

UMR 6614



COMPLEXE DE RECHERCHE
INTERPROFESSIONNEL EN AÉROTHÉRMOCHEMIE



INSTITUT NATIONAL
DES SCIENCES
APPLIQUÉES
ROUEN NORMANDIE



Normandie Université

**MESURE DE LA VITESSE DE FLAMME LAMINAIRE DE COMPOSÉS
HYDROCARBONÉS OXYGÉNÉS PURS ET DE BIOCARBURANTS DÉRIVÉS
DE LA BIOMASSE LIGNOCELLULOSIQUE CONTENANT DES COMPOSÉS
OXYGÉNÉS**

présenté par
Y. Wu, J. Apeloig, E. Rouet, B. Rossow, V. Modica, B. Barviau, F. Grisch




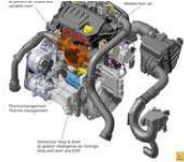
energy materials &
clean combustion center

Programme de recherche
BIOCAR



Contexte

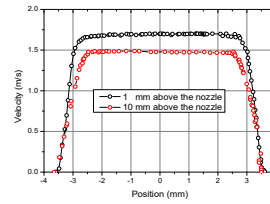
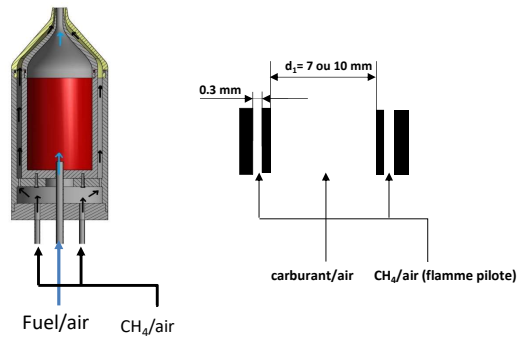
- ❖ **Combustion appliquée à la propulsion aéronautique et terrestre**
 - Haute Température
 - Haute Pression
(moteur d'avion à 4.0 MPa et 800 K)
 - Large gamme de richesse
 - **Carburants fossiles Multi-Composant**
(kérosène, diesel, essence (C₁-C₂₀))
- ❖ **Carburants de Substitution et Nouvelles Technologies**
(Hydrogène, Syngas, Biomass...)
- ❖ **Efficacité de combustion, réduction des émissions polluantes**
(CO, CO₂, NO_x, Particules...)
- ❖ **Mesures expérimentales de vitesse de flamme laminaire**
 - Validation des mécanismes cinétiques chimiques
(dans des conditions larges en pression, température, richesse...)
 - Paramètres d'entrée pour modèles de combustion turbulente
 - Efficacité de combustion → Important pour conception de brûleurs et de moteurs

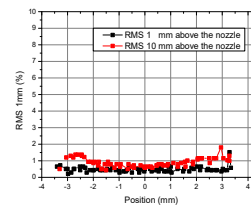
1/15

Dispositif Expérimental

❖ Brûleur haute-pression de type Bunsen



Velocity profiles measured above the nozzle outlet z=1 mm and 10 mm



Velocity RMS fluctuation above the nozzle outlet z=1 mm and 10 mm

- Diamètre de buse 10 mm (CH4) ou 7 mm (kérosène, essence, Biocarburants)
- Forme de la buse : Polynôme d'ordre 3
 - Réduction de l'épaisseur des couches limites
- Anémométrie fil chaud pour mesurer le profil de vitesse ($T_{ambiante}$, P_{atm})

2/15

État de l'art

Dispositif expérimental

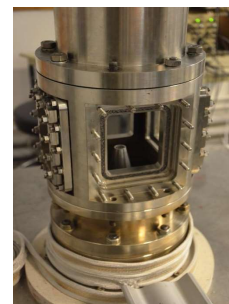
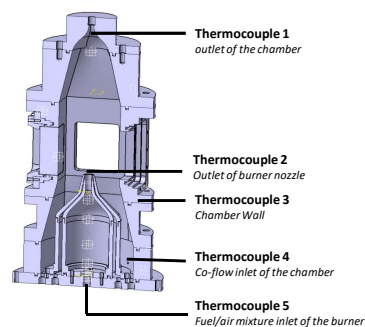
Méthodologie

Résultats

Conclusion & Prospective

Dispositif Expérimental

❖ Brûleur haute-pression de type Bunsen



Brûleur haute pression

- Conditions d'essai : **T = 600 K, P = 3.0 MPa**
- 5 thermocouples pour contrôler la température de l'écoulement dans la chambre de combustion
- 4 accès optiques en quartz UV
- Nid d'abeille et billes de verres ajoutées pour laminariser le jet d'air en entrée de veine

2/15

État de l'art

Dispositif expérimental

Méthodologie

Résultats

Conclusion & Prospective

Dispositif Expérimental

2/15

- Système de **vaporisation de carburant liquide (CEM Bronkhorst Instruments)**
- Pression et températures contrôlées par logiciel LabVIEW
- Gamme de richesse : $\phi = 0.5 - 1.4$ (avec flamme pilote)

État de l'art
Dispositif expérimental
Méthodologie
Résultats
Conclusion & Prospective

Méthodes de mesure de la Vitesse de Flamme Laminaire

❖ Diagnostics optiques

➔ **Chimiluminescence OH***

- Caméra 16-bit ICCD, 10 Hz
- Filtre optique: 310 nm

images instantanées (OH chimiluminescence)*

➔ **PLIF-OH**

- 282,75 nm, $Q_L(5)$, énergie laser 5 mJ
- Filtre optique: 310 nm

images instantanées (fluorescence OH)

➔ **PLIF-Aromatique**

- bande d'absorption aromatique : 260 - 420 nm

images instantanées de fluorescence d'aromatiques

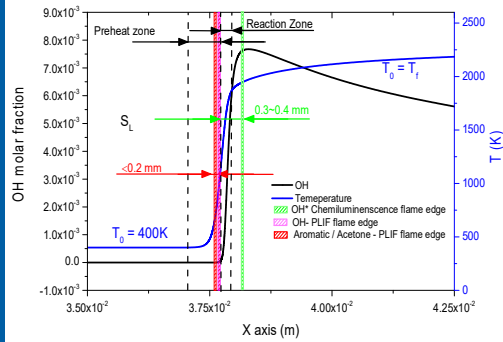
3/15

État de l'art
Dispositif expérimental
Méthodologie
Résultats
Conclusion & Prospective

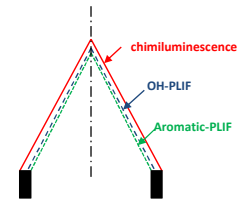
Méthodologie de mesure

❖ Surface de la flamme

- Effet d'épaisseur de la flamme
 - ✓ Influence considérablement la précision de mesure



Profils de T et OH (n-decane/air à T = 400 K, P = 0.1 MPa, φ = 1.0).



$$\rho_0 S_L A = Q_m \rightarrow S_L = \frac{Q_m}{\rho_0 * A}$$

- ❑ S_L sensible à la mesure du contour de flamme
- ❑ Différentes techniques optiques donnent différents contours de flamme

- différence des contours entre chimiluminescence et OH-PLIF : 0.2 – 0.3 mm
- Aromatique/Acétone-PLIF < 0.2 mm
- chimiluminescence située dans la zone où la réaction est développée
- OH-PLIF au début de la zone de réaction
- Aromatique/Acétone-PLIF : contours des gaz frais

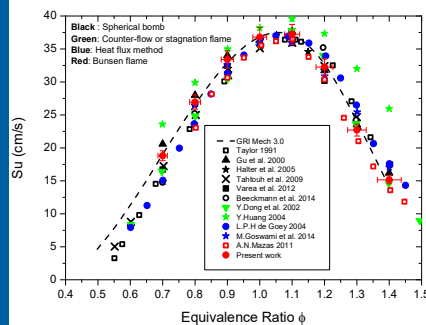
4/15

État de l'art Dispositif expérimental **Méthodologie** Résultats Conclusion & Prospective

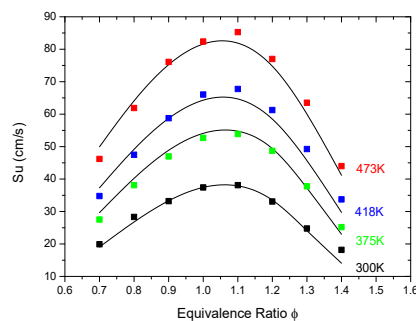
Résultats expérimentaux

❖ Validation de la méthodologie de mesure

- Flamme Laminaire Méthane/Air



S_L entre résultats présents dans la littérature. (CH₄/air, T_{air} = 300 K, P = 0.1 MPa).



S_L pour CH₄/air, T = 300 – 473 K (points : mesures ; lignes : simulation avec GRI-Mech 3.0)

5/15

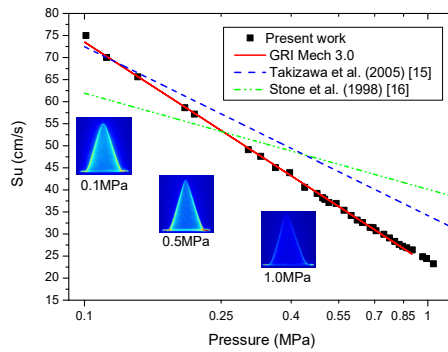
Yi Wu, Vincent Modica, Bjorn Rossow, Frederic Grisch, « Effects of pressure and preheating temperature on the laminar flame speed of methane/air and acetone/air mixtures », Fuel, Volume 185, 2016, Pages 577-588

État de l'art Dispositif expérimental Méthodologie **Résultats** Conclusion & Prospective

Résultats expérimentaux

❖ Validation de la méthodologie de mesure

- Flamme Laminaire Méthane/air → **Effet de la pression**



Variation S_u avec pression (CH_4/air , $T = 473 K$, $\phi = 1.2$).

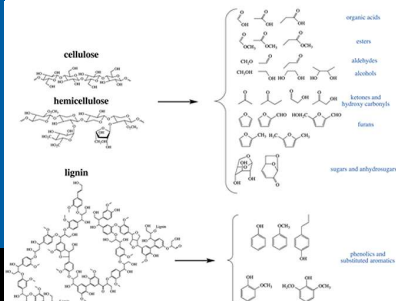
6/15

Biocarburants avec Composés Oxygénés

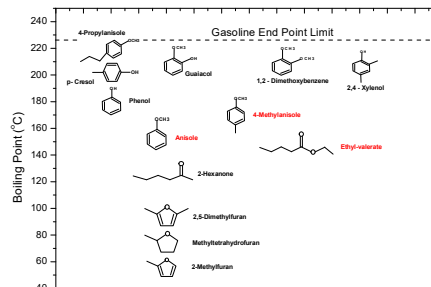
❖ Motivation

- ✓ Biocarburants de deuxième génération produits par pyrolyse thermochimique contiennent une grande quantité de composés oxygénés (**jusqu'à 45%**)
- ✓ Supprimer complètement tous les oxygénés n'est pas économiquement admissible

→ Etude nécessaire sur effets du pourcentage des composés oxygénés dans le carburant essence



Residuals remaining after hydro-processing of a bio-crude



Oxygenates distribution in function of the boiling point in a gasoline composition

7/15

Biocarburants avec Composés Oxygénés

❖ Vitesse laminaire

- ✓ Biocarburants de deuxième génération produits par pyrolyse thermochimique contiennent une grande quantité de composés oxygénés (*jusqu'à 45%*)
- ✓ Supprimer complètement tous les oxygénés n'est pas économiquement admissible

→ *Etude nécessaire sur effets du pourcentage des composés oxygénés dans le carburant essence*

❖ Objectifs de l'étude

- ✓ **Carburant de substitution à l'essence commerciale sans produits oxygénés** est proposée et analysée → vitesse de flamme laminaire
- ✓ **Mesure de S_L pour des composés oxygénés**
→ (*anisole, 4-methylanisole, ethylvalerate*)
- ✓ **Etude de l'addition de composés oxygénés** dans l'essence de substitution

→ *Mesure de S_L pour des mélanges de substitution essence avec différents pourcentages de composés oxygénés*

8/15

État de l'art

Dispositif expérimental

Méthodologie

Résultats

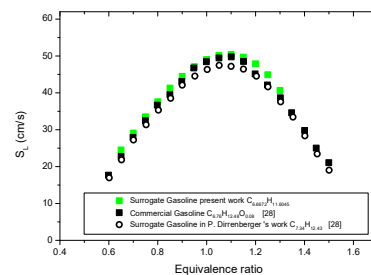
Conclusion & Prospective

Biocarburants avec Composés Oxygénés

❖ Essence de substitution à Essence Commerciale

	Volume (%)	Formula	Boiling point (° C)	
Hexane	24.31	C_6H_{14}	69	
2,3 dimethyl-2-butene	8.15	C_6H_{14}	72	
Cyclohexane	14.21	C_6H_{12}	80	
Isooctane	17.75	C_8H_{18}	99	
Toluene	35.58	C_7H_8	110	

Composition of *surrogate gasoline* proposed in the present work $C_{6.6672}H_{11.6045}$ (SAO)



laminar flame speeds of SAO, commercial gasoline (TAE7000) and surrogate gasoline referenced [3]

9/15

P. Dirrenberger, P. Glaude, R. Bounaceur, H. L. Gall, A. P. da Cruz, A. Konnov and F. Battin-Leclerc, "Laminar burning velocity of gasolines with addition of ethanol," *Fuel*, vol. 115, pp. 162-169, 2014

État de l'art

Dispositif expérimental

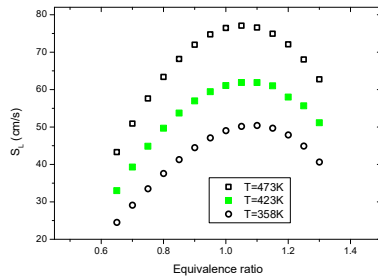
Méthodologie

Résultats

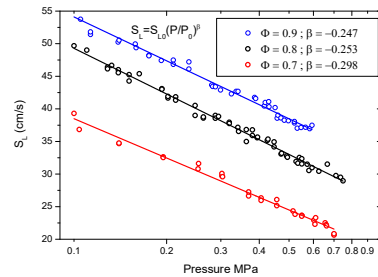
Conclusion & Prospective

Biocarburants avec Composés Oxygénés

❖ Essence de substitution à Essence Commerciale



S_L of SAO in function of ϕ for $T = 358, 423$ and 473 K. $P = 0.1$ MPa.



S_L of SAO in function of pressure. $P = 0.1 - 0.8$ MPa $\phi = 0.7, 0.8$ and 0.9 and $T = 423$ K

10/15

Yi Wu, Bjorn Rossow, Vincent Modica, Xilong Yu, Linlin Wu, Frederic Grisch, « Laminar flame speed of lignocellulosic biomass-derived oxygenates and blends of gasoline/oxygenates » *Fuel*, Volume 202, 2017, Pages 572- 582

État de l'art Dispositif expérimental Méthodologie **Résultats** Conclusion & Prospective

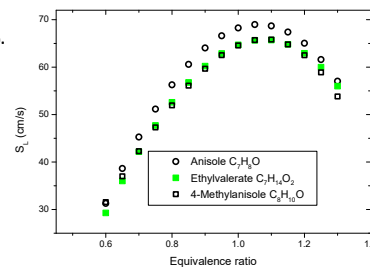
Biocarburants avec Composés Oxygénés

❖ Composés Oxygénés Purs

Molécules oxygénées classées par RON et T_{eb} .

Fuel	Formula	Boiling point (° C)	Density (kg/m ³)	RON
Anisole	CH ₃ OC ₆ H ₅	155	660	119
4-methylanisole	C ₈ H ₁₀ O	174	669	> 130
Ethyl valerate	C ₇ H ₁₄ O ₂	145	875	~ 100

Oxygenates properties



S_L of anisole/ N_2/O_2 , 4-methylanisole/ N_2/O_2 and ethyl valerate/ N_2/O_2 mixtures at $T = 423$ K, $P = 0.1$ MPa and $\phi = 0.6 - 1.3$

11/15

RON : Research Octane Number

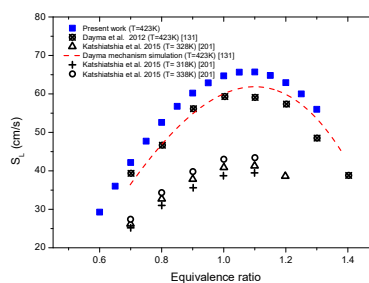
État de l'art Dispositif expérimental Méthodologie **Résultats** Conclusion & Prospective

Biocarburants avec Composés Oxygénés

❖ Composés Oxygénés Purs

Fuel	Formula	Boiling point (° C)	Density (kg/m ³)	RON
Anisole	CH ₃ OC ₆ H ₅	155	660	119
4-methylanisole	C ₈ H ₁₀ O	174	669	> 130
Ethyl valerate	C ₇ H ₁₄ O ₂	145	875	~ 100

Oxygenates properties



Comparison of laminar flame speeds of ethyl valerate/N₂/O₂ mixtures between our measurements and literature results

12/15

G. Dayma, F. Halter, F. Foucher, C. Togbé, C. Mounaim-Rousselle and P. Dagaut, "Experimental and Detailed Kinetic Modeling Study of Ethyl Pentanoate (Ethyl Valerate) Oxidation in a Jet Stirred Reactor and Laminar Burning Velocities in a Spherical Combustion Chamber," *Energy & Fuels*, vol. 26, no. 8, pp. 4735-4748, 2012.

M. H. Katshiatshia, E. J. Nilsson, V. Dias, H. Jeanmart and A. A. Konnov, "Experimental Studies and Kinetic Modeling of Ethyl Valerate: Flat Flame Structures and Laminar Burning Velocities," *European Combustion Meeting*, 2015.

État de l'art

Dispositif expérimental

Méthodologie

Résultats

Conclusion & Prospective

Biocarburants avec Composés Oxygénés

❖ Addition de Composés Oxygénés dans l'Essence de Substitution

Mixture	Hexane (%)	2,3 dimethyl-2-butene (%)	Cyclohexane (%)	Isooctane (%)	Toluene (%)	Anisole (%)	Estimated RON
SA0	24.31	8.15	14.21	17.75	35.53	0	94.2
SA10	21.88	7.35	12.8	15.98	31.98	10	97.8
SA20	19.45	6.52	11.37	14.2	28.42	20	100.1
SA30	17.02	5.71	9.95	12.43	24.87	30	102.8
SA50	12.16	4.08	7.11	8.88	17.77	50	107.7
SA75	6.08	2.04	3.55	4.44	8.88	75	113.2
SA100	0	0	0	0	0	100	119
ST0	24.31	8.15	14.21	17.75	0	35.53	94.3

13/15

État de l'art

Dispositif expérimental

Méthodologie

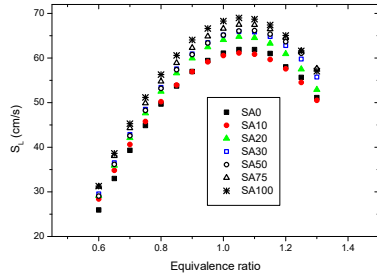
Résultats

Conclusion & Prospective

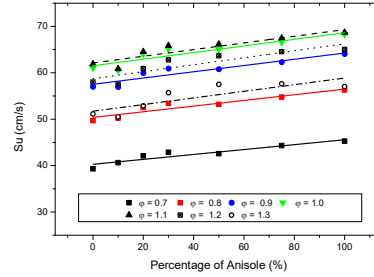
Biocarburants avec Composés Oxygénés

❖ Addition de Composés Oxygénés dans l'Essence de Substitution

➔ Effet de la teneur en composés oxygénés (anisole)



Laminar flame speed of the SA0, SA10, SA20, SA30, SA50, SA75 and SA100 surrogates. $T = 423\text{ K}$, $P = 0.1\text{ MPa}$ and $\varphi = 0.6 - 1.3$



Variation of the laminar flame speed of the mixture in function of the anisole fraction: $T = 423\text{ K}$, $P = 0.1\text{ MPa}$ and $\varphi = 0.6 - 1.3$ (slope value with linear fittings, $\varphi = 0.7 - 1.3$)

14/15

État de l'art

Dispositif expérimental

Méthodologie

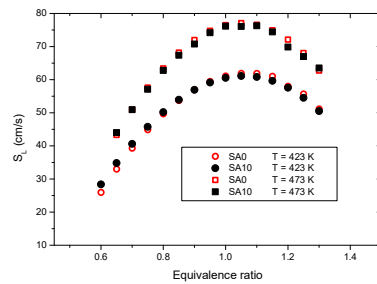
Résultats

Conclusion & Prospective

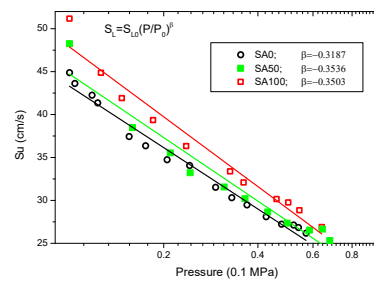
Biocarburants avec Composés Oxygénés

❖ Addition de Composés Oxygénés dans l'Essence de Substitution

➔ Effet de la Température et Pression



Variation of the laminar flame speed of the SA0 and SA10 surrogates at two preheating temperatures, 423 and 473 K. $P = 0.1\text{ MPa}$, $\varphi = 0.6 - 1.3$



Laminar flame speeds versus pressure of reference surrogate gasoline, pure anisole and blend of 50 % surrogate gasoline and 50 % anisole: $T = 423\text{ K}$, $P = 0.1 - 0.75\text{ MPa}$ and $\varphi = 0.75$.

15/15

État de l'art

Dispositif expérimental

Méthodologie

Résultats

Conclusion & Prospective

Conclusions & Perspectives

- Nouvelle installation expérimentale développée : permet de mesurer S_L pour des combustibles gazeux et liquides à des conditions de haute pression et de température élevées
 - ✓ $T = 600 \text{ K}$ et $P = 1,5 \text{ MPa}$
- Mesures préliminaires de S_L pour des mélanges CH₄/air effectuées
- Addition de composés oxygénés dans l'essence de substitution
 - ✓ Une nouvelle essence de substitution de 5 composants a été proposée et peut reproduire S_L de l'essence commerciale avec de faibles différences
 - ✓ Performances de Anisole, 4-méthylanisole et Ethylvalérate étudiées

$$S_{L_{\text{aniso}}} > S_{L_{4\text{-methylanisole}}} > S_{L_{\text{ethylvalérate}}}$$
 - ✓ Influence faible (jusqu'à 10 %) de composés oxygénés dans l'essence sur la vitesse de flamme
 - ✓ Pour des concentrations plus élevées, amélioration conjointe de S_L et du RON
- Effets des composés oxygénés sur la formation des polluants
 - ✓ Action sur la réduction des suies généralement bénéfique – A valider
 - ✓ Action sur les NOx ??? - Etude en cours sur la même configuration

16/15

État de l'art

Dispositif expérimental

Méthodologie

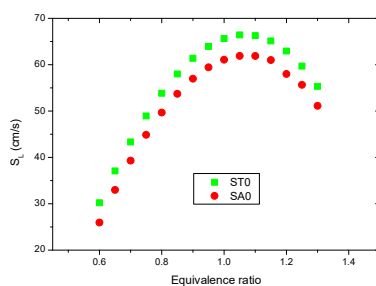
Résultats

Conclusion & Perspective

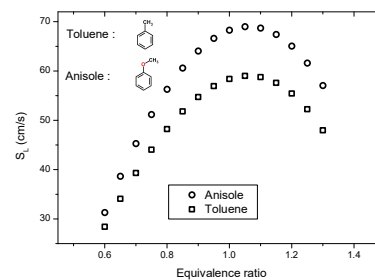
Résultats expérimentaux

❖ S_L biocarburants avec composés oxygénés

- Essence de substitution
- Composés oxygénés purs
- Effet de l'addition de composés oxygénés dans l'essence
 - ➔ Possible de développer surrogate biofuel de 2nd generation



Comparison of the laminar flame speeds of the SA0/air and ST0/air mixtures at 423 K and atmospheric pressure.



Comparison of the laminar flame speeds of anisole and toluene at 423 K and atmospheric pressure.

47/50

État de l'art

Dispositif expérimental

Méthodologie

Résultats

Conclusion & Perspective