
BUREAU D'ÉTUDES :

CONCEPTION D'UN RÉACTEUR CHIMIQUE

MÉTHODES NUMÉRIQUES : VOLUMES FINIS

QUENTIN BERGÉ
ADRIEN AUTELLET
*ENSEEIH*T



JUIN 2019

Table des matières

1	Introduction	2
2	Description du Problème	2
3	Pré-Processeur	3
3.1	Lecture d'un Fichier d'Entrée	3
3.2	le Maillage	3
3.3	Champ des Vitesses	4
3.4	Calcul du Pas de Temps	5
3.5	Para View	6
4	Discretisation	6
4.1	Calcul des Flux	6
4.1.1	Flux Advectifs	7
4.1.2	Flux Diffusifs	7
4.2	Conditions Limites	7
4.2.1	Températures	7
4.2.2	Flux	8
5	Noyau du Calcul	8
6	Validation	9
7	Exploitation	9
8	Conclusion	9

1 Introduction

L'objectif de ce bureau d'études est d'étudier la cinétique chimique lors de l'injection de deux réactifs au sein d'un réacteur chimique. Cette cinétique étant fortement influencée par la température, on se propose d'étudier le phénomène d'advection-diffusion de cette dernière par la méthode des volumes finis.

2 Description du Problème

Selon la configuration schématisée dans la figure ci-dessous, les deux réactifs sont injectés face-à-face. Puisque la diffusivité thermique des réactifs est très grande, l'efficacité de l'échangeur est dictée par la cinétique de la réaction qui est très influencée par la température. Cela revient donc à étudier le champ de température sur toute la taille du réacteur mais surtout dans la zone centrale. C'est pour cela que nous analyserons le phénomène d'advection-diffusion de la température par la méthode des volumes finis.

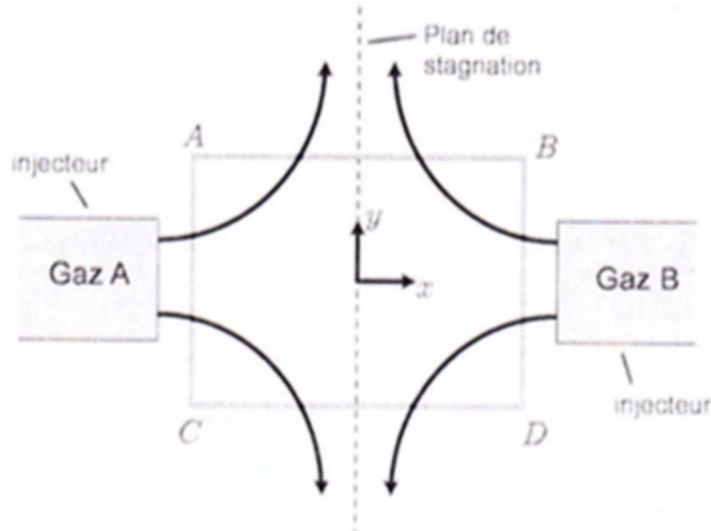


FIGURE 1 – Schéma du système d'injection dans le réacteur chimique

Selon le cahier des charges, nous devons respecter certaines spécifications :

- Maillage irrégulier en x et y
- Schéma amont pour le terme advectif
- Schéma centré pour le terme diffusif
- Intégration temporelle par la méthode d'Euler explicite
- Conditions de Dirichlet avec température gaussienne sur les frontières AC et BD
- Conditions de Neumann avec Interpolation des flux diffusifs à partir des flux connus à l'intérieur du domaine

L'équation de transport des températures s'écrit alors :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{U} T) - \nabla \cdot (\alpha \vec{\nabla} T) = 0 \quad (1)$$

3 Pré-Processeur

3.1 Lecture d'un Fichier d'Entrée

Le fichier d'entrée est disposé dans le dossier RUN et donne accès à certaines variables que l'on peut changer comme des Données Numériques :

- temps final
- nombre de points en x N_x
- nombre de points en y N_y
- et comme Données Physiques :
- la longueur du domaine L
- la vitesse caractéristique des gaz A
- les coefficients de diffusivité thermiques α_a et α_b

Ce fichier d'entrée est lu à l'aide de la subroutine `read_data`

3.2 le Maillage

Etant donné que nous travaillons avec un code 2D il nous faut mailler le réacteur selon le schéma suivant. Et puisque la subroutine de transformation de VTS vers Paraview nous fait utiliser des tableaux de taille (N_x, N_y) , nous avons choisit cette structure pour tous nos tableaux.

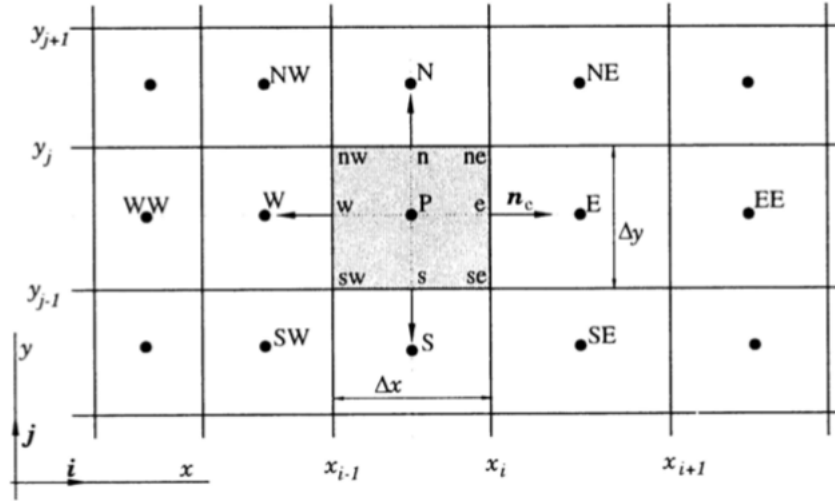


FIGURE 2 – Exemple d'un maillage 2D SOURCE A METTRE Poly Alexei Stoukov

Pour ceci nous allons donc utiliser plusieurs tableaux, pour chaque maillage il y aura un tableau pour x et un selon y dépendant de (i, j) conformément au schéma ci-dessus.

Nous définissons alors 4 maillages différents :

- pour les noeuds `xnoeuds` , `ynoeuds`
- pour les centres des volumes `xcentre_vol`, `ycentre_col`
- pour les faces horizontales `xcentre_faces_horiz`, `ycentre_faces_horiz`
- pour les faces verticales `xcentre_faces_vertic`, `ycentre_faces_vertic`

On effectue d'abord le maillage sur les noeuds et les centres des volumes, puis on peut composer les faces horizontales et verticales avec ceux-ci. Tous ces tableaux sont de tailles différentes puisqu'il y a $N_x \times N_y$ noeuds mais $(N_x - 1) \times (N_y - 1)$ centres. C'est pourquoi il faudra faire attention à la taille des tableaux quand on les allouera. Ces tableaux sont en allocations dynamiques, on alloue uniquement la mémoire qui sera nécessaire aux tableaux afin de ne pas trop en consommer en accord avec les données du fichier d'entrée.

Etant donné qu'on lit sur le fichier d'entrée N_x, N_y , on va calculer les pas dx et dy

$$d_{x,y} = \frac{L}{N_{x,y} - 1}$$

De cette façon on a pu obtenir un maillage régulier visualisé comme ceci avec ParaView.

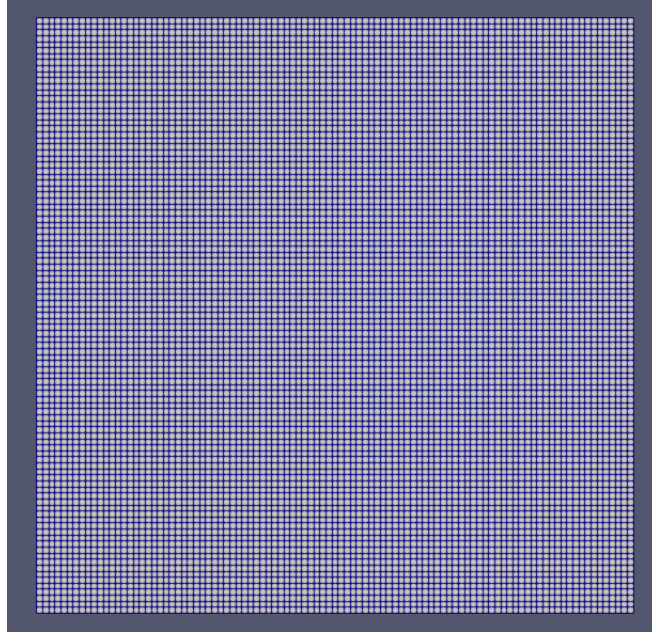


FIGURE 3 – Maillage (100,100) visualisé sur Paraview

Ce maillage est réalisé à l'aide de la subroutine `maillage`

3.3 Champ des Vitesses

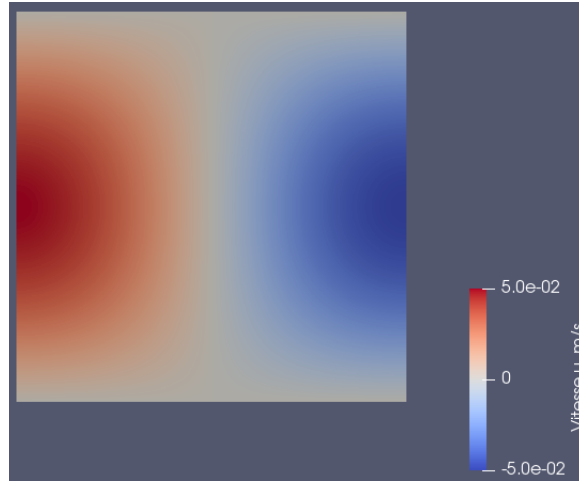
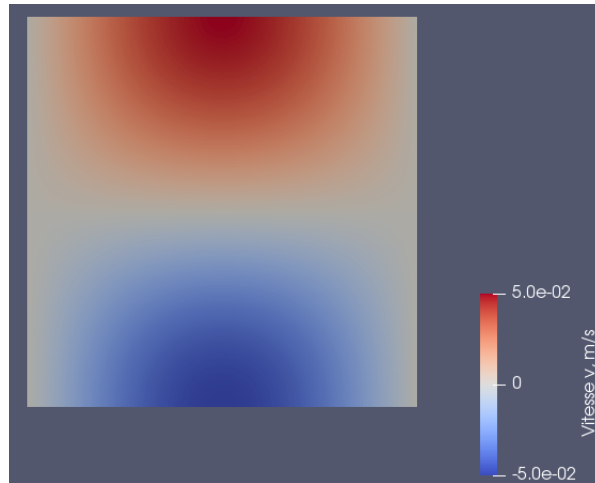
On a ensuite pu calculer le champ des vitesses aux centres des volumes selon

$$\begin{cases} u = A \cos\left(\pi\left(\frac{x}{L} - \frac{1}{2}\right)\right) \sin\left(\pi\left(\frac{y}{L} - \frac{1}{2}\right)\right) \\ v = -A \sin\left(\pi\left(\frac{x}{L} - \frac{1}{2}\right)\right) \cos\left(\pi\left(\frac{y}{L} - \frac{1}{2}\right)\right) \end{cases}$$

A paramètre caractéristique de la vitesse maximale du gaz, ici choisi à 0,05 m/s .

Voici ce qu'on obtient en le modélisant sur ParaView, on observe bien la symétrie des deux profils de vitesse.

Ce calcul du champ des vitesses est réalisé à l'aide de la subroutine `champ_vitesse`

FIGURE 4 – Champ des vitesses sur u pour un maillage (100,100)FIGURE 5 – Champ des vitesses sur v pour un maillage (100,100)

3.4 Calcul du Pas de Temps

Les calculs utilisant la formulation Volumes Finis nécessitent de calculer le pas de temps, étant donné que ce pas de temps dt donne une condition de stabilité sur ce modèle. On le calcul de cette façon :

$$dt = \left\{ \frac{|u_{min}|}{d_x \times CFL} + \frac{|v_{min}|}{d_y \times CFL} + \frac{\alpha}{r} \left(\frac{1}{d_x^2} + \frac{1}{d_y^2} \right) \right\}^{-1}$$

CFL est le nombre de courant, pris égal à 1

r est le nombre de Fourier, pris égal à 0.5

α est le coefficient de diffusivité thermique qui est en réalité α_{moyen} que nous définissons comme $(\alpha_a + \alpha_b)/2$

En pratique on utilisera directement les fonctions intrinsèques présentes dans Fortran **ABS** et **MINVAL** qui nous donneront la valeur absolue minimale du tableaux u et v . CFL, r, α_a et α_b sont modifiables dans le fichier d'entrée.

3.5 Para View

Para View est un logiciel libre de visualisation de données. Il nous permet à l'aide de la subroutine fournie **VTSWriter** en fournissant certains arguments d'afficher nos résultats dans un format lisible par ce logiciel.

4 Discrétisation

Si on se restreint à un seul volume du maillage on peut représenter les flux comme ceci :

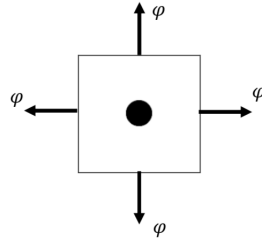


FIGURE 6 – Schématisation des flux sur un volume du maillage

Il s'agit donc d'un calcul qui s'effectue à chaque centre des faces et non au centre des volumes comme c'est couramment le cas pour les températures et les vitesses.

4.1 Calcul des Flux

Les flux advectifs et diffusifs dans le réacteur chimique se sont définis comme ceci :

$$\begin{cases} \phi_{adv} = \vec{u} \times \rho C_p T \\ \phi_{diff} = -\alpha \vec{\nabla} T \end{cases}$$

En intégrant alors l'équation 1, on obtient :

$$\frac{d}{dt}(Volume_{i,j} T_{i,j}) = \int \vec{U} T \cdot \vec{n} dS + \int (\alpha \nabla T) \cdot \vec{n} dS$$

Cette intégrale laisse apparaître alors une distinction selon les sens des normales donc le sens de parcours de notre maillage pour les flux advectifs mais aussi pour les flux diffusifs. On va donc renommer les flux selon leur directions avec haut, bas, gauche et droite.

On obtient alors comme équation générale :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(Volume_{i,j}T_{i,j}) &= \phi_{adv,haut,i,j}dx + \phi_{adv,bas,i,j}dx + \phi_{adv,gauche,i,j}dy \\ &+ \phi_{adv,droite,i,j}dy + \phi_{diff,haut,i,j}dx + \phi_{diff,bas,i,j}dx \\ &+ \phi_{diff,gauche,i,j}dy + \phi_{diff,droite,i,j}dy \end{aligned}$$

4.1.1 Flux Advectifs

En notant que :

$$\begin{cases} \phi_{adv,haut,i,j} = -\phi_{adv,bas,i,j+1} \\ \phi_{adv,gauche,i,j} = -\phi_{adv,droite,i,j+1} \end{cases}$$

On va alors distinguer uniquement les deux flux advectifs $\phi_{adv,x}$ et $\phi_{adv,y}$.
On obtient alors pour $\phi_{adv,x}$:

$$\begin{cases} U_{i,j}T_{i,j} \text{ si } U_{i,j} \cdot \vec{n} \geq 0 \\ U_{i+1,j}T_{i+1,j} \text{ si } U_{i,j} \cdot \vec{n} \leq 0 \end{cases}$$

De même pour $\phi_{adv,y}$:

$$\begin{cases} U_{i,j}T_{i,j} \text{ si } U_{i,j} \cdot \vec{n} \geq 0 \\ U_{i,j+1}T_{i,j+1} \text{ si } U_{i,j} \cdot \vec{n} \leq 0 \end{cases}$$

4.1.2 Flux Diffusifs

A l'instar des flux advectifs, on obtient des résultats identiques sur les flux diffusifs, seuls l'expression change :

$$\begin{cases} \phi_{diff,x,i,j} \\ \phi_{diff,y,i,j} \end{cases} \equiv \begin{cases} \alpha \frac{dT}{dx} = \alpha \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{X_{i+1,j} - X_{i,j}} \\ \alpha \frac{dT}{dy} = \alpha \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{Y_{i,j+1} - Y_{i,j}} \end{cases}$$

4.2 Conditions Limites

Les calculs décrits jusqu'à présent étaient définis sur tout le centre du réacteur chimique, maintenant nous allons nous attarder sur les extrémités en prenant en comptes les conditions limites pour le calcul des flux advectifs et diffusifs mais aussi pour les températures.

4.2.1 Températures

Les températures aux extrémités droites et gauches du réacteur notées respectivement T_{faceAC} et T_{faceBD} sont définies selon un profil gaussien :

$$\begin{cases} T_A(y) = (T_A - T_0) \frac{-y^2}{2\sigma_A^2} + T_0 \\ T_B(y) = (T_B - T_0) \frac{-y^2}{2\sigma_B^2} + T_0 \end{cases}$$

σ_A et σ_B correspondent à $\frac{L}{20}$ et T_A, T_B et T_0 sont modifiables dans le fichier d'entrée du programme.

Ces températures interviennent ensuite dans le calcul des flux aux extrémités de notre maillage.

4.2.2 Flux

Les deux flux ont en commun d'avoir les mêmes conditions limites pour les extrémités hautes et basses. En réalité l'énoncé indique une interpolation des flux diffusifs à partir des flux connus à l'intérieur du domaine.

On va appliquer cette hypothèse pour les deux flux ainsi,

$$\begin{cases} \phi_{adv,i,npty} = \phi_{adv,i,npty-1} \\ \phi_{adv,i,1} = \phi_{adv,i,2} \\ \phi_{diff,i,npty} = \phi_{diff,i,npty-1} \\ \phi_{diff,i,1} = \phi_{diff,i,2} \end{cases}$$

Advection Pour les flux advectifs, nous définissons les flux aux points sur l'extrémité gauche comme étant le produit de la température du profil gaussien et de la vitesse au point :

$$\phi_{adv,1,j} = U_{1,j} T_{A,j}$$

En ce qui concerne l'extrémité droite, nous considérons qu'il s'agit d'un flux sortant, c'est pourquoi nous calculons sa valeur à l'aide des vitesses et températures aux points précédents.

$$\phi_{adv,nptx,j} = U_{nptx-1,j} T_{nptx-1,j}$$

On se demande si en réalité on ne pourrais pas utiliser directement le fait que le flux de droite ne viendrait pas de la température du profil gaussien en face BD et de la vitesse au point.

Diffusion Pour les flux diffusifs, les deux extrémités prennent en compte les profils de température T_A et T_B .

$$\begin{cases} \phi_{diff,1,j} = -\alpha \frac{T_A - T(1,j)}{dx/2} dy \\ \phi_{diff,Nptx,j} = -\alpha \frac{T(nptx-1,j) - T_B}{dx/2} dy \end{cases}$$

Ce cas-ci sera pour le maillage uniforme. Si on envisage un maillage non-uniforme on remplacera dx et dy par la différence $x(i) - x(i-1)$ de même pour y .

5 Noyau du Calcul

Le calcul en lui même va s'articuler autour de l'algorithme suivant :

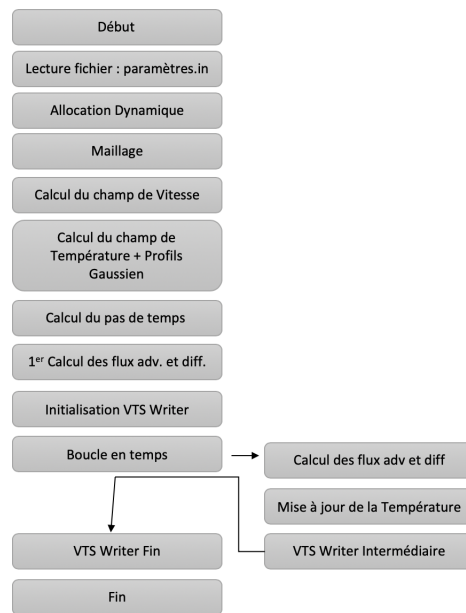


FIGURE 7 – Algorithme du calcul

6 Validation

7 Exploitation

8 Conclusion