



C. VILLERMAUX

Modélisation du comportement thermique d'un calorimètre de référence pour la mesure du pouvoir calorifique des gaz

Thermal behaviour modelisation of a reference calorimeter used to measure the gas calorific value

Clotilde Villermaux¹, Frédérique Haloua², Mures Zarea¹, Bruno Hay² et Jean-Rémy Filtz²

¹ GDF-Suez, R&D Division, 361 Avenue du Président Wilson, BP 33, 93211 Saint Denis La Plaine Cedex, France, clotilde.villermaux@gdfsuez.com.

² Laboratoire national de métrologie et d'essais (LNE), 29 Avenue Roger Hennequin, 78197 Trappes Cedex, France, frederique.haloua@lne.fr.

Résumé

Les nouvelles technologies (chromatographes compacts, simulation numérique fine du réseau de gaz), les nouvelles normes et règles de régulation du transport de gaz naturel ont motivé la communauté européenne gazière à lancer la construction de calorimètres de référence pour la mesure de l'énergie des gaz combustibles.

L'un de ces calorimètres, dont le fonctionnement repose sur le principe de la calorimétrie isopéribolique, est actuellement en cours de développement au sein du Laboratoire national de métrologie et d'essais (LNE). L'étalonnage de ce calorimètre est réalisé par effet Joule via une résistance électrique, dissipant une énergie équivalente à celle délivrée par la combustion du gaz. La mesure du pouvoir calorifique supérieur (PCS) du gaz est très fortement dépendante d'une part de l'efficacité du transfert thermique entre la chambre de combustion et le bain du calorimètre dans lequel elle est immergée, et d'autre part du niveau d'isolation thermique de l'enceinte du calorimètre vers l'extérieur.

Afin d'optimiser l'homogénéité et de maximiser les transferts thermiques vers le bain du calorimètre, GDF-Suez a réalisé des simulations numériques 3D de l'écoulement et de ces transferts dans le bain. L'analyse porte en particulier sur l'influence des transferts radiatifs, en comparant une source radiative pure, idéalisant le cas avec combustion, à la configuration d'étalonnage représentée par un flux uniforme imposé à la surface de la chambre de combustion. Après avoir validé la représentativité de ces simulations, les résultats détaillés fournis par ces simulations transitoires 3D ont permis de valider les principales options de conception, et d'aider à orienter d'autres choix techniques afin d'améliorer la mesure du PCS avec le calorimètre.

MOTS CLÉS : CALORIMÈTRE DE RÉFÉRENCE, CALORIMÈTRE ISOPÉRIBOLIQUE, TRANSFERTS THERMIQUES, RAYONNEMENT, COMBUSTION, ÉTALONNAGE ÉLECTRIQUE, SIMULATION NUMÉRIQUE TRANSITOIRE 3D.

Abstract

The European gas community has launched the realisation of reference gas calorimeters for the measurement of heat released by fuel gas combustions. This was motivated by the evolution of practices with novel technologies and a changing regulatory framework and the issue of measuring GCV in a large meshed gas transmission network.

One of these calorimeters, based on the isoperibolic calorimetry principle, is currently under development at LNE (French national metrology and testing institute). The calibration of the calorimeter is realized by substituting an electrical heating to the flame.

The calculation of the calorific value of a combustible gas is strongly dependent first on the heat transfer efficiency between the combustion chamber (burner) and the calorimeter bath in which this burner is immersed and secondly, on the insulation level of the calorimeter vessel.

GDF-Suez performed 3D numerical simulations of the flow and heat transfer in the calorimeter bath in order to optimize homogeneity and maximize thermal heat transfer to the water bath. The influence of the radiative heat transfer was checked when imposing a pure radiative source as an idealisation of the flame, compared to the imposed surface flux case, representative of the electrical heating during calibration. After having shown that the numerical results are meaningful, the obtained results both validate the main design options, and change some other design choices, in order to improve the measurement accuracy.

KEY WORDS: REFERENCE GAS CALORIMETER, ISOPERIBOLIC FLAME CALORIMETER, HEAT TRANSFER, RADIATION, COMBUSTION, ELECTRIC CALIBRATION, TRANSIENT 3D NUMERICAL SIMULATION.

1. Introduction

Le LNE développe un calorimètre de référence (fig. 1), pour déterminer le pouvoir calorifique supérieur (PCS) de tout type de gaz avec pour objectif une incertitude de $\pm 0,05 \%$.

Le pouvoir calorifique d'un combustible gazeux est égal à la quantité de chaleur dégagée par la combustion complète d'une unité de masse ou de volume du combustible, à pression atmosphérique et à température constante T . Si l'eau formée pendant la combustion à la température T est liquide, on parle de pouvoir calorifique supérieur (PCS) et si l'eau formée est à l'état gazeux à la température T , on parle de pouvoir calorifique inférieur (PCI).

Le gaz combustible, initialement dans un contenant, a une masse qui est déterminée avant et après la combustion par une balance spécialement adaptée à cet effet. La combustion se produit durant vingt minutes dans la chambre de combustion. Les gaz brûlés circulent dans un échangeur de chaleur et sortent du calorimètre pour analyse. Ces gaz élèvent la température de l'eau dans laquelle la chambre est plongée. C'est cette élévation de température que l'on mesure pour la détermination directe du PCS.

La température de l'eau dans l'enceinte extérieure est maintenue constante ce qui constitue le principe du calorimètre isopéribolique.

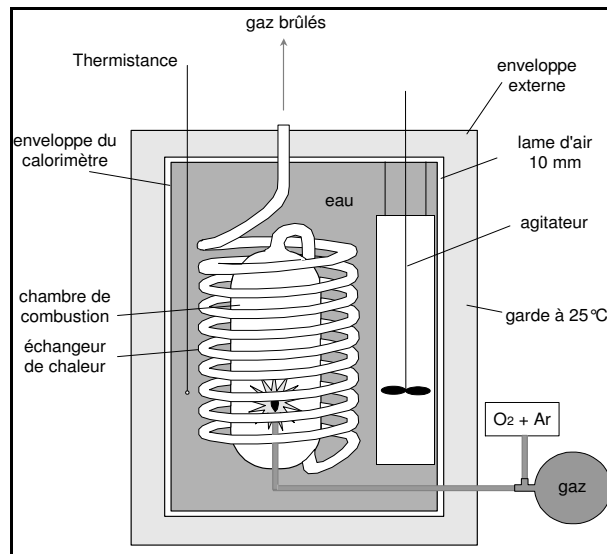


Fig. 1. – Schéma du calorimètre développé par le LNE.

L'étude menée par GDF-Suez, dans le cadre d'une action d'incitation 2003 [1], est intégrée dans le projet du LNE pour mieux maîtriser les sources d'incertitudes liées à l'inhomogénéité thermique du bain fluide du calorimètre de référence en développement. Pour ce faire, une analyse des écoulements dans le bain fluide du calorimètre ainsi que des transferts thermiques associés a été réalisée.

Cette étude s'articule en deux phases :

- La première correspond à une étude thermique globale du système (étude thermique simplifiée), pour estimer les transferts thermiques entre les différents composants du calorimètre [2] ;
- La deuxième correspond à une simulation numérique 3D du bain du calorimètre, dont les principales hypothèses auront été identifiées lors de la première phase [3].

Nous présentons ici la synthèse des résultats relatifs aux deux phases de cette étude.

2. Phase 1 : étude thermique simplifiée

Cette phase correspond à un inventaire des types de transferts thermiques dans le calorimètre, puis à leur estimation compte tenu des matériaux, des températures et des écoulements observés. L'analyse des transferts a trois finalités :

- évaluer le choix des matériaux ;
- préparer les simplifications de modélisation les plus judicieuses pour les simulations tri-dimensionnelles ;
- apporter des informations sur l'évolution temporelle du système.

2.1. Choix des matériaux

L'analyse montre d'abord que l'ensemble des matériaux initialement choisis est bien adapté à un transfert thermique maximal de la chambre de combustion vers l'eau du calorimètre, et à une minimisation des pertes thermiques vers l'extérieur, à savoir :

- le verre constitutif de la chambre de combustion et du serpentin d'évacuation des fumées permet un transfert radiatif direct de l'énergie libérée par la combustion vers l'eau du bain ;
- le dimensionnement du calorimètre assure une couche d'eau suffisante pour absorber dès le premier passage une grande partie de l'énergie rayonnée de la chambre de combustion ;
- les parois polies à faible émissivité du calorimètre permettent de rediriger le rayonnement résiduel vers l'eau du bain et donc d'en accroître l'absorption par cette eau. De plus, elle minimise les pertes thermiques vers l'extérieur ;
- l'air présent entre la paroi externe du calorimètre et la paroi intérieure de l'enveloppe externe (fig. 1) peut être considéré comme étant stagnant. Il joue correctement son rôle d'isolant. L'émissivité de la paroi externe du bain doit rester faible, par exemple en la polissant.

2.2. Modèle simplifié de simulation 3D

La complexité de la géométrie du calorimètre dicte la mise en oeuvre d'une simulation tridimensionnelle. Cependant, la présence d'éléments de petites dimensions, tels les tubes du serpentin, conduit à des maillages très

conséquents (plus de 4 millions de nœuds), et donc à des temps de calcul prohibitifs. Pour cette raison, il faut trouver un compromis entre la finesse de la description géométrique, la complexité des phénomènes physiques modélisés et la durée des calculs. L'étude simplifiée fournit les outils nécessaires pour choisir les hypothèses simplificatrices physiquement les plus pertinentes, afin de garder la meilleure représentativité de la simulation tridimensionnelle. Cette partie de l'étude simplifiée a été menée en parallèle avec la simulation 3D, et a abouti aux résultats suivants :

La prise en compte du rayonnement est nécessaire pour rendre compte de façon réaliste des transferts thermiques dans le calorimètre. L'analyse du comportement du verre et de l'eau peut toutefois amener à des simplifications pour la modélisation du rayonnement.

- En effet, le verre peut être considéré comme quasi-transparent jusqu'à une certaine valeur de température, puis complètement opaque ensuite. La paroi de la chambre de combustion a une épaisseur de 2,5 mm et les serpentins de 1 mm. Pour ces épaisseurs de verre Duran, le graphe de transmission du rayonnement peut, en première approximation, se réduire à deux plages : l'énergie issue d'un rayonnement d'équilibre à température T compris dans la bande spectrale $[0 \mu\text{m} ; 3,5 \mu\text{m}]$ est transmis à hauteur de 90 % de sa valeur. Tout rayonnement correspondant à une longueur d'onde supérieure à $3,5 \mu\text{m}$ est coupé. En considérant le verre comme un milieu gris et diffusant, on obtient les émissivités présentées dans le tableau 1 où ϵ est l'émissivité, a est l'absorption et τ est la transmission.

Tableau 1

Température (en K) vue par le verre	$\epsilon_{\text{Duran}} = a_{\text{Duran}} = 1 - \tau_{\text{Duran}}$
> 850	0,1
< 850	1

- De même, l'eau peut être assimilée à un milieu absorbant gris, moyennant l'évaluation de propriétés équivalentes. La figure 2 présente, en fonction de la température des produits de combustion, le pourcentage de l'énergie transmise *via* une épaisseur de verre Duran de 2 mm suivie d'une épaisseur d'eau de 6 cm (plus grande distance existante dans le calorimètre). Une partie du rayonnement est ainsi transmise à la paroi interne de l'enceinte du calorimètre. Il est donc recommandé de polir les parois internes du calorimètre ($\epsilon < 0,1$) pour réfléchir au maximum ce rayonnement vers l'eau de la cellule de référence, augmentant ainsi le trajet du rayonnement dans l'eau et donc son absorption.

La mise en équation du système montre une interaction forte entre les comportements, d'une part, des produits de combustion qui transitent dans la chambre de combustion puis dans le serpentin, et d'autre part, celui de l'eau. Les performances du code de calcul 3D et les ressources informatiques ne permettent pas d'envisager de simuler

l'ensemble du système « produits de combustion + eau » dans des temps raisonnables, à cause de la différence d'échelles géométriques (typiquement facteur de 1 à 300). L'étude étant ciblée sur le comportement du bain d'eau, ce dernier est la seule partie fluide du calorimètre à être simulée en conditions d'écoulement. Une analyse particulière est consacrée à la modélisation de la charge thermique représentant les produits de combustion, pour assurer une prise en compte réaliste.

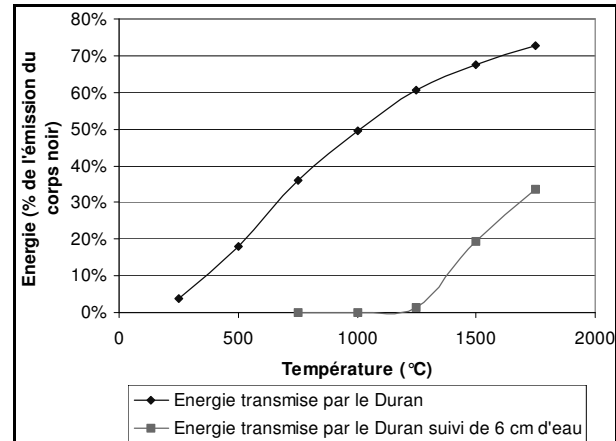


Fig. 2. – Estimation de la partie de l'énergie transmise à travers une paroi en verre Duran suivie d'une épaisseur d'eau de 6 cm en fonction de la température des produits de combustion.

Il est nécessaire de définir de façon la plus précise possible le débit (ou la vitesse) de re-circulation induit par l'agitateur de sorte notamment à statuer sur le régime d'écoulement (laminaire / turbulent) à mettre en œuvre dans la modélisation.

Enfin, on montre que l'air situé entre les deux enceintes du calorimètre peut être considéré comme stagnant. Les seuls phénomènes de transferts thermiques pris en compte dans cet air sont la conduction et le rayonnement.

2.3. Évolution temporelle du système

La troisième finalité, liée à l'évolution temporelle de la température du bain, se justifiait au début de l'étude, lorsque les possibilités du code de calcul 3D ne permettaient pas d'envisager une simulation 3D en régime transitoire. Cela étant devenu possible au cours de l'étude, l'effort a donc porté sur cette voie, plus riche en informations et plus proche des besoins réels.

3. Phase 2 : simulation numérique transitoire 3D du bain d'eau du calorimètre

Cette étude a pour but la connaissance de la distribution de température dans le bain thermostatique en fonction des choix de conception et des régimes de fonctionnement du calorimètre identifiés lors de la première étape et d'évaluer l'influence de l'environnement sur son isothermie et sa stabilité temporelle.

Comme le montre l'étude préalable [2], il existe une interaction forte entre le comportement des produits de combustion qui transitent dans la chambre de combustion et le serpentín et celui de l'eau. Ainsi, la détermination spatiale et temporelle du flux de chaleur issu de la chambre de combustion et du serpentín et transmis à l'eau et aux différents éléments du calorimètre est un problème très complexe.

Cependant, les capacités informatiques ne nous permettent pas encore de résoudre un tel problème dans des délais raisonnables, en simulant l'ensemble du calorimètre (bain d'eau, combustion dans la chambre de combustion, et produits de combustion dans le serpentín). Par ailleurs, nous n'avons pas actuellement d'éléments suffisants (expérimentaux ou numériques) pour estimer la proportion et la distribution de la puissance transmise par rayonnement à partir de la chambre de combustion.

3.1. Cas étudiés

Pour encadrer la situation réelle, deux cas extrêmes ont ainsi été envisagés, suivant la nature des transferts thermiques pris en compte.

3.1.1. Simulation correspondant à un étalonnage électrique avec une résistance chauffante

La même puissance que celle dissipée par combustion est imposée sous forme de flux uniforme de chaleur sur une partie de la surface de la chambre de combustion. Cette dernière est réduite aux dix centimètres du haut de la chambre de combustion. Cette zone est en effet en regard de la flamme et des produits de combustion chauds qui sont ensuite évacués dans le serpentín. Une étude réalisée par le GERG (Groupe Européen de Recherches Gazières) [4] indique que l'essentiel de la puissance est évacué à ce niveau de la chambre de combustion et que le serpentín, contrairement aux attentes, ne joue pas un rôle majeur dans l'échangeur que constitue le système. Le reste de la surface de la chambre de combustion ainsi que le serpentín sont considérés adiabatiques. L'eau du bain est alors considérée comme un milieu gris diffusant (coefficient d'absorption égal à 1 m^{-1}). Les parois internes du calorimètre sont considérées polies ($\varepsilon = 0,1$).

3.1.2. Simulation correspondant à une source radiative pure

La puissance transmise au calorimètre lors de la combustion est modélisée par une source radiative pure. Cela constitue une configuration académique afin d'étudier l'influence de la nature des transferts thermiques sur le comportement spatio-temporel du bain, notamment son homogénéité. L'eau du bain est alors considérée comme un milieu gris diffusant (coefficient d'absorption égal à 1 m^{-1}). La source radiative est imposée sur les dix centimètres du haut de la chambre de combustion, sous forme d'un flux radiatif surfacique distribué en fonction d'un profil de température évalué par ailleurs. Le reste du haut de la

chambre de combustion ainsi que le serpentín sont considérés adiabatiques. Les parois internes du calorimètre sont considérées polies ($\varepsilon = 0,1$).

3.2. Résultats de l'étude

Pendant cette étude, aucun résultat d'essai (avec ou sans combustion) n'était disponible au LNE pour une puissance correspondant à la combustion prévue, à savoir 61 W, et pour une température de garde correspondant au niveau requis (à savoir 300 K). Ainsi, aucune comparaison expérimentale n'a été réalisée avec les résultats de simulation.

En revanche, les résultats de simulation ont notamment pour objet d'aider le LNE à appréhender et à comprendre les différences de résultats expérimentaux entre les deux types de chauffage.

Nous avons simulé la période de pré-combustion. Il est donc nécessaire de définir un état initial à cette période, qui correspondrait à l'instant où le doigt de gant est retiré. Ainsi, un premier calcul est réalisé en régime permanent, à l'aide d'un puits de température matérialisé par l'imposition de la température égale à 295 K sur la partie basse la surface de la chambre de combustion. Comme il n'y a pas de combustion lors de ces phases, aucune source de puissance thermique liée au phénomène de combustion n'est simulée, seule la puissance thermique liée à l'agitation est représentée par une source volumique imposée sur l'ensemble du domaine fluide. La température de la surface externe de l'enceinte en contact avec la garde est imposée égale à la température de la garde, à savoir 300 K. Ce calcul permet d'une part d'établir l'écoulement fluide du bain, et d'autre part d'obtenir un niveau général de température cohérent avec les conditions réelles attendues.

Ce calcul sert à la définition des conditions initiales pour les simulations numériques transitoires (à $t = 0 \text{ s}$).

Pour les deux cas envisagés, la montée en température de l'eau du bain a pu être simulée pour l'ensemble des trois périodes (pré-combustion, combustion et post-combustion) soit 60 min de temps physique au total, pour trois semaines de temps calcul (fig. 3a et 3b). Les ordres de grandeur des évolutions des températures sont qualitativement semblables à ceux observés expérimentalement par le LNE et le GERG (même si les conditions opératoires ne permettent pas une comparaison qualitative).

Le rayonnement, tel qu'il est mis en œuvre dans cette modélisation (coefficient d'absorption uniforme), a une conséquence notamment en terme de maximum de température constaté dans le bain (fig. 3a et 3b). En effet, la température maximale s'écarte jusqu'à $8,5 \text{ }^\circ\text{C}$ de la valeur de la température moyenne dans le cas sans combustion, alors qu'on constate un écart maximal de $1,2 \text{ }^\circ\text{C}$ par rapport à la température moyenne pour une source radiative pure. En revanche, le rayonnement dans ce dernier cas n'a pas d'incidence notable sur l'évolution temporelle de la température moyenne de l'eau. La simulation avec source radiative pure permet de confirmer

le bon dimensionnement du calorimètre, avec notamment une épaisseur d'eau suffisante pour absorber le rayonnement issu de la chambre de combustion, ainsi qu'une émissivité de la paroi interne suffisamment basse pour réduire le rayonnement résiduel.

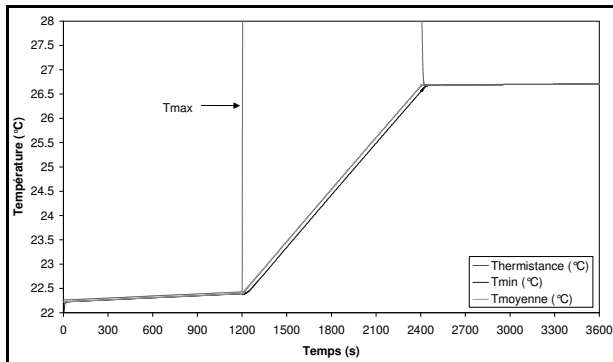


Fig. 3a. – Montée en température de l'eau du bain dans le cas sans combustion, avec résistance chauffante.

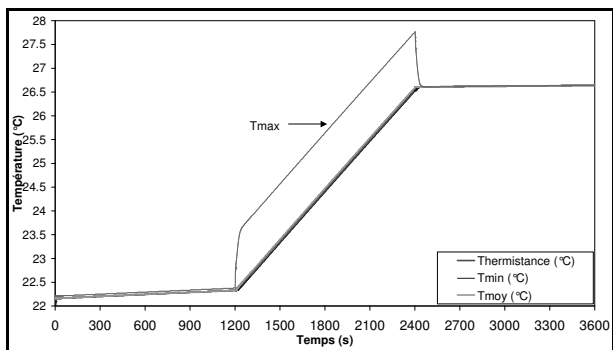


Fig. 3b. – Montée en température de l'eau du bain dans le cas d'une source radiative pure.

On a vérifié, dans les deux cas, que tout au long des 20 min de la période dite de combustion, le point représentatif de l'emplacement de la thermistance (croix sur les figures 4a et 4b) est en dehors des zones s'écartant de plus de 0,05 K de la température moyenne du bain. L'emplacement de la thermistance, choisi par le LNE, permet d'accéder à un niveau de température représentatif de la température moyenne du bain d'eau du calorimètre. Ainsi, *a priori*, il ne sera pas nécessaire de reconsidérer cet emplacement.

La structure de l'écoulement, avec une vitesse de recirculation de l'eau de $30 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$, induit un régime d'écoulement turbulent permettant un brassage intense de l'eau du bain (fig. 5). Comme conséquence, on constate une faible dispersion en température. Cette dispersion est encore diminuée par l'existence des transferts radiatifs qui favorisent également l'homogénéisation.

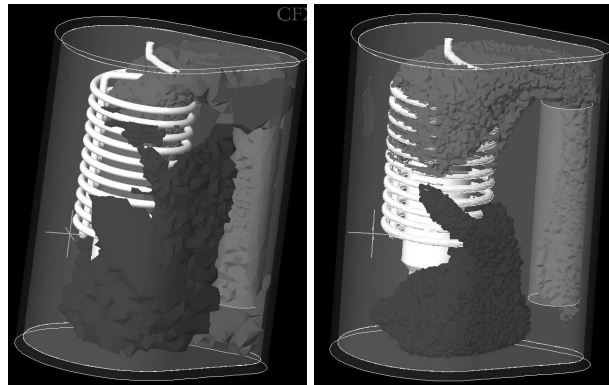


Figure 4a

Figure 4b

Fig. 4a. – Répartition à $t = 2400 \text{ s}$ des zones plus chaudes (claires) et plus froides (foncées) de 0,05 K que la température moyenne du bain dans le cas du chauffage par résistance électrique ; Fig. 4b. – *idem* fig. 4a mais pour un chauffage radiatif pur ; la croix indique l'emplacement de la thermistance.

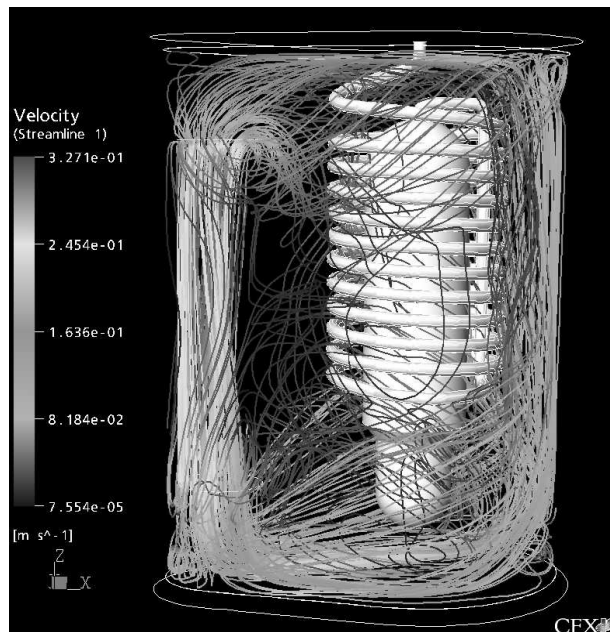


Fig. 5. – Structure de l'écoulement.

4. Conclusions et perspectives

GDF-Suez a réalisé des simulations numériques 3D de l'écoulement de l'eau d'un calorimètre de référence pour les gaz, actuellement en développement au Laboratoire national de métrologie et d'essais (LNE). Ces travaux ont permis d'évaluer l'efficacité du transfert thermique entre la chambre de combustion et le bain du calorimètre et le niveau d'isolation thermique de l'enceinte du calorimètre vers l'extérieur. L'analyse porte en particulier sur l'influence des transferts radiatifs, en comparant une source radiative pure (idéalisant la combustion) à la configuration d'étalonnage représentée par un flux uniforme imposé à la surface de la chambre de combustion. Pour les deux cas envisagés, la montée en température de l'eau du bain a pu être simulée pour l'ensemble des trois périodes (pré-combustion,

combustion et post-combustion) soit 60 min de temps physique au total. La simulation avec source radiative pure permet de confirmer le bon dimensionnement du calorimètre, avec notamment une épaisseur d'eau suffisante pour absorber le rayonnement issu de la chambre de combustion, ainsi qu'une émissivité de la paroi interne suffisamment basse pour réduire le rayonnement résiduel. L'emplacement de la thermistance choisi par le LNE permet d'accéder à un niveau de température représentatif de la température moyenne du bain d'eau du calorimètre pendant les trois phases. On constate une faible dispersion en température due au régime d'écoulement turbulent induit par la vitesse de recirculation de l'eau de $30 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$. Cette dispersion est encore diminuée par l'existence des transferts radiatifs qui favorisent également l'homogénéisation.

Il serait désormais souhaitable de faire une simulation plus réaliste de la configuration avec mesure expérimentale en combustion, nécessaire pour pouvoir comparer l'évolution des températures dans les deux configurations réelles (étalonnage électrique et combustion). La possibilité d'établir cette similitude par la

simulation, en identifiant l'influence des différents éléments perturbateurs, est une voie qui conforterait significativement la mise au point du calorimètre.

Références

- [1] Contrat BNM n° 03 3 008 du 16/12/2003 entre le BNM-LNE et Gaz de France.
- [2] VILLERMAUX C. et ZAREA M., « Optimisation de la géométrie d'un calorimètre pour la métrologie des gaz – Etude thermique simplifiée », *Rapport interne Gaz de France*, M.DU.IND.2005.0105.CVi-KT, 2005.
- [3] VILLERMAUX C. et ZAREA M., 2005, « Calorimètre de référence – Simulation numérique de l'évolution de la température du bain », *Rapport interne Gaz de France*, M.DU.IND.2005.0129.CVi-KT, 2005.
- [4] JÄSCHKE M., FORSTER R., SCHMÜCKER A., PRAMANN A., ULBIG P., HALOUA F., HAY B., LESANT V., LOUBAT S., LAGUERRE D., BENITO A. et CREMONESI P., "GERG Project: Development of a reference Calorimeter", IGRC 2004, Vancouver, Canada.

Article reçu le 14 février 2008 ; version révisée reçue le 7 janvier 2009.