

INSTITUT
FRANÇAIS DU
FROID
INDUSTRIEL

INTRODUCTION A
LA SIMULATION
NUMERIQUE

L'objectif lié à la simulation numérique est multiple. Elle permet entre autre :

- de comprendre les phénomènes mis en jeu,
- d'aider au dimensionnement,
- d'aider au choix technologique, économique, énergétique...,
- d'explorer des champs d'investigation que rendrait une approche expérimentale trop longue et coûteuse.

Par rapport à une méthode de résolution traditionnelle (analytique), la simulation numérique est généralement plus rapide et quasiment sans limites quant à la complexité du problème.

Les termes souvent utilisés lors de la mise en œuvre de tels outils sont les suivants :

Modélisation : transformation d'un ou de plusieurs phénomènes physiques, couplés ou indépendants, en expressions (modèles) sensées les représenter. C'est la mise en équation mathématique (généralement différentielle ou aux dérivées partielles) des processus. Elle s'accompagne d'hypothèses, de conditions aux limites (espace) et de conditions initiales (temps).

Discrétisation numérique : Dans la mesure où le choix de la résolution se porte sur une approche numérique, la représentation du ou des phénomènes n'est donc pas continue mais discrète. En d'autres termes, la résolution des équations ne pourra se faire que pour des valeurs définies initialement. Par exemple pour des valeurs de temps et/ou d'espace données. L'écriture du (des) modèle(s) pour chacune de ces valeurs s'appelle la discrétisation.

Résolution numérique et simulation : Pour résoudre ces équations, plusieurs méthodes existent et donnent des résultats plus ou moins fiables et plus ou moins rapides selon la nature du problème. Enfin, l'obtention des résultats est ensuite traitée (généralement graphiquement), pour analyse physique de la réponse au problème posé.

Validation : L'un des avantages du calcul numérique est qu'il donne toujours des résultats. L'un des inconvenients du calcul numérique est qu'il donne toujours des résultats. Aussi, doit-on analyser de façon très critique ce que donne la simulation :

- Ai-je pris les bonnes équations (modèles) au départ ?
- Suis-je dans les bonnes hypothèses dans lesquelles ces équations sont valides ?
- Ai-je pris en compte tous les processus qui interagissent dans mon problème ?
- Ai-je bien choisi la méthode de discrétisation ?
- Ai-je bien choisi la méthode de résolution ?

Sans compter sur les erreurs d'écriture du programme de calcul ayant permis la résolution.

Il est donc nécessaire de confronter ces résultats avec des étalons pour s'assurer de la validité de son travail. Cette confrontation peut être faite, soit par rapport à un autre modèle, dont la validité n'a pas été mise en défaut, soit par rapport à un montage expérimental, où est réalisé le problème posé et munis de suffisamment de points de mesure pour assurer une comparaison objective.

Néanmoins, si cette comparaison conduit à des écarts acceptables, la simulation effectuée n'en reste pas moins relative à un cas particulier donné initialement. Le modèle ne sera complètement validé que lorsqu'il aura été confronté avec succès avec un nombre suffisant d'étalons.

Dès lors, l'outil créé peut alors servir les objectifs pour lesquels il a été conçu.

Etude de sensibilité paramétrique : le modèle validé peut devenir un outil d'investigation, d'aide au choix... Cette opération consiste à répondre à la question : Que seraient les résultats si au lieu de la valeur X, j'avais Y pour tel paramètre (masse, surface, pression, température) du modèle ?

En conclusion, on part de la physique pour aboutir à la physique, l'association modélisation/discrétisation/résolution ne représentant que l'outil permettant de répondre au problème posé.

Séance n°1

Etude de la répartition axiale des températures dans un échangeur à tubes co-axiaux. Cas de l'échangeur co-courant faisant intervenir deux fluides sans changement de phase en régime permanent.

Hypothèses :

- les variables (températures de fluide) sont principalement dépendantes de leurs positions axiales : pas de variation avec l'angle, ni avec le rayon,
- Les variations de pression sont négligées,
- les variations d'énergie cinétiques et potentielles sont négligées,
- Les capacités calorifiques des deux fluides sont constantes au cours de la transformation,
- Les échanges thermiques ne sont que d'origine convective,
- Les coefficients d'échange convectif sont constants,
- L'échange conductif au sein de la paroi est négligé,
- L'échangeur est isolé thermiquement de l'extérieur.

MODELISATION

La représentation de l'échangeur est la suivante :

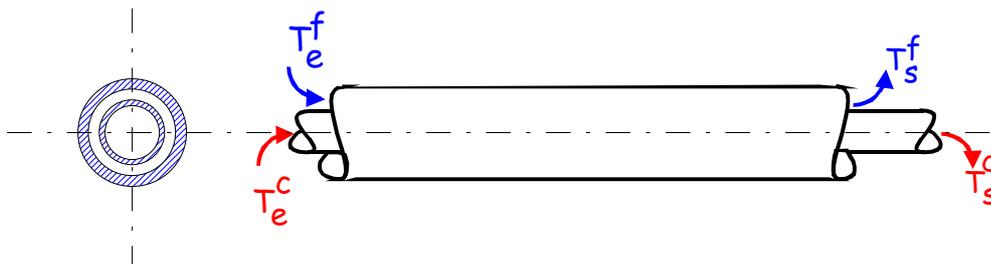


Figure 1 : Représentation schématique de l'échangeur.

L'espace (position axiale) est discrétisé en éléments infinitésimaux de longueur dx . On suppose ensuite que les volumes engendrés par ces éléments sont suffisamment petits pour que la température des deux fluides y soit constante.

Sa représentation est la suivante :

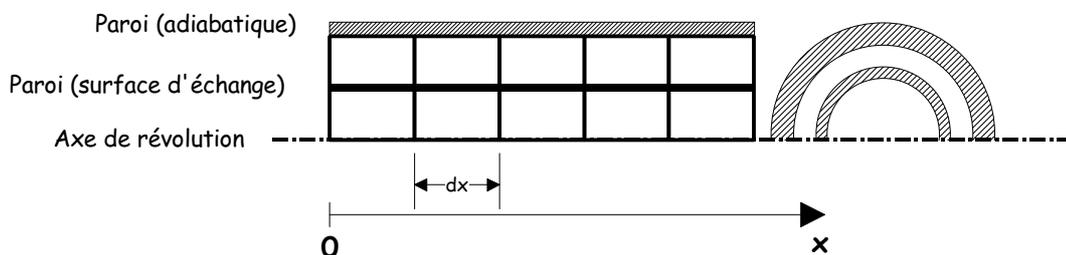


Figure 2 : Séparation de l'échangeur en éléments de volume

La représentation schématique des échanges au sein d'une tranche d'échangeur est la suivante :

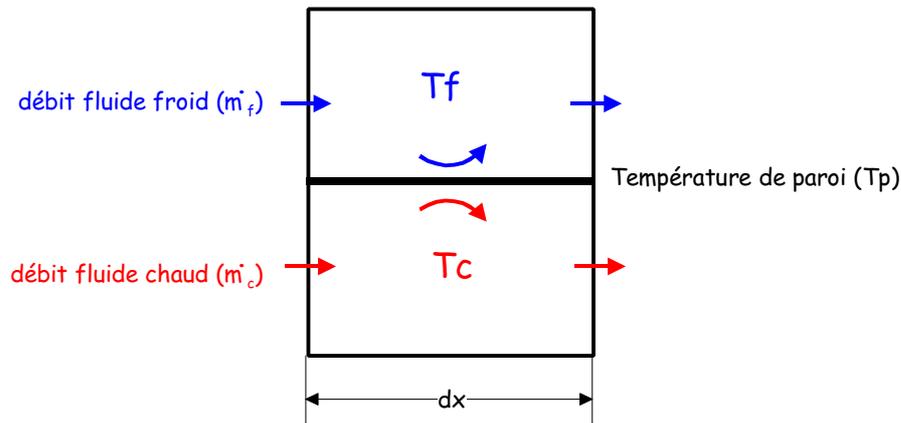


Figure 3 : Tranche élémentaire d'échangeur.

Le premier principe appliqué à l'élément de volume froid de surface d'échange dS_f s'écrit :

$$\frac{dU}{dt} = 0 = \delta\dot{Q} + \dot{m}(h_e - h_s)$$

l'enthalpie variant de dh au cours de sa traversée du volume, on a : $h_s = h_e + dh$.

Par ailleurs, on a $\delta\dot{Q} = K_f dS_f (T_f - T_p)$ et $dh = C_{p_f} dT_f$

Le premier principe s'écrit alors : $K_f dS_f (T_f - T_p) + \dot{m}_f C_{p_f} dT_f = 0$

Avec

- K : coefficient d'échange convectif ($W/m^2.K$),
- dS : Surface d'échange élémentaire (m^2),
- \dot{m} : Débit massique de fluide (Kg/s),
- C_p : Capacité calorifique du fluide ($J/Kg.K$),
- T_f : Température du fluide froid (variable) ($^{\circ}C$),
- T_c : Température du fluide chaud (variable) ($^{\circ}C$),
- T_p : Température de paroi ($^{\circ}C$).

La même démarche appliquée au fluide chaud conduit à

$$K_c dS_c (T_c - T_p) + \dot{m}_c C_{p_c} dT_c = 0$$

Pour avoir une relation directe avec x , posons $dS = \Sigma dx$ où Σ représente la surface linéique (m^2/m). De la sorte, l'équation initiale permettra de traiter indifféremment le cas de tubes de sections différentes, avec ou sans ailettes (un tube rond de diamètre D a un Σ de πD , un tube carré de coté a , un Σ de $4a$,...)

Le système devient alors :

$$\begin{cases} \dot{m}_f C_{p_f} \frac{dT_f}{dx} = \Sigma_f K_f (T_p - T_f) \\ \dot{m}_c C_{p_c} \frac{dT_c}{dx} = \Sigma_c K_c (T_p - T_c) \end{cases} \quad [A]$$

Cherchons à éliminer T_p de notre expression.

Comme il y a conservation de l'énergie (premier principe appliqué au système global), on peut écrire :

$$d\phi = dx \cdot [\Sigma K]_g (T_c - T_f) \quad [B]$$

qui ne fait plus intervenir T_p mais bien T_c et T_f ainsi que le facteur $[\Sigma K]_g$ caractérisant l'échange global entre les deux fluides.

Ce flux peut encore s'écrire pour chacun des fluides :

$$d\phi = -\dot{m}_c C_{p_c} dT_c = \dot{m}_f C_{p_f} dT_f \quad [C]$$

soit encore

$$d\phi = dx \sum_f K_f (T_p - T_f) = -dx \sum_c K_c (T_p - T_c) \quad [D]$$

Exprimons les écarts de température sur chacun des fluides :

$$(T_c - T_p) = \frac{d\phi}{dx \sum_c K_c} \quad [E]$$

$$(T_p - T_f) = \frac{d\phi}{dx \sum_f K_f}$$

En sommant ces deux expressions on obtient :

$$(T_c - T_f) = \frac{d\phi}{dx \sum_c K_c} + \frac{d\phi}{dx \sum_f K_f} = d\phi \left[\frac{1}{dx \sum_c K_c} + \frac{1}{dx \sum_f K_f} \right]$$

Par identification avec [B] on a donc : $[\sum K]_g = \frac{1}{\left[\frac{1}{\sum_c K_c} + \frac{1}{\sum_f K_f} \right]}$

et alors le système devient :

$$\begin{cases} \dot{m}_f C_{p_f} \frac{dT_f}{dx} = [\sum K]_g (T_c - T_f) \\ \dot{m}_c C_{p_c} \frac{dT_c}{dx} = [\sum K]_g (T_f - T_c) \end{cases} \quad [F]$$

Arrivé en ce point, la modélisation du système est terminée.

DISCRETISATION

Les deux équations étant du même type, la discrétisation qui suit est valable pour les deux fluides.

La discrétisation dans l'espace s'effectue par exemple en choisissant un pas d'espace constant qui donc implique la connaissance des positions x_i des différents volumes.

$\frac{dT}{dx}$ représente la dérivée de la fonction T au point x . Sa valeur est par conséquent égale à la pente de la tangente de la courbe T en x .

Dans la mesure où le système est discrétisé en espace, l'accès à la valeur de la dérivée n'est accessible que pour les valeurs x_i .

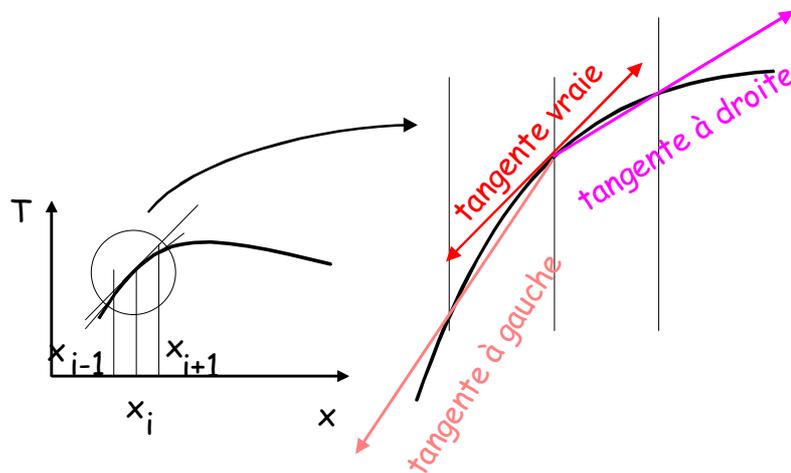


Figure 4 : Signification géométrique des tangentes à gauche et à droite.

La méthode d'Euler consiste à écrire que $\left. \frac{dT}{dx} \right|_i = \frac{T_{i+1} - T_i}{x_{i+1} - x_i}$

On notera que cette écriture ne fait intervenir pour la dérivée calculée en i que des termes en i et $i+1$ donc à droite du point considéré. On parle alors d'une discrétisation selon un schéma aval. L'utilisation d'un schéma amont (donc à gauche) consiste à écrire : $\left. \frac{dT}{dx} \right|_i = \frac{T_i - T_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$

Une troisième possibilité revient à combiner chacune des deux formulations avec un coefficient pondérateur ε : $\left. \frac{dT}{dx} \right|_i = \varepsilon \frac{T_{i+1} - T_i}{x_{i+1} - x_i} + (1 - \varepsilon) \frac{T_i - T_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$

Lorsque ce dernier est égal à 0.5, on parle alors de schéma centré ou de la méthode de la tangente améliorée.

On remarquera enfin que cette dernière expression permet d'envisager tous les cas précédents :

- $\varepsilon = 0$: schéma amont,
- $\varepsilon = 0.5$: schéma centré,
- $\varepsilon = 1$: schéma aval.

On voit donc que face à un objectif, il existe plusieurs possibilités de l'aborder.

On voit aussi sur le schéma précédent (figure 4), l'origine de l'erreur due à la discrétisation : différence entre dérivée vraie en x (si on était capable de la calculer) et celle calculée après discrétisation (à certaines positions x_i seulement) et que cette erreur est d'autant plus grande que dx est grand.

Bien évidemment cette erreur diminue avec dx (augmentation du nombre de points de calcul) puisqu'on tend vers la valeur vraie. Il y a donc un compromis entre la précision que l'on recherche et le temps de calcul directement proportionnel au nombre de points à traiter.

Si on applique à notre cas une discrétisation de type Euler avec un schéma aval, l'équation de départ

s'écrit désormais :
$$\frac{T_{i+1}^f - T_i^f}{x_{i+1} - x_i} = \frac{[\sum K]_g}{\dot{m}_f C_{p_f}} (T_i^c - T_i^f)$$

RESOLUTION

Puisque le système est axi-symétrique cette équation est valable quelle que soit la valeur de i donc quelle que soit la position du volume dans l'échangeur. Elle l'est donc pour le premier point ($x=0, \Rightarrow i=0$) qui s'écrit:

$$\frac{T_1^f - T_0^f}{x_1 - x_0} = \frac{[\sum K]_g}{\dot{m}_f C_{p_f}} (T_0^c - T_0^f) \quad [G]$$

Cette expression fait apparaître les valeurs T_0^f et T_0^c qui représentent les températures d'entrée des fluides dans l'échangeur, donc faisant partie des données du problème. L'équation ne fait plus intervenir alors que la seule inconnue T_1^f que l'on peut calculer.

La même démarche sur l'autre fluide permet de connaître les deux valeurs de température dans le premier volume (T_1^f et T_1^c).

Lorsque cette opération est effectuée maintenant sur le volume n°2, on se retrouve dans le même cas que précédemment (une équation, une inconnue) et on peut ainsi, de proche en proche, calculer le profil de température des deux fluides pour la totalité de l'échangeur.

Devant la simplicité des équations mises en jeu, la résolution numérique est triviale et peut être menée avec un tableur.

SIMULATION

Les résultats que l'on obtient sont par exemple ceux présentés dans la courbe suivante (figure 5).

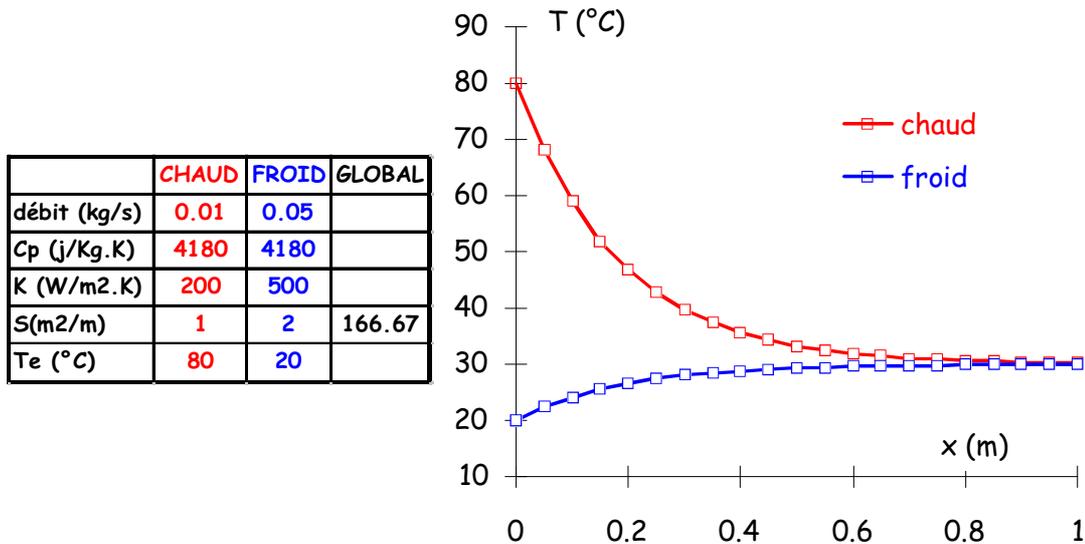


Figure 5: Exemple de résultats de simulation: évolution des températures de fluide.

Dans la mesure où on a calculé la température de chacun des fluides en sortie d'échangeur, on peut donc calculer les puissances mises en jeu par l'échangeur pour chacun des fluides (figure 6) et s'assurer ainsi quelles sont bien égales au cours de leur traversée (vérification modèle).

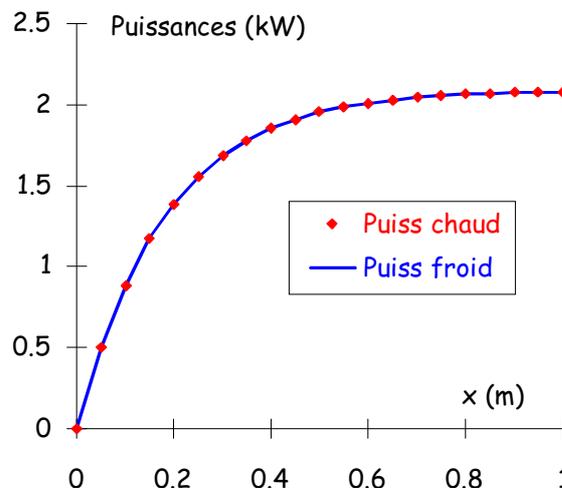


Figure 6: Evolution des puissances échangées au cours de la traversée de l'échangeur.

Un mauvais choix de la valeur de dx peut conduire à des instabilités numériques (dûes à une erreur de discrétisation trop importante) qui amène le système à diverger.

Dans les figures qui suivent (7 et 8), pour un même échangeur, la valeur de dx dans le premier cas est de 5 cm (20 points de calcul) et dans le deuxième cas de 2.5 cm (40 points de calcul). Dans la figure 1 le système commence à diverger puis se stabilise alors que dans le second cas, il reste stable tout au long de l'échangeur.

	CHAUD	FROID	GLOBAL
débit (kg/s)	0.01	0.05	
Cp (j/Kg.K)	4180	150	
K (W/m2.K)	200	1000	
S(m2/m)	1	2	181.82
Te (°C)	80	20	

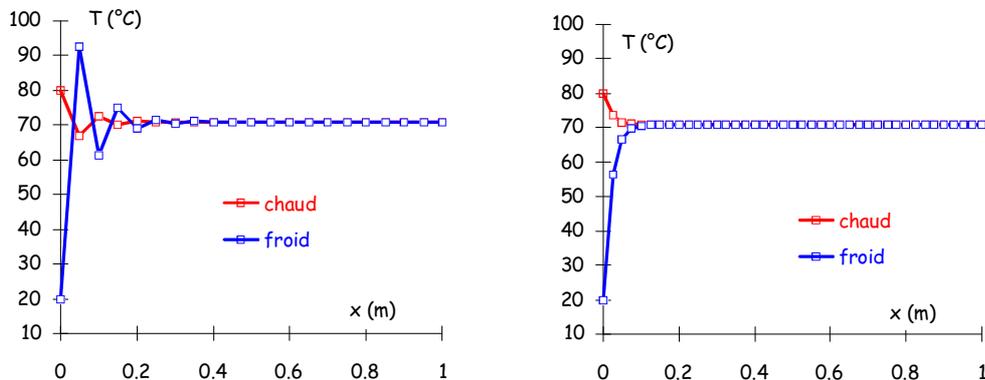


Figure 7 : Illustration de la divergence numérique.

Si on poursuit et que l'on attribue la valeur de 10 cm à dx (10 points de calcul) on obtient alors un système totalement divergent avec des valeurs de température sans aucune signification.

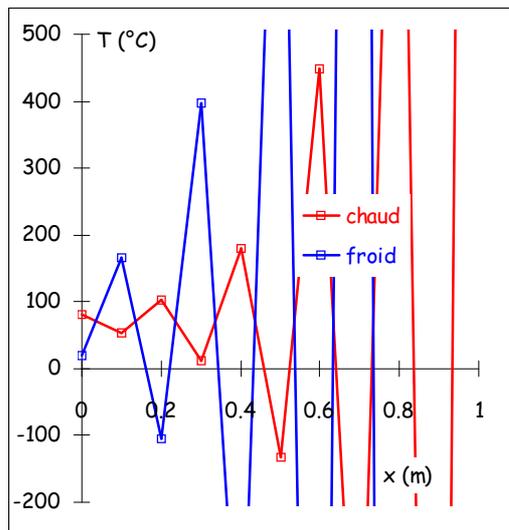


Figure 8 : Système numérique instable, voire chaotique.

EXEMPLE D'ETUDE DE SENSIBILITE PARAMETRIQUE

Il est clair (cf cours Transfert Thermique) que le calcul des coefficients d'échange dépends des conditions d'écoulement (vitesse donc débit, nature du fluide, température, dimensions géométriques de l'échangeur....) et que l'on calcule par le biais des nombres adimensionnels de Reynolds, Prantl et Nusselt.

Néanmoins dans des conditions typiques de production de froid on peut retenir les ordres de grandeurs suivants :

Fluide	Changement de phase (condensation, évaporation)	Eau ou eau glycolée	Gaz (air)
Coefficient d'échange (W/m ² .K)	Plusieurs milliers	Plusieurs centaines à quelques milliers	Quelques dizaines

Supposons que l'un des fluides soit de l'air ($K_c=60 \text{ W/m}^2.K$). Regardons l'influence de la qualité de l'échange de l'autre fluide sur le comportement de l'échangeur. On obtient les résultats suivants pour des valeurs de 250, 1000 et 2000 $\text{W/m}^2.K$ concernant K_f

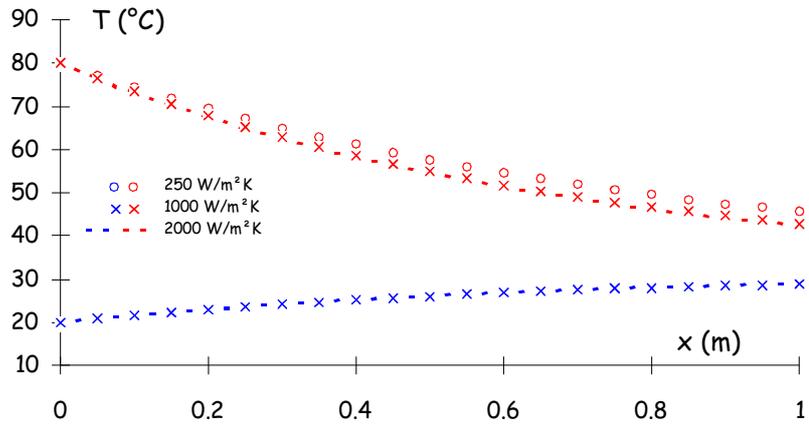


Figure 9 :Etude de la sensibilité paramétrique du coefficient d'échange le plus grand

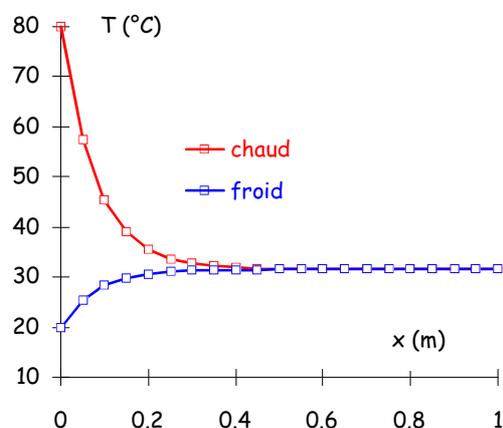
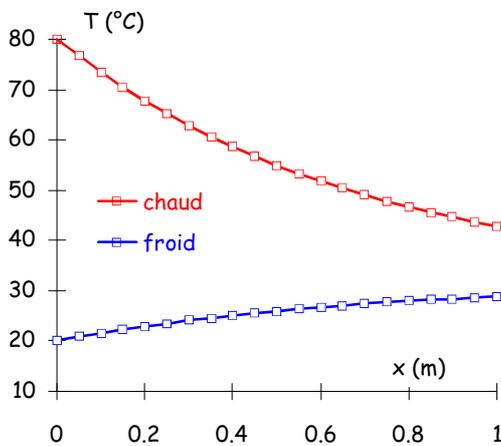
On voit au travers de cet exemple que si l'on veut augmenter les performances de l'échangeur, il est inutile d'agir sur le fluide possédant les meilleures qualités de transfert.

Dans la mesure où le coefficient d'échange intervient toujours en facteur de la surface dans les équations, il est par conséquent inutile de chercher à augmenter celle du côté du fluide qui possède les propriétés de transfert les plus intéressantes. En revanche cela montre qu'il faut au contraire privilégier l'autre fluide. C'est la raison pour laquelle, quand un échangeur fait intervenir de l'air comme fluide, c'est toujours ce côté qui est muni d'ailettes (radiateur sur une voiture, aéroréfrigérant,...)

Toujours avec le même exemple ($K_c=60 \text{ W/m}^2.K$) et en prenant une valeur de 1000 $\text{W/m}^2.K$ pour K_f , supposons que l'adjonction d'ailettes multiplie par un facteur 10 la surface offerte à l'air, la comparaison prend alors la forme suivante :

	CHAUD	FROID	GLOBAL
débit (kg/s)	0.05	0.05	
Cp (j/kg.K)	1000	4180	
K (W/m².K)	60	1000	
S(m²/m)	1	1	56.60
Te (°C)	80	20	

	CHAUD	FROID	GLOBAL
débit (kg/s)	0.05	0.05	
Cp (j/kg.K)	1000	4180	
K (W/m².K)	60	1000	
S(m²/m)	10	1	375.00
Te (°C)	80	20	



On pourrait comme cela multiplier les enseignements que l'on pourrait tirer de l'outil qui a été créé.

Voici par exemple quelques idées pour compléter ce travail :

- Intégrer dans le modèle le calcul des coefficients d'échange en fonction du débit et de votre type de veine fluide,
- Prendre en compte les transferts de chaleur de l'échangeur avec l'ambiance
- Prendre en compte le transfert thermique dans la paroi d'échange,
- Simuler un échangeur fonctionnant à contre courant,
- Simuler un échangeur où interviennent à la suite différentes conditions d'écoulement (désurchauffe, condensation et sous-refroidissement) dans un condenseur par exemple.
- ...

Une copie informatique du document de cours est téléchargeable sur <http://jc.castaing.free.fr/>

Le fichier excel de cette séance est disponible au téléchargement à la même adresse.

Séance n°2

Afin de compléter le premier travail effectué sur un échangeur simple (séance n°1) nous allons étudier la répartition spatiale des températures dans un échangeur co-courant faisant intervenir deux fluides dont l'un subit un changement de phase.

Pour concrétiser cet objectif, choisissons un condenseur dans lequel s'effectue tout d'abord une désurchauffe des vapeurs issues du compresseur jusqu'à la température de saturation, puis un changement de phase (condensation : passage de vapeur saturée à liquide saturé) et enfin le sous-refroidissement du liquide.

Concernant les deux « extrémités » (sous-refroidissement et désurchauffe), la méthode a déjà été vue la fois précédente et ne constitue donc pas un problème.

Nous prendrons par hypothèse que :

- Le changement de phase s'effectue à température constante,
- Le titre en vapeur (ou en liquide) évolue le long de l'échangeur.

Travail à effectuer :

- Etablir l'équation différentielle traduisant le changement de phase
- Résoudre successivement les trois échanges dans les conditions suivantes :

Conditions de fonctionnement :

- | | |
|---|-----------------------|
| • Fluide frigoporteur | eau |
| • Température d'entrée | 15°C |
| • Débit | 0.2 kg/s |
| • Fluide frigorigène | R22 |
| • Température de condensation | 40°C |
| • Température de refoulement du compresseur | 115°C |
| • Débit | 0.01 kg/s |
| • Chaleur latente de vaporisation à 40°C | 166892 J/kg |
| • Capacité calorifique (Cp) à 40°C | Gaz : 964 J/kg.K |
| • | Liquide : 1324 J/kg.K |

Conditions relatives aux échanges de chaleur

- | | |
|---------------------|--------------------------|
| • Eau | 500 W/m ² .K |
| • R22 phase vapeur | 80 W/m ² .K |
| • R22 condensation | 5000 W/m ² .K |
| • R22 phase liquide | 300 W/m ² .K |

Propriétés géométriques de l'échangeur :

- | | |
|-------------------------------|-----------------------|
| • Surface spécifique coté eau | 0.1 m ² /m |
| • Surface spécifique coté R22 | 0.1 m ² /m |

Répondez aux questions suivantes :

- 1 Quelle est la valeur du sous-refroidissement avec une longueur d'échangeur de 5 m.
- 2 Quelles proportions de l'échangeur concernent : la désurchauffe, la condensation et le sous-refroidissement.
- 3 Calculer la répartition des puissances échangées dans ces trois zones le long de l'échangeur.
- 4 Que deviennent ces résultats lorsque la température d'entrée de l'eau devient 20°C puis 25 °C (conditions d'été)
- 5 Conclusions

6 Que se passe t'il si l'on envisage d'effectuer un changement de fluide en remplaçant le R22 par du R134a ?

- Chaleur latente de vaporisation à 40°C 162016 J/kg
- Capacité calorifique (Cp) à 40°C Gaz :882 J/kg.K
- Liquide :1168 J/kg.K

Une copie informatique du document est téléchargeable sur <http://jc.castaing.free.fr/>

Séance n°3

Des denrées périssables sont introduites dans un conteneur muni d'un système de production de froid d'une puissance P . Ce conteneur est ensuite véhiculé pendant plusieurs jours dans des pays où les ambiances sont totalement différentes. L'objectif est de réaliser un outil de simulation permettant d'optimiser le couplage entre le conteneur et le groupe de production de froid face à un but fixé.

Hypothèses et données.

Dimensions conteneur :	3m x 3m x 9m
Masse denrées :	10 000 kg
Capacité équivalente denrées :	3500J/kg.K
Température initiale denrées et conteneur :	-18°C
Coefficient d'échange convectif externe :	50 W/m ² .K
Coefficient d'échange convectif interne :	20 W/m ² .K

L'épaisseur de l'isolant n'intervient pas dans la surface d'échange ($S_{int} \sim S_{ext}$)

Le conteneur n'intervient pas dans l'évolution du système (masse négligeable)

Travail à effectuer :

- Démontrer que l'équation différentielle permettant de rendre compte de l'évolution des denrées au cours du temps est de la forme : $MC_p \frac{dT}{dt} = -|P| + [KS]_g (T_{amb} - T)$
- Simuler le comportement du système et répondre aux questions suivantes :
 - Quelle serait la puissance de production de froid à installer pour conserver les denrées à -18°C dans un conteneur non isolé, placé dans une ambiance à 20°C.
 - Que deviendrait cette puissance si on met en œuvre successivement une isolation de 1 cm, 5 cm et 10 cm de laine de verre (conductivité : 0.05 W/m.K)
 - Déterminer la puissance minimale à installer pour que les denrées ne dépassent pas la température critique de -10°C dans une ambiance dont la température varie comme suit et avec un conteneur présentant une isolation de 10 cm de laine de verre (conductivité : 0.05 W/m.K) et initialement à -18°C.

	T (°C)		T (°C)
jour n°1	20	jour n°6	40
nuit n°1	15	nuit n°6	18
jour n°2	20	jour n°7	45
nuit n°2	18	nuit n°7	18
jour n°3	25	jour n°8	45
nuit n°3	19	nuit n°8	25
jour n°4	30	jour n°9	40
nuit n°4	22	nuit n°9	22
jour n°5	35	jour n°10	40
nuit n°5	23	nuit n°10	20

- Vous choisissez de prendre une marge de sécurité et surdimensionnez votre puissance de production de froid de 20 %. Quelle est l'évolution de la température des denrées dans ces conditions ?
- Etablissez la régulation (Tout ou Rien) du système pour maintenir la température des denrées à une consigne donnée.
- A minuit du 7^{ième} jour, votre groupe tombe en panne. De combien de temps disposez-vous pour le remettre en marche avant que vous ne dépassiez la température critique de -10°C.

Une copie informatique du document est téléchargeable sur <http://jc.castaing.free.fr/>