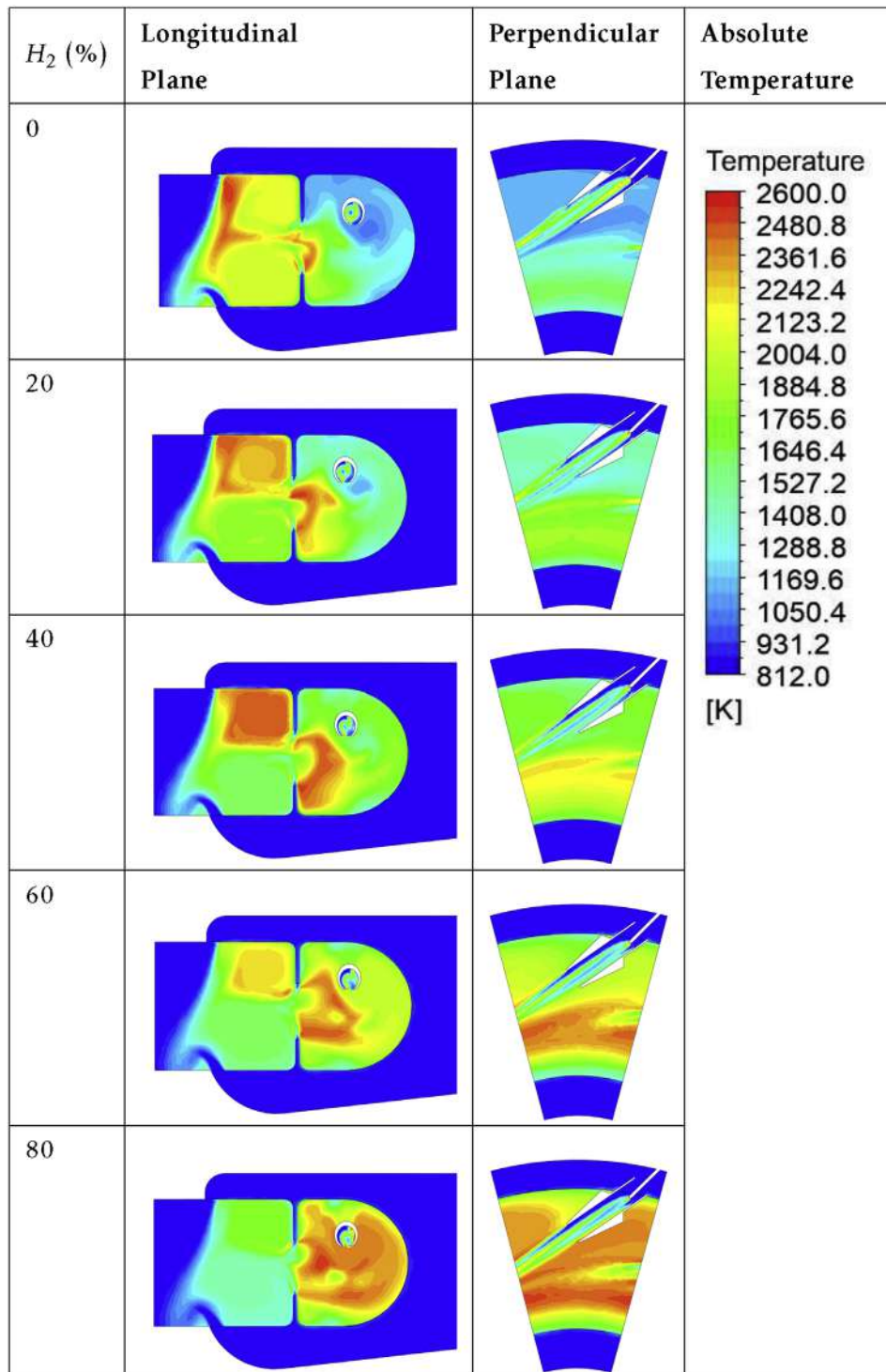


Fig. 13 – Temperature profiles at a constant fuel velocity.



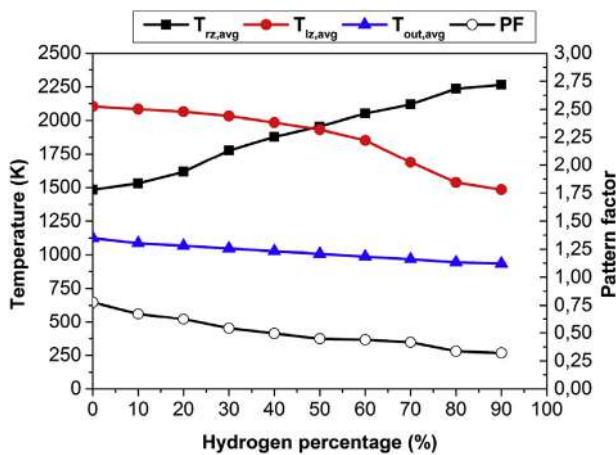


Fig. 14 – The variations of average temperatures and the pattern factor in the can combustor at a constant fuel velocity.

density and high diffusivity of hydrogen. Fig. 8 shows clearly that hydrogen can easily reach the lean zone before it gets consumed, while the methane which is the main component of natural gas, is consumed between the mixing tube and the rich zone.

The variations of average temperature in the rich zone ( $T_{rz,avg}$ ), the lean zone ( $T_{lz,avg}$ ), the outlet of the combustor ( $T_{out,avg}$ ) and the pattern factor (PF) with hydrogen percentages are represented in Fig. 9. Results show that, with the increase in hydrogen percentages, the average temperature in the rich zone decreases continually from 1483 K to 1192 K, while the average temperature in the lean zone increases from 2082 K to 2351 K. Since the density of the blended fuel decreases with hydrogen substitution, the velocity at the inlet fuel increases continually to maintain the fuel flow rate constant. Consequently, the high temperature region moves to the lean zone. Due to the high diffusivity of hydrogen, the average outlet temperature of the can combustor increases continually from 1124 K to 1320 K. The high temperature at outlet indicates a high power output from the turbine, on the other hand, high temperatures at the combustor outlet may not satisfy the thermal resistance of the turbines blades.

To demonstrate the fluctuation of the temperature at the combustor outlet, the pattern factor (PF) was calculated, it is defined as  $(T_{out,max} - T_{out,avg})/T_{out,avg}$ . At a fixed fuel flow rate, with hydrogen percentages increasing, the pattern factor increases continually from 0.77 to 1.03. The temperature distributions at

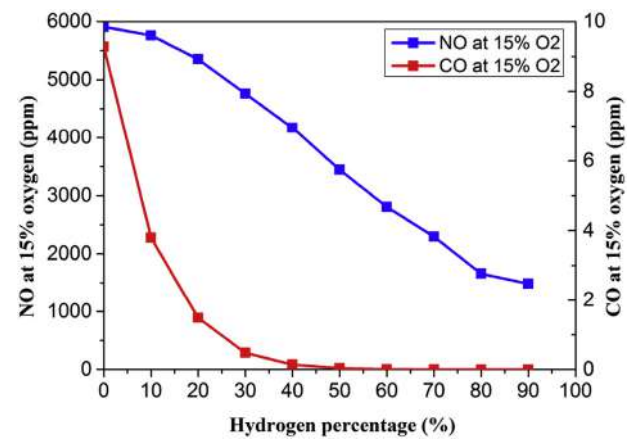


Fig. 16 – CO and NO emissions with GRIMECH 3.0 reduced scheme at constant velocity.

the combustor outlet for the case of 0% and 40% hydrogen substitution are shown in Fig. 10. For the case of 0% hydrogen, it shows clearly some hot spots near the wall at the combustor outlet, due to a cooling problem caused by the design of the can combustor, probably in the dilution zone. In the case of 40% hydrogen substitution, the hot spots extend to the mid-surface of the combustor outlet. In this case, a design modification at the dilution zone of the can combustor is necessary since the high temperature may not satisfy the thermal resistance of the turbine.

Fig. 11 illustrates the emissions of NO and CO corrected at 15% O<sub>2</sub> at a constant fuel mass flow rate. CO emission decreases with increasing hydrogen content. It is expected since carbon becomes less at higher hydrogen percentage. However, NO emission (thermal NO<sub>x</sub>) rises with hydrogen percentage, probably due to the increasing in temperature caused by the larger heat release of hydrogen. Fig. 12 depicts the variation of CO<sub>2</sub> and NO<sub>x</sub> emissions with change in % hydrogen addition for fully premixed methane flame, at a fixed flow rate. These results are taken from [17]. From a qualitative point of view, the same variations can be observed in both cases.

#### Fuel injection at a constant velocity

In case 1, where the fuel injection is at a fixed flow rate, the velocity, the heat input and the outlet temperature at the combustor increase with the increase in hydrogen percentage, improving the combustion performance in term of power

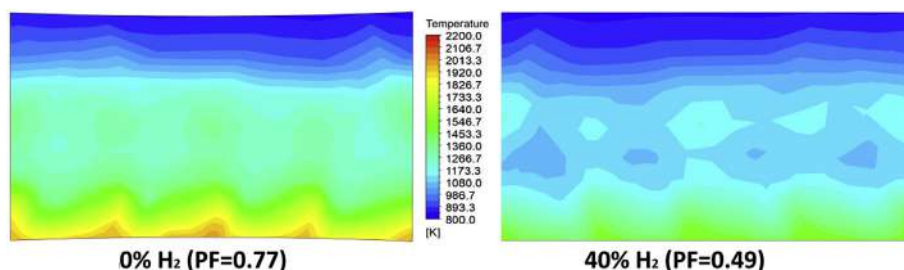


Fig. 15 – The distribution of outlet temperature of the combustor for the cases of 0% and 40% hydrogen at a constant fuel velocity.



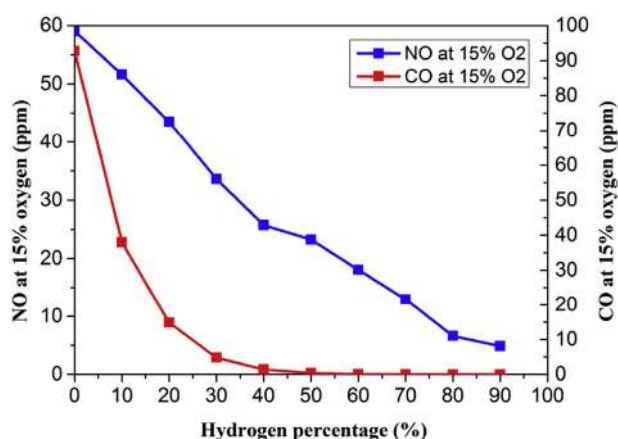


Fig. 17 – CO and NO emissions with 9-steps reaction scheme.

output, with a risk of not satisfying the thermal resistance of the turbine, and the environmental regulations.

In this part, the fuel velocity injection is maintained constant and equal to 100 m/s, same as the original design for the natural gas, which represents a mass flow rate of 0.000553 kg/s. Therefore, the increase in hydrogen percentage, induced the fuel mass flow rate to decrease, as the density of the blended fuel decreases.

Fig. 13 shows the temperature distributions in the longitudinal and perpendicular planes for 0%, 20%, 40%, 60% and 80% of hydrogen. The temperature increases gradually due to the increase of heat release from the blended fuel. The average temperature in the rich zone is continually increasing, while it is decreasing in the lean zone with the increase in hydrogen. This is a consequence of the high reactivity of hydrogen and the decreasing of fuel flow rate. Consequently, most of the fuel is consumed in the rich zone with the primary air coming from the mixing tube.

The variations of average temperature in the rich zone ( $T_{rz,avg}$ ), the lean zone ( $T_{lz,avg}$ ), the outlet of the combustor ( $T_{out,avg}$ ) and the pattern factor (PF) with hydrogen percentages are represented in Fig. 14. The average temperature at the rich

zone increases continually to reach 2265 K at 90% hydrogen. Otherwise, the average temperature at the lean zone decreases continually until a value of 1484 K at 90% hydrogen. This is a consequence of the high reactivity of the blended fuel as the amount of hydrogen increases and decreases the fuel mass flow rate at the same time.

As the percentage of hydrogen increases in the blended fuel at a fixed velocity, the average outlet temperature of the combustor decreases continually until 935 K. Therefore, the pattern factor decreases until 0.32 at 90% of hydrogen. Consequently, the distribution of temperature at the combustor outlet, improved the efficiency of the cooling system as shown in Fig. 15. However, low temperature at combustor outlet, decreases the combustion performance in term of power output, resulting in a power shortage at higher hydrogen percentage.

Fig. 16 illustrates the emissions of NO and CO corrected at 15% O<sub>2</sub> with different hydrogen percentages at the can combustor outlet using GRIMECH 3.0 reduced scheme. Both CO and NO emissions decrease with the increase of hydrogen percentage. The monoxide of carbon decreases, due to the decrease of carbon in the blended fuel as natural gas is substituted by hydrogen. Additionally, the nitric oxide decreases, due to the decrease in the outlet temperature.

Since the reduced GRIMECH 3.0 in the current simulations was adopted, a deviation in the magnitude of the pollutant emissions was expected. Hence, the 9-steps reaction mechanism is utilized in similar simulations as before in order to get the same order of magnitude as the experimental data for NO and CO emissions. NO and CO emissions are shown in Fig. 17. With only 10% of hydrogen in the blended fuel, CO emission drops from 92 to 37 ppm at 15% O<sub>2</sub>, NO emission drops from 59 to 51 ppm at 15% O<sub>2</sub>. The same is observed for the pattern factor, it decreases from 0.77 to 0.67. Following these results, the addition of hydrogen to natural gas lowers the NO and CO emissions, and a better temperature distribution at the outlet. However, the average outlet temperature drops from 1124 K to 1086 K, indicating a decrease in heat output. Consequently, the turbine may suffer a power loss, with the increase of hydrogen addition in the blended fuel. Fig. 18 depicts the effect of hydrogen substitution percentage on NOx emissions. The blended fuel CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> is injected at a fixed fuel inlet velocity (80 m/s). These results are taken from Shih et al. [41]. From a qualitative point of view, the same variations can be observed in both cases.

## Conclusions

The current work presents a 3D numerical simulation of the combustion process in an RQL type can combustor. The numerical simulations studied the effect of natural gas-hydrogen blended fuel on the combustion performance. In order to understand the application of hydrogen in the blended fuel, a percentage that represents the molar fraction of hydrogen in the blended fuel varied from 0% to 90% were studied. Therefore, a GRIMECH 3.0 reduced mechanism was used for the combustion process. The simulation results including the average temperatures in the rich zone, in the lean zone and in the combustor outlet were presented.

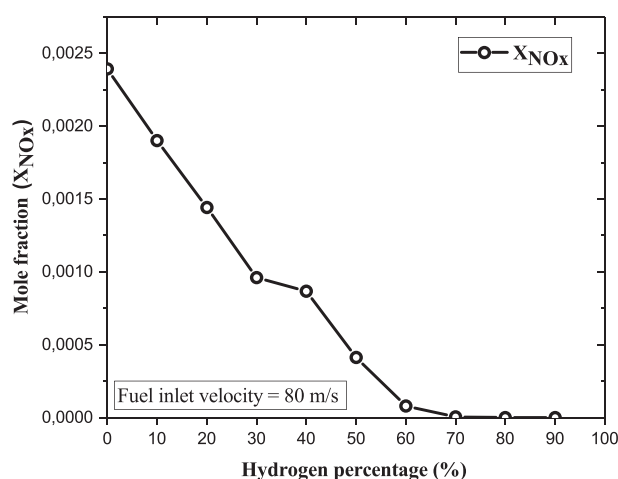


Fig. 18 – Effect of hydrogen substitution percentage on NOx emissions [41].

Additionally, the pattern factor and the pollutant emissions were analysed.

Primary results show that the use of a detailed scheme for the combustion reaction produces a much smoother profiles in term of temperature distribution. However, the more detailed scheme produces the more deviation in pollutant emissions results: by underestimating the CO value and overestimating the NO value.

When the blended fuel is injected at a constant mass flow rate, the temperature at the outlet of the combustor increased with increasing in hydrogen percentage. However, the appearance hot regions of temperature at the outlet of the combustor may not satisfy the thermal resistance of the turbine blades. Furthermore, a design modification at the dilution zone may be necessary in this case.

When the blended fuel is injected at a constant velocity, the pollutant emissions such as CO and NO decreased with the increase of hydrogen percentage. Moreover, the distribution of temperature at the outlet becomes more uniform. However, the decrease in the average outlet temperature decreases the power output of the micro gas turbine. Furthermore, a design modification at the fuel injector may be necessary in this case.

The most interesting result is that with only 10% of hydrogen addition to the natural gas, CO and NO emissions are reduced by approximatively 60% and 14% respectively.

## Acknowledgment

The authors acknowledge support from M.E.S.C. laboratory (Laboratoire de Mécanique Energétique et Systèmes de Conversion) and U.S.T.H.B. (Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene).

## REFERENCES

- [1] Cuneo A, Zaccaria V, Tucker D, Sorce A. Gas turbine size optimization in a hybrid system considering sofc degradation. *Appl Energy* 2018;230:855–64.
- [2] Banks FE. The political economy of natural gas. Routledge; 2017.
- [3] Mazloomi K, Gomes C. Hydrogen as an energy carrier: prospects and challenges. *Renew Sustain Energy Rev* 2012;16(5):3024–33.
- [4] Boudries R. Hydrogen as a fuel in the transport sector in Algeria. *Int J Hydrogen Energy* 2014;39(27):15215–23.
- [5] Nadaleti WC, Przybyla G, Belli Filho P, de Souza SNM, Quadro M, Andreazza R. Methane–hydrogen fuel blends for si engines in brazilian public transport: potential supply and environmental issues. *Int J Hydrogen Energy* 2017;42(17):12615–28.
- [6] Alliche M, Chikh S. Study of non-premixed turbulent flame of hydrogen/air downstream co-current injector. *Int J Hydrogen Energy* 2018;43(6):3577–85.
- [7] Smirnov N, Nikitin V. Modeling and simulation of hydrogen combustion in engines. *Int J Hydrogen Energy* 2014;39(2):1122–36.
- [8] Zidane A, Haoui R, Sellam M, Bouyahiaoui Z. Numerical study of a nonequilibrium h<sub>2</sub>-o<sub>2</sub> rocket nozzle flow. *Int J Hydrogen Energy* 2019;44(8):4361–73.
- [9] Pashchenko D. Comparative analysis of hydrogen/air combustion cfd-modeling for 3d and 2d computational domain of micro-cylindrical combustor. *Int J Hydrogen Energy* 2017;42(49):29545–56.
- [10] Cappelletti A, Martelli F. Investigation of a pure hydrogen fueled gas turbine burner. *Int J Hydrogen Energy* 2017;42(15):10513–23.
- [11] Yan Y, He Z, Xu Q, Zhang L, Li L, Yang Z, Ran J. Numerical study on premixed hydrogen/air combustion characteristics in micro-combustor with slits on both sides of the bluff body. *Int J Hydrogen Energy* 2019;44(3):1998–2012.
- [12] Kouchachvili L, Entchev E. Power to gas and h<sub>2</sub>/ng blend in smart energy networks concept. *Renew Energy* 2018;125:456–64.
- [13] Celtek MS, Pınarbaşı A. Investigations on performance and emission characteristics of an industrial low swirl burner while burning natural gas, methane, hydrogen-enriched natural gas and hydrogen as fuels. *Int J Hydrogen Energy* 2018;43(2):1194–207.
- [14] INOUE K, MIYAMOTO K, DOMEN S, TAMURA I, KAWAKAMI T, TANIMURA S. Development of hydrogen and natural gas co-firing gas turbine. *Mitsubishi Heavy Industries Technical Review* 2018;55(2):1.
- [15] Bullard T, Steinbrenner A, Stuttaford P, Jansen D, de Bruijne T. Improvement of premixed gas turbine combustion system fuel flexibility with increased hydrogen consumption in a renewable market place. *ASME turbo expo 2018: turbomachinery technical conference and exposition. American Society of Mechanical Engineers*; 2018. V04AT04A039–V04AT04A039.
- [16] Shih H-Y, Liu C-R. A computational study on the combustion of hydrogen/methane blended fuels for a micro gas turbines. *Int J Hydrogen Energy* 2014;39(27):15103–15.
- [17] Hussain T, Talibi M, Balachandran R. Investigating the effect of local addition of hydrogen to acoustically excited ethylene and methane flames. *Int J Hydrogen Energy* 2019;44(21):11168–84.
- [18] Rajpara P, Shah R, Banerjee J. Effect of hydrogen addition on combustion and emission characteristics of methane fuelled upward swirl can combustor. *Int J Hydrogen Energy* 2018;43(36):17505–19.
- [19] Zhao D, Gutmark E, de Goey P. A review of cavity-based trapped vortex, ultra-compact, high-g, inter-turbine combustors. *Prog Energy Combust Sci* 2018;66:42–82.
- [20] Samuelsen G, Brouwer J, Vardakas M, Holdeman J. Experimental and modeling investigation of the effect of air preheat on the formation of no<sub>x</sub> in an rql combustor. *Heat Mass Transf* 2013;49(2):219–31.
- [21] Fantozzi F, Laranci P, Bidini G. Cfd simulation of biomass pyrolysis syngas vs. natural gas in a microturbine annular combustor. *ASME turbo expo 2010: power for land, sea, and air. American Society of Mechanical Engineers*; 2010. p. 649–58.
- [22] Laranci P, Bidini G, DAlessandro B, Fantozzi F. Numerical analysis of the use of vegetable oil-tars mixtures from syngas scrubbing in a microturbine combustor. *ASME turbo expo 2014: turbine technical conference and exposition. American Society of Mechanical Engineers*; 2014. V03AT03A020–V03AT03A020.
- [23] Laranci P, Bidini G, DAlessandro B, Zampilli M, Forcella F, Fantozzi F. Improving lifetime and manufacturability of an rql combustor for microturbines: design and numerical validation. *ASME turbo expo 2015: turbine technical conference and exposition. American Society of Mechanical Engineers*; 2015. V003T03A009–V003T03A009.
- [24] G. Howe, Z. Li, T. Shih, H. Nguyen, Simulation of mixing in the quick quench region of a rich burn-quick quench mix-lean burn combustor, *AIAA Paper* (91-0410).

- [25] Blomeyer M, Krautkremer B, Hennecke D, Doerr T. Mixing zone optimization of a rich-burn/quick-mix/lean-burn combustor. *J Propuls Power* 1999;15(2):288–95.
- [26] Laranci P, Zampilli M, DAmico M, Bartocci P, Bidini G, Fantozzi F. Geometry optimization of a commercial annular rql combustor of a micro gas turbine for use with natural gas and vegetal oils. *Energy Procedia* 2017;126:875–82.
- [27] Samuelsen S. Rich burn, quick-mix, lean burn (rql) combustor. *The gas turbine handbook*. US Department of Energy, Office of Fossil Energy, National Energy Technology Laboratory; 2006. p. 227–33. DOE/NETL2006-1230.
- [28] Cameretti MC, Tuccillo R. Comparing different solutions for the micro-gas turbine combustor. *ASME turbo expo 2004: power for land, sea, and air*. American Society of Mechanical Engineers; 2004. p. 137–51.
- [29] A. Fluent, 12.0 user's guide, 2009, ANSYS Inc.
- [30] Patankar S. Numerical heat transfer and fluid flow. CRC press; 1980.
- [31] Chen S, Zhao D, Li HKH, Ng TY, Jin X. Numerical study of dynamic response of a jet diffusion flame to standing waves in a longitudinal tube. *Appl Therm Eng* 2017;112:1070–82.
- [32] Cadorin M, Pinelli M, De Pascale A, Bianchi M, Laranci P, Fantozzi F. Cfd simulation of a microturbine annular combustion chamber fuelled with methane and biomass pyrolysis syngas: preliminary results. *ASME turbo expo 2009: power for land, sea, and air*. American Society of Mechanical Engineers; 2009. p. 811–22.
- [33] Sallevelt J, Pozarlik AK, Brem G. Numerical study of pyrolysis oil combustion in an industrial gas turbine. *Energy Convers Manag* 2016;127:504–14.
- [34] Smith GP, Golden DM, Frenklach M, Moriarty NW, Eiteneer B, Goldenberg M, Bowman CT, Hanson RK, Song S, Gardiner Jr W, et al. Gri-mech 3.0, [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech); 1999.
- [35] Lavoie GA, Heywood JB, Keck JC. Experimental and theoretical study of nitric oxide formation in internal combustion engines. *Combust Sci Technol* 1970;1(4):313–26.
- [36] Magnussen BF, Hjertager BH. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Symposium (international) on combustion*, vol. 16. Elsevier; 1977. p. 719–29.
- [37] Laranci P, Bursi E, Fantozzi F. Numerical analysis of a microturbine combustion chamber modified for biomass derived syngas. *ASME 2011 turbo expo: turbine technical conference and exposition*. American Society of Mechanical Engineers; 2011. p. 541–8.
- [38] Westbrook CK, Dryer FL. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combust Sci Technol* 1981;27(1–2):31–43.
- [39] Jones W, Lindstedt R. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combust Flame* 1988;73(3):233–49.
- [40] Cameretti MC, Tuccillo R. Combustion analysis in a micro-gas turbine supplied with bio-fuels. *ASME turbo expo 2014: turbine technical conference and exposition*. American Society of Mechanical Engineers; 2014. V01BT24A010–V01BT24A010.
- [41] Shih H-Y, Liu C-R. A computational study of hydrogen substitution effects on the combustion performance for a micro gas turbine. *ASME 2011 turbo expo: turbine technical conference and exposition*. American Society of Mechanical Engineers; 2011. p. 713–21.

# Bibliographie

- [1] Jai Gopal Gupta, Sudipta De, Anirudh Gautam, Atul Dhar, and Ashok Pandey. Introduction to sustainable energy, transportation technologies, and policy. In *Sustainable Energy and Transportation*, pages 3–7. Springer, 2018. 6
- [2] International Energy Agency. World energy outlook 2006, 2007. 6
- [3] Felix A Farret and M Godoy Simoes. *Integration of alternative sources of energy*. John Wiley & Sons, 2006. 6
- [4] Ernesto Benini. *Progress in gas turbine performance*. BoD–Books on Demand, 2013. 6
- [5] Claire Soares. *Microturbines : applications for distributed energy systems*. Elsevier, 2011. 6
- [6] Meherwan P Boyce. *Gas turbine engineering handbook*. Elsevier, 2011. 6
- [7] Bernard F Kolanowski. *Guide to microturbines*. Fairmont Press, 2004. 7
- [8] Combined heat and power systems technology development and demonstration 370 kw high efficiency microturbine. 10 2015. doi : 10.2172/1224801. 7
- [9] O Dessornes, S Landais, R Valle, A Fourmaux, S Burguburu, C Zwyssig, and Z Kozanecki. Advances in the development of a microturbine engine. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 136(7) :071201, 2014. 7
- [10] A Cuneo, Valentina Zaccaria, D Tucker, and A Sorce. Gas turbine size optimization in a hybrid system considering sofc degradation. *Applied Energy*, 230 : 855–864, 2018. 9

- [11] Ferdinand E Banks. *The political economy of natural gas*. Routledge, 2017. 9
- [12] Sanjay M Correa. A review of nox formation under gas-turbine combustion conditions. *Combustion science and technology*, 87(1-6) :329–362, 1993. 9
- [13] I Glassman. *Combustion*. academic press san diego, 1996. 10
- [14] Nasser Shelil, Anthony Griffiths, Audrius Bagdanavicius, and Nick Syred. Flash-back limits of premixed h<sub>2</sub>/ch<sub>4</sub> flames in a swirl-stabilized combustor. In *ASME Turbo Expo 2010 : Power for Land, Sea, and Air*, pages 1247–1258. American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, 2010. vii, 10
- [15] Toshiaki Kitagawa, Takashi Nakahara, Kosuke Maruyama, Kunihiro Kado, Akihiro Hayakawa, and Shoichi Kobayashi. Turbulent burning velocity of hydrogen–air premixed propagating flames at elevated pressures. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(20) :5842–5849, 2008. vii, 11, 12
- [16] Erjiang Hu, Zuohua Huang, Jiajia He, and Haiyan Miao. Experimental and numerical study on laminar burning velocities and flame instabilities of hydrogen–air mixtures at elevated pressures and temperatures. *international journal of hydrogen energy*, 34(20) :8741–8755, 2009. vii, 11, 12
- [17] Sebastian Verhelst, J Vancoillie, J Demuynck, et al. A correlation for the laminar burning velocity for use in hydrogen spark ignition engine simulation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(1) :957–974, 2011. vii, 12, 13
- [18] OC Kwon and GM Faeth. Flame/stretch interactions of premixed hydrogen-fueled flames : measurements and predictions. *Combustion and Flame*, 124(4) : 590–610, 2001. 10
- [19] G Rozenchan, DL Zhu, Chung King Law, and SD Tse. Outward propagation, burning velocities, and chemical effects of methane flames up to 60 atm. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(2) :1461–1470, 2002. 10
- [20] Jhon Pareja, Hugo J Burbano, Andrés Amell, and Julián Carvajal. Laminar burning velocities and flame stability analysis of hydrogen/air premixed flames at low pressure. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(10) :6317–6324, 2011. 11



- [21] Mark D Durbin and Dilip R Ballal. Studies of lean blowout in a step swirl combustor. 1996. 13
- [22] RW Schefer. Hydrogen enrichment for improved lean flame stability. *International Journal of Hydrogen Energy*, 28(10) :1131–1141, 2003. 13
- [23] David R Noble, Qingguo Zhang, Akbar Shareef, Jeremiah Tootle, Andrew Meyers, and Tim Lieuwen. Syngas mixture composition effects upon flashback and blowout. In *ASME Turbo Expo 2006 : Power for Land, Sea, and Air*, pages 357–368. American Society of Mechanical Engineers, 2006. 13
- [24] Tim Lieuwen, Vince McDonell, Eric Petersen, and Domenic Santavicca. Fuel flexibility influences on premixed combustor blowout, flashback, autoignition, and stability. *Journal of engineering for gas turbines and power*, 130(1) :011506, 2008. 14
- [25] Peter Therkelsen, Josh Mauzey, Vince McDonell, and Scott Samuelsen. Evaluation of a low emission gas turbine operated on hydrogen. In *ASME Turbo Expo 2006 : Power for Land, Sea, and Air*, pages 557–564. American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, 2006. 14
- [26] Cecil Marek, Timothy Smith, and Krishna Kundu. Low emission hydrogen combustors for gas turbines using lean direct injection. In *41st AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*, page 3776, 2005. vii, 15
- [27] Hsin-Yi Shih and Chi-Rong Liu. A computational study on the combustion of hydrogen/methane blended fuels for a micro gas turbines. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(27) :15103–15115, 2014. viii, 15, 16
- [28] Carmelina Abagnale, Maria Cristina Cameretti, Roberta De Robbio, and Raffaele Tuccillo. Cfd study of a mgt combustor supplied with syngas. *Energy Procedia*, 101 :933–940, 2016. viii, xi, 16, 17
- [29] Parag Rajpara, Rupesh Shah, and Jyotirmay Banerjee. Effect of hydrogen addition on combustion and emission characteristics of methane fuelled upward swirl can combustor. *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(36) :17505–17519, 2018. viii, 18

- [30] JLHP Salleveld, JEP Gudde, Artur Krzysztow Pozarlik, and Gerrit Brem. The impact of spray quality on the combustion of a viscous biofuel in a micro gas turbine. *Applied energy*, 132 :575–585, 2014. [viii](#), [18](#), [19](#)
- [31] Marco Buffi, Alessandro Cappelletti, Andrea Maria Rizzo, Francesco Martelli, and David Chiaramonti. Combustion of fast pyrolysis bio-oil and blends in a micro gas turbine. *Biomass and bioenergy*, 115 :174–185, 2018. [viii](#), [20](#), [21](#)
- [32] Ekenechukwu C Okafor, KD Kunkuma A Somarathne, Akihiro Hayakawa, Taku Kudo, Osamu Kurata, Norihiko Iki, and Hideaki Kobayashi. Towards the development of an efficient low-nox ammonia combustor for a micro gas turbine. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(4) :4597–4606, 2019. [viii](#), [21](#), [22](#), [23](#)
- [33] Paolo Laranci, Gianni Bidini, Bruno D’Alessandro, Mauro Zampilli, Fabio Forcella, and Francesco Fantozzi. Improving lifetime and manufacturability of an rql combustor for microturbines : design and numerical validation. In *ASME Turbo Expo 2015 : Turbine Technical Conference and Exposition*, pages V003T03A009–V003T03A009. American Society of Mechanical Engineers, 2015. [viii](#), [xi](#), [23](#), [24](#)
- [34] Ansys Fluent. 12.0 theory guide. *Ansys Inc*, 5(5), 2009. [26](#), [34](#)
- [35] S CD-adapco. Star ccm user guide version 12.04. *CD-Adapco : New York, NY, USA*, 2017. [26](#)
- [36] David C Wilcox. Turbulence modeling for cfd. la canada, ca : Dcw industries. *Inc*, November, 2006. [34](#)
- [37] Bjørn F Magnussen and Bjørn H Hjertager. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In *Symposium (international) on Combustion*, volume 16, pages 719–729. Elsevier, 1977. [35](#), [38](#)
- [38] ZM Guo, HQ Zhang, CK Chan, and WY Lin. Presumed joint probability density function model for turbulent combustion. *Fuel*, 82(9) :1091–1101, 2003. [35](#)
- [39] Gregory P Smith, David M Golden, Michael Frenklach, Nigel W Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C Thomas Bowman, Ronald K Hanson, Soonho

- Song, WC Gardiner Jr, et al. Gri-mech 3.0, 1999. URL [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech), 2011. 38
- [40] George A Lavoie, John B Heywood, and James C Keck. Experimental and theoretical study of nitric oxide formation in internal combustion engines. *Combustion science and technology*, 1(4) :313–326, 1970. 40, 55
- [41] Suhas Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. CRC press, 1980. 43
- [42] Francesco Fantozzi, Paolo Laranci, and Gianni Bidini. Cfd simulation of biomass pyrolysis syngas vs. natural gas in a microturbine annular combustor. In *ASME Turbo Expo 2010 : Power for Land, Sea, and Air*, pages 649–658. American Society of Mechanical Engineers, 2010. viii, ix, 43, 44, 46, 49, 55, 56
- [43] Scott Samuelsen. Rich burn, quick-mix, lean burn (rq) combustor. *The Gas Turbine Handbook, US Department of Energy, Office of Fossil Energy, National Energy Technology Laboratory, DOE/NETL2006-1230*, pages 227–233, 2006. 44
- [44] Maria Cristina Cameretti and Raffaele Tuccillo. Comparing different solutions for the micro-gas turbine combustor. In *ASME Turbo Expo 2004 : Power for Land, Sea, and Air*, pages 137–151. American Society of Mechanical Engineers, 2004. 50
- [45] Maria Cristina Cameretti and Raffaele Tuccillo. Combustion analysis in a micro-gas turbine supplied with bio-fuels. In *ASME Turbo Expo 2014 : Turbine Technical Conference and Exposition*, pages V01BT24A010–V01BT24A010. American Society of Mechanical Engineers, 2014. 51, 56
- [46] Paolo Laranci, Edoardo Bursi, and Francesco Fantozzi. Numerical analysis of a microturbine combustion chamber modified for biomass derived syngas. In *ASME 2011 Turbo Expo : Turbine Technical Conference and Exposition*, pages 541–548. American Society of Mechanical Engineers, 2011. 55
- [47] Charles K Westbrook and Frederick L Dryer. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combustion science and technology*, 27(1-2) :31–43, 1981. 55
- [48] WP Jones and RP Lindstedt. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combustion and flame*, 73(3) :233–249, 1988. 55



- [49] Taaha Hussain, Midhat Talibi, and Ramanarayanan Balachandran. Investigating the effect of local addition of hydrogen to acoustically excited ethylene and methane flames. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019. ix, 64
- [50] Hsin-Yi Shih and Chi-Rong Liu. A computational study of hydrogen substitution effects on the combustion performance for a micro gas turbine. In *ASME 2011 Turbo Expo : Turbine Technical Conference and Exposition*, pages 713–721. American Society of Mechanical Engineers, 2011. x, 68, 69
- [51] Bonnie J McBride, Michael J Zehe, and Sanford Gordon. Nasa glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species. 2002. xi, 84, 85, 86