

---

---

BUREAU D'ÉTUDES :

CONCEPTION D'UN RÉACTEUR CHIMIQUE

---

---

MÉTHODES NUMÉRIQUES : VOLUMES FINIS

QUENTIN BERGÉ  
ADRIEN AUTELLET  
*ENSEEIH*T GROUPE 1



JUIN 2019

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Description du Problème</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Pré-Processeur</b>	<b>3</b>
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 . . . . .	5
<b>4</b>	<b>Discretisation</b>	<b>5</b>
4.1	Calcul des Flux . . . . .	5
4.1.1	Flux Advectifs . . . . .	6
4.1.2	Flux Diffusifs . . . . .	6
4.2	Conditions Limites . . . . .	6
4.2.1	Températures . . . . .	7
4.2.2	Flux . . . . .	7
<b>5</b>	<b>Noyau du Calcul</b>	<b>8</b>
5.1	Mise à jour de la température . . . . .	8
<b>6</b>	<b>Validation</b>	<b>9</b>
6.1	Construction du Champ des Vitesses . . . . .	9
6.2	Advection Pure 1D . . . . .	9
6.3	Advection 2D . . . . .	10
6.4	Diffusion . . . . .	11
<b>7</b>	<b>Exploitation</b>	<b>11</b>
<b>8</b>	<b>Conclusion</b>	<b>12</b>

## 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.

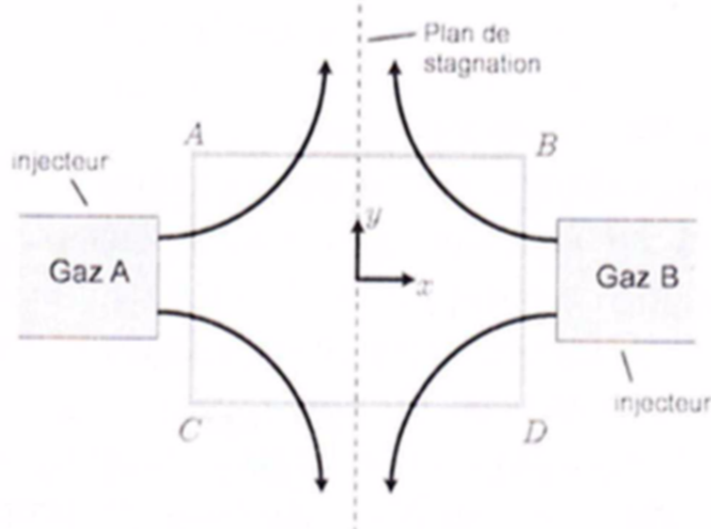


FIGURE 1 – Schéma du système d'injection dans le réacteur chimique

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  $\alpha_a$  et  $\alpha_b$

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.

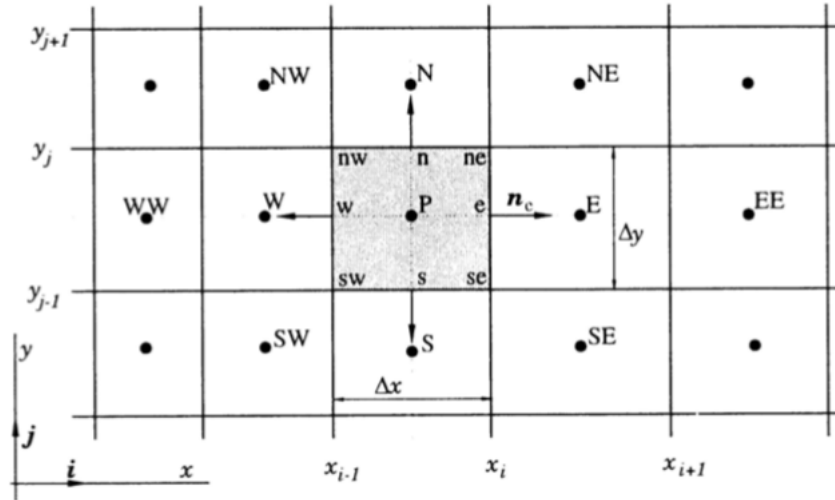


FIGURE 2 – Exemple d'un maillage 2D

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.

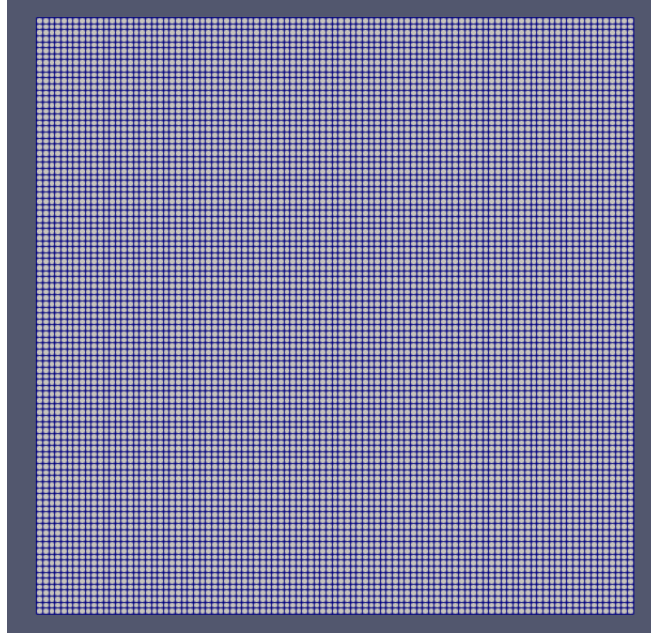


FIGURE 3 – Maillage (100,100) visualisé sur Paraview

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  $m/s$ .

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

### 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

$\alpha$  est le coefficient de diffusivité thermique qui est en réalité  $\alpha_{moyen}$  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  $v$ .  $CFL, r, \alpha_a$  et  $\alpha_b$  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 :

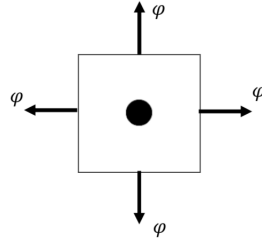


FIGURE 4 – Schématisation des flux sur un volume du maillage

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 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 :

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

Cette intégrale laisse apparaître une distinction selon les sens des normales qui influence le sens de parcours du maillage pour les flux advectifs mais aussi pour les flux diffusifs. On va 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  $\phi_{adv,x}$  :

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

De même pour  $\phi_{adv,y}$  :

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

#### 4.1.2 Flux Diffusifs

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

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

$\sigma_A$  et  $\sigma_B$  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 :

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

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.

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

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

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

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 :

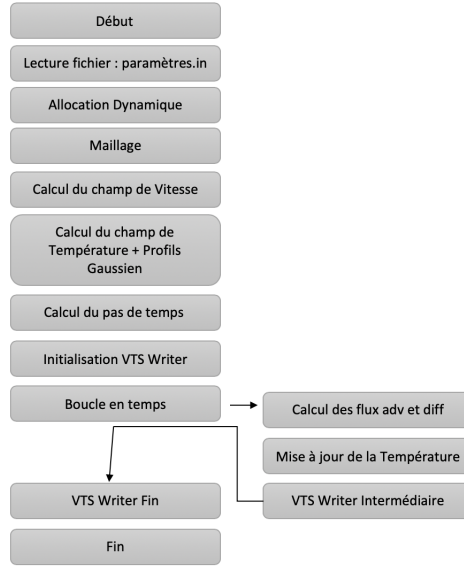


FIGURE 5 – Algorithme du calcul

### 5.1 Mise à jour de la température

Le coeur du calcul va être de mettre à jour la température à l'instant  $n + 1$  à partir de la température au temps  $n$ .

$$T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{dx \times dy} \times (\phi_{adv,y,(i,j)} - \phi_{adv,y,(i,j+1)} + \phi_{adv,x,(i,j)} - \phi_{adv,x,(i,j+1)} - \phi_{diff,y,(i,j)} + \phi_{diff,y,(i,j+1)} + \phi_{diff,x,(i,j)} - \phi_{diff,x,(i,j+1)})$$

## 6 Validation

### 6.1 Construction du Champ des Vitesses

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

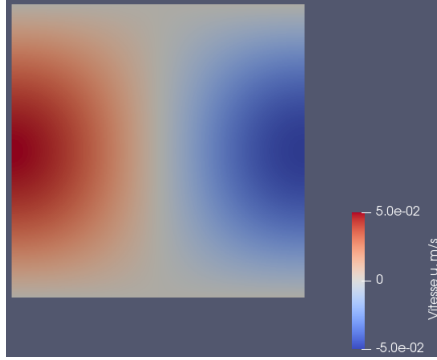


FIGURE 6 – Champ des vitesses sur  $u$  pour un maillage (100,100)

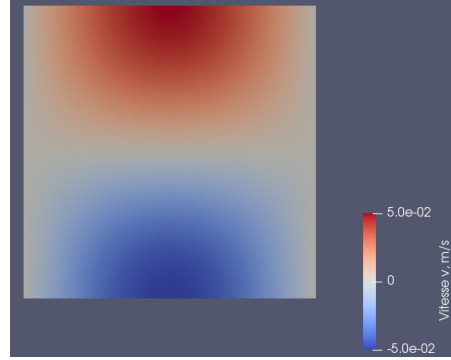


FIGURE 7 – Champ des vitesses sur  $v$  pour un maillage (100,100)

### 6.2 Advection Pure 1D

En fixant  $u$  alternativement positive et négative et  $v$  nulle et en prenant une température constante en entrée, on observe bien le phénomène d'advection pure.

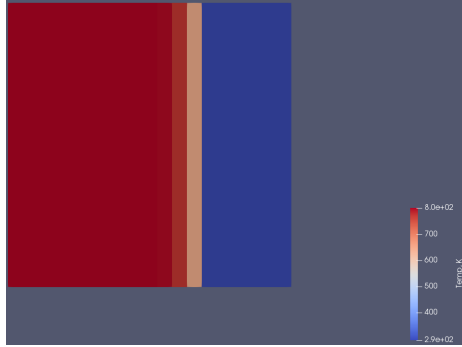


FIGURE 8 – Température pour  $u$  positive (20,20)

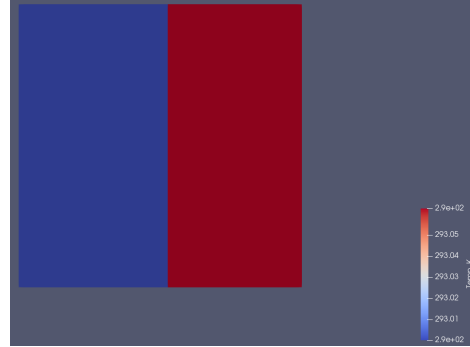


FIGURE 9 – Température pour  $u$  négative (51,51)

Sur l'advection gauche on peut voir que le coefficient de diffusivité thermique n'est pas pris égal à 0. On observe bien pour différents  $t$  que le profil de température avance à une vitesse régulière.

### 6.3 Advection 2D

En rétablissant alors le profil des vitesses avec la formule citée plus haut et en laissant une température constante en entrée on a alors :

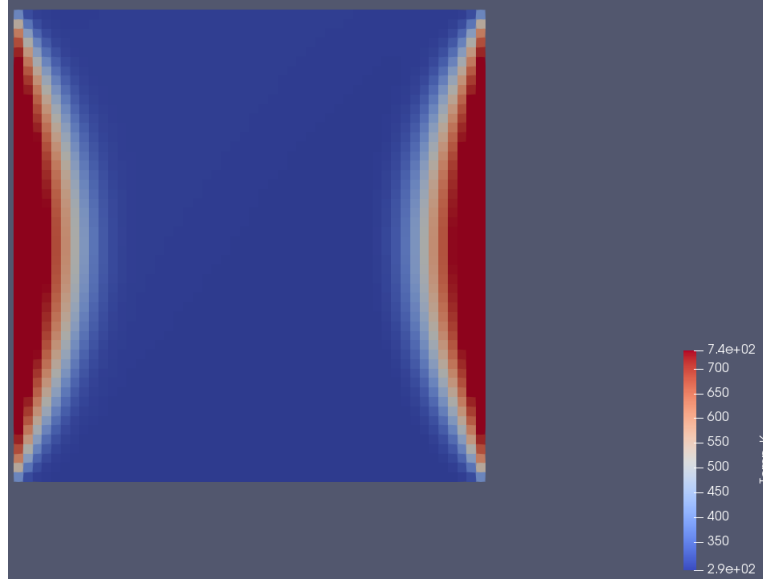


FIGURE 10 – Température stable en entrée et  $u$  et  $v$  issues de 3.3 sur maillage (51,51)

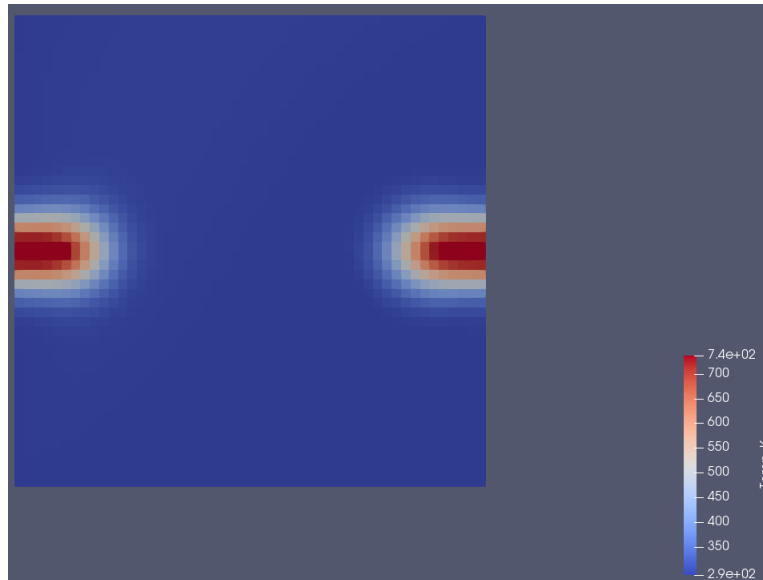


FIGURE 11 – Température gaussienne en entrée et  $u$  et  $v$  issues de 3.3 sur maillage (51,51)

### 6.4 Diffusion

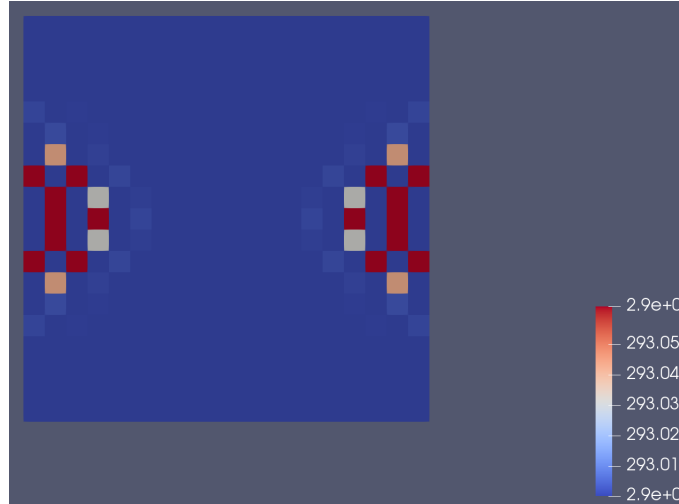


FIGURE 12 – Diffusion qui saute un rang

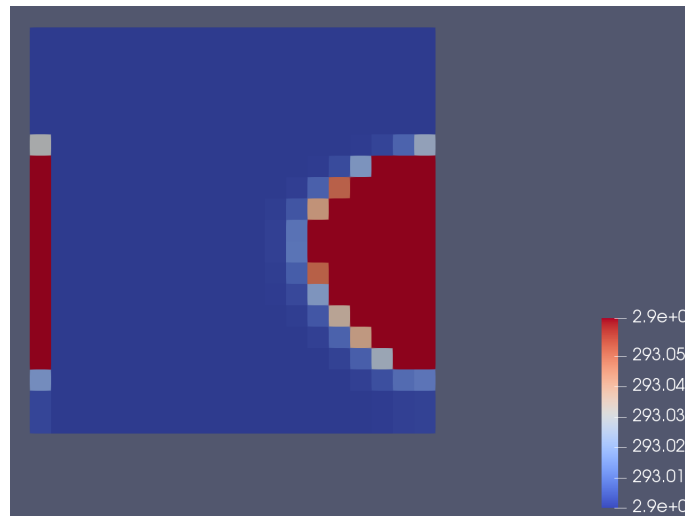


FIGURE 13 – Diffusion qui est valide uniquement à droite

Les résultats que nous obtenons pour le moment sont encourageants, il y sans doute un problème sur les conditions limites que nous avons imposés à gauche, pourtant elles semblent correctes.

## 7 Exploitation

On considère déjà dans ce cas là  $\alpha_A \neq \alpha_B$  en saisissant dans ces deux paramètres dans le fichier d'entrée.

## 8 Conclusion

Au travers de ce projet on a pu mettre en oeuvre la méthode des volumes finis appliqué à un cas physique qu'est le réacteur chimique. La principale problématique de ce projet à été de traduire numériquement les équations d'advection/diffusion. Nous sommes parvenus à achever l'advection 2D, néanmoins nous n'avons pas réussi à achever la diffusion bien que les résultats obtenus fut encourageant.