

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

SIMULATION NUMÉRIQUE DE L'OPÉRATION DE CHAUDIÈRES
INDUSTRIELLES

LUC GRAVEL
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR
(GÉNIE MÉCANIQUE)
FÉVRIER 2004



National Library
of Canada

Bibliothèque nationale
du Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services

Acquisitions et
services bibliographiques

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 0-612-89226-3

Our file Notre référence

ISBN: 0-612-89226-3

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this dissertation.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de ce manuscrit.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the dissertation.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée:

SIMULATION NUMÉRIQUE DE L'OPÉRATION DE CHAUDIÈRES
INDUSTRIELLES

présentée par: GRAVEL Luc

en vue de l'obtention du diplôme de: Philosophiæ Doctor

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de:

M. PELLETIER Dominique, Ph.D., président

M. CAMARERO Ricardo, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. MCKENTY François, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. TEYSSEDOU Alberto, Ph.D., membre

M. MERCADIER Yves, Dr Ing., membre

*À la mémoire de mes grand-parents,
à mes parents, à ma conjointe Nathalie, à ma soeur et à mes frères.*

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier mon directeur de recherche le professeur Ricardo Camarero. Je remercie mon codirecteur de recherche le *D^r* François McKenty qui n'a ménagé ni son temps, ni ses efforts pour la réalisation de ce projet. Sa grande compétence et son dévouement m'ont été des plus enrichissants depuis plusieurs années. Je tiens également à remercier le *D^r* Peter Tye pour son aide et ses précieux conseils sur les écoulements diphasiques. Je remercie Brais, Malouin & Associés (BMA) pour l'utilisation des ordinateurs et des logiciels ainsi que de l'espace de bureau.

Je remercie mes amis Gilbert Langevin, Chantal Dion, Marie-Isabelle Farinas et Léo Charest lors de la rédaction de cette thèse. Leurs encouragements m'ont été des plus motivants pour la réalisation de cette thèse.

Enfin, je remercie ma conjointe Nathalie, mes parents Jean-Guy et Madeleine, ma soeur Josée et mes frères Yvon, Serge et Claude pour leurs encouragements et leur support moral tout au long de cette thèse. La réalisation de cet ouvrage n'aurait pas été possible sans eux. Je leur en suis éternellement reconnaissant.

RÉSUMÉ

Dans cette étude, on développe une interface permettant de coupler le côté feu et le côté eau de chaudières industrielles. L'interface consiste à coupler le logiciel commercial STAR-CD couplé à la librairie de combustion CMBLIB et le code BOILER-II. Une méthodologie est présentée pour effectuer le couplage (interface) entre les codes STAR-CD et BOILER-II. L'interface consiste à transférer des quantités surfaciques à des quantités ponctuelles et vice-versa. Il s'agit dans ce cas de passer le flux de chaleur provenant de la combustion au code BOILER-II et de permettre à ce dernier de retransmettre la température à la paroi externe des tubes. Un point important de ce travail est le traitement des différentes parties tubées d'une chaudière et les difficultés que l'on rencontre lors de cette modélisation. Ainsi, pour transférer le flux de chaleur, une surface de tube est nécessaire. Par conséquent, les tubes sont discrétisés de manière carrée dans les banques de tubes tout en gardant la même surface d'échange. Le but de cette opération est de diminuer le nombre d'éléments de calcul pour réaliser la simulation dans un délai raisonnable de 2 à 3 semaines. Les coefficients de transfert de chaleur et la perte de charge à travers les banques de tubes sont modélisés par l'entremise de corrélations numériques développées sur des sections réelles de banques de tubes ronds. Les surfaces externes des chaudières sont modélisées par des murs plats et, pour tenir compte de l'effet des murs tubés sur le transfert de chaleur, des corrélations numériques ont également été établies.

Le logiciel STAR-CD est un code de simulation numérique tridimensionnel de la mécanique des fluides et BOILER-II est un code de simulation numérique unidimensionnel des écoulements diphasiques. Une description du problème à résoudre est présentée. On donne également une description du code commercial STAR-CD qui inclut les équations de conservation pour l'aspect aérodynamique ainsi

que pour l'aspect aérothermochimique. Le modèle de turbulence $k-\epsilon$ avec loi de paroi est utilisé dans cette étude. Le schéma numérique de différentiation amont et l'algorithme SIMPLE sont aussi utilisés dans cette étude. La combustion est traitée avec la librairie de combustion CMBLIB qui est couplée au code STAR-CD. Une description des principaux modèles de combustion contenus dans la librairie tels que les modèles à chimie infiniment rapide, à taux de réaction fini, d'équilibre chimique et de micro-flammes sont donnés. Cette librairie de combustion inclut des fonctions de densité de probabilité beta et delta pour tenir compte de l'influence de la turbulence sur la flamme et le taux de mélange. Pour ce qui est du code BOILER-II, il utilise un modèle d'écoulement diphasique à écart de vitesse. On présente alors les équations de conservation du mélange diphasique et les définitions de base des quantités utilisées dans le code BOILER-II. Le logiciel MpCCI (Mesh-based parallel Code Coupling Interface) est également utilisé dans cette étude. MpCCI est utilisé dans le but de permettre le transfert de quantités surfaciques tel que le flux de chaleur entre les deux codes.

Pour valider l'interface, deux simulations numériques sont effectuées sur la même chaudière de type D d'une puissance de 29.14 MW (99.44 MMBTU/hr). Une simulation avec les tubes discrétisés de manière carrée et l'autre sans tubes. La simulation avec tubes carrés est celle où on effectue le couplage entre les deux codes. Tandis que pour celle sans tubes, aucun couplage n'est effectué. Dans ce cas, pour le côté feu, on impose dans le code STAR-CD une température constante sur les parois dans le foyer (température de saturation de l'eau à la pression d'opération de la chaudière et un ΔT à cause de l'échauffement de la paroi du tube et du coefficient de transfert de chaleur interne) et un puits de chaleur volumique dans les banques de tubes puisque les tubes ne sont pas discrétisés. Pour le côté eau, des flux de chaleur constants provenant du manufacturier sont imposés pour un mur complet du foyer ou pour une section dans les banques de tubes dans le

code BOILER-II.

Pour le côté feu, le cas couplé donne de meilleurs résultats que le cas sans couplage pour ce qui est de la température de sortie de la chaudière et de la perte de pression à travers les banques de tubes. Pour le cas avec couplage (avec tubes), une différence de seulement 2.45% pour la température de sortie par rapport aux valeurs du manufacturier est notée comparativement à 7.71% pour le cas sans couplage (sans tubes), ce qui est en dessous de la précision des appareils de mesures. Pour ce qui est de la perte de charge à travers les banques de tubes, on a une différence d'environ 6% par rapport aux valeurs du manufacturier pour le cas avec tubes comparativement à environ 32% pour le cas sans tubes.

Les résultats de la simulation couplée pour le côté eau sont très intéressants. Pour les chaudières industrielles à circulation naturelle, l'écoulement est causé par la différence de densité entre le mélange diphasique dans les tubes ascendants et l'eau circulant dans les tubes descendants. Par conséquent, les tubes les plus chauffés ont le débit massique le plus élevé. La distribution des débits massiques dans les tubes du foyer obtenue de la simulation couplée montre exactement ce résultat. Ceci indique clairement l'exactitude physique de la simulation couplée. Des résultats additionnels sont présentés incluant la variation du titre thermodynamique, la fraction de vide et les températures du métal des tubes pour une région du foyer ainsi qu'une partie représentative de la banque de tubes de convection.

Ce travail a développé un outil permettant non seulement de traiter chacune des composantes d'une chaudière séparément, mais permettant également de traiter l'ensemble de la chaudière simultanément et ainsi de mesurer l'impact d'un changement d'une des composantes du système sur l'opération de chaudières complètes.

ABSTRACT

This study focuses on the development of an interface designed to allow numerical simulations of the fireside and waterside of industrial boilers to be coupled. This interface couples the commercial CFD code STAR-CD, the CMBLIB combustion model library and the waterside circulation code BOILER-II. The interface transfers surface values to punctual ones and vice-versa. In particular, it involves passing the heat flux from the combustion calculation to the BOILER-II code and from BOILER-II passing the outside tube wall temperatures back to the combustion calculation. One important aspect of this work is the treatment of the different tubular surfaces encountered in a boiler and the difficulties involved in their modeling. In order to transfer the heat flux, a tube surface is required. Consequently, the tubes in the convection bank are discretized as rectangles having the same surface as the round tubes. The goal of this exercise being the reduction in the number of computational cells thus allowing the simulation to be completed in a reasonable length of time, that is to say 2 to 3 weeks. The heat transfer coefficients and the pressure drop in the convection bank are modeled using correlations developed using portions of the convection bank discretized with the actual round tubes. The tubular surfaces in the furnace region are modeled using flat walls. In order to take into account the influence of the actual geometry on the heat transfer, correlations were developed using a numerical simulation of a portion of the actual geometry.

STAR-CD is a three-dimensional computational fluid dynamics simulation code while BOILER-II is a one-dimensional two-phase flow simulation code. A description of the problem to be solved is given as is a description of the commercial CFD code STAR-CD including the conservation equations for both the aerodynamic and thermochemical aspects involved in the problem solution. The $k - \epsilon$ turbulence model with wall functions is used in this study. Upwind differencing

and the SIMPLE solution algorithm are also used in this study. The combustion is treated using the combustion model library CMBLIB which is coupled to STAR-CD. A description of the most important combustion models contained in this library, namely: the fast chemistry, finite reaction rate, chemical equilibrium and micro-flame models are given. This library contains both beta and delta probability density functions to take into account the influence of turbulence on the flame and on the mixing rate. The BOILER-II code uses the drift flux model of two-phase flow. The two-phase mixture conservation equations and the basic definitions of the main quantities used in the BOILER-II code are thus presented. The MpCCI (Mesh-based parallel Code Coupling Interface) code is also used in this study. MpCCI is used to transfer surface quantities such as the heat flux between the two simulation codes.

To validate the work, two numerical simulations are carried out using the same 29.14 MW (99.44 MMBTU/hr) D-type boiler. One with the convection bank discretized using rectangular tubes and the other without tubes where the convection bank is represented as a porous medium. The simulation with the convection bank discretized using rectangular tubes is the one in which the coupling between the two simulation codes is carried out. For the simulation using the porous medium representation of the convection bank no coupling is done. In the latter case, a uniform temperature (saturation temperature at the boiler operating pressure plus a ΔT to account for the wall superheat due to heat transfer) is imposed on the walls in the furnace, in the convection bank a volumetric energy source (sink) term is used to remove the energy from the combustion products. For the waterside simulation, uniform heat fluxes provided by the boiler manufacturer are imposed for entire walls in the furnace or section of the convection bank modeled in the BOILER-II code.

For the fireside of the boiler, the coupled simulation produces better results than the case without coupling for the boiler outlet temperature and the pressure drop through the convection bank. The boiler outlet temperatures obtained with the coupled simulation show a difference of 2.45%, compared to the manufacturers results, which is less than the precision of field measurement equipment, while the temperatures obtained from the uncoupled simulations show a 7.71% difference. The predicted pressure drop through the convection bank is within 6% of the manufacturers results for the coupled case compared to a difference of 32% for the uncoupled case.

The results of the coupled simulation for the waterside are quite interesting. For industrial boilers operating under natural circulation conditions, the driving force for the flow is caused by the difference in the density between the two-phase mixture in the boiler tubes and the water flow in the downcomers. Consequently the most heated tubes have the highest flow rate. The distribution of flow rates in the furnace tubes obtained from the coupled simulation show exactly this result. This clearly points to the physical correctness of the coupled simulation. Additional results presented for the waterside circulation simulation include the variation of the quality, void fraction, and tube metal temperatures in both the furnace region and a representative piece of the convection bank.

The work presented herein has resulted in the development of a tool that allows not only each piece of a boiler to be analyzed individually but also to examine the behavior of the boiler as a whole simultaneously. This will allow designers and boiler engineers to examine the impact of a change in a given component on the behavior of the entire boiler and on its operation.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	ix
TABLE DES MATIÈRES	xii
LISTE DES TABLEAUX	xv
LISTE DES FIGURES	xvi
LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES	xx
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 REVUE BIBLIOGRAPHIQUE	4
1.1 Généralités	4
1.2 Introduction à la combustion	5
1.3 Flammes de prémélange	6
1.4 Flammes de diffusion	6
1.5 Écoulements turbulents à densité variable	6
1.5.1 Équations de conservation moyennées	7
1.5.2 Modèle de turbulence	8
1.5.3 Loi de paroi	10
1.6 Modèle numérique	11
1.7 Modèles de combustion	11

1.7.1	Modèle à chimie infiniment rapide	14
1.7.2	Pondération par fonction de densité de probabilité	16
1.7.3	Modèle à taux de réaction fini	19
1.7.4	Modèle d'équilibre chimique	19
1.7.5	Modèle des micro-flammes	21
1.8	Formation de NO_x	22
1.9	Écoulements diphasiques	23
1.9.1	Méthodologie et modèles d'écoulements diphasiques	24
1.9.2	Pratique dans l'industrie nucléaire	29
1.9.3	Pratique dans l'industrie des chaudières	30
CHAPITRE 2	ÉQUATIONS DE BASE	31
2.1	Description du problème	31
2.2	Code commercial STAR-CD	32
2.2.1	Description du code	33
2.2.2	Équations de conservation pour l'aspect aérodynamique	34
2.2.3	Équations de conservation pour l'aspect thermochimique	36
2.3	Librairie de combustion CMBLIB	41
2.3.1	Relations communes aux modèles de combustion	42
2.3.2	Modèle à chimie infiniment rapide	45
2.3.3	Modèle à taux de réaction fini	48
2.3.4	Modèle d'équilibre chimique	49
2.3.5	Modèle de micro-flammes	55
2.3.6	Pondération par fonction de densité de probabilité	57
2.3.7	Formation de NO_x	61
2.4	Conditions frontières	62
2.4.1	Conditions aux entrées	62
2.4.2	Conditions aux sorties	63
2.4.3	Conditions aux parois	63

2.5	Code BOILER-II	65
2.5.1	Équations de conservation de BOILER-II	66
2.5.1.1	Conservation de la masse du mélange	67
2.5.1.2	Équation de conservation de la quantité de mouve- ment du mélange	68
2.5.1.3	Équation de conservation de l'énergie du mélange .	69
2.6	Logiciel MpCCI	69
CHAPITRE 3 INTERFACE STAR-CD(CMBLIB)/BOILER-II		74
3.1	Méthodologie	74
3.2	Modélisation d'une chaudière	79
3.2.1	Murs tubés	79
3.2.2	Banques de tubes	80
3.2.2.1	Chute de pression	80
3.2.2.2	Transfert de chaleur	89
CHAPITRE 4 RÉSULTATS ET ANALYSE		90
4.1	Caractéristiques de la chaudière	91
4.1.1	Résultats côté feu	103
4.1.2	Résultats côté eau	123
CONCLUSION		135
RÉFÉRENCES		137

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.1	Modèles d'écoulement diphasique.	25
Tableau 1.2	Caractéristiques des modèles d'écoulement diphasique. . . .	25
Tableau 4.1	Caractéristiques générales de la chaudière de type D.	91
Tableau 4.2	Caractéristiques des deux banques de tubes.	96
Tableau 4.3	Dimensions du brûleur.	97
Tableau 4.4	Conditions d'entrées du brûleur.	97
Tableau 4.5	Comparaisons des résultats entre le manufacturier et les simulations avec et sans discrétisation des tubes.	122
Tableau 4.6	Fraction de vide et régimes d'écoulements pour le tube de la figure 4.34	129

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Régimes d'écoulements diphasiques verticaux.	27
Figure 1.2	Régimes d'écoulements diphasiques horizontaux.	28
Figure 2.1	Description du problème.	32
Figure 2.2	Rayonnement à travers un élément de volume le long du chemin de propagation.	40
Figure 2.3	Rayon traversant un élément.	41
Figure 2.4	Concentration massique des produits de combustion en fonc- tion du taux de mélange pour une réaction chimique à une étape (combustion du méthane dans l'air).	44
Figure 2.5	Concentration massique des produits de combustion en fonc- tion du taux de mélange pour une réaction chimique réelle (combustion du méthane dans l'air).	45
Figure 2.6	Équilibre chimique du méthane dans l'air. Comparaison des concentrations molaires en fonction de la richesse du mélange avec les résultats de Jones (1980).	55
Figure 2.7	Concentration massique des produits en fonction du taux de mélange calculé avec le modèle de micro-flammes pour la combustion du méthane dans l'air (McKenty (1992)).	57
Figure 2.8	Distance du premier point de calcul y_P	64
Figure 2.9	Structure de MpCCI lors d'un processus.	70
Figure 2.10	Schéma du concept des points de synchronisation.	72
Figure 2.11	Échange de données entre deux maillages non-correspondants (la distance est exagérée).	72
Figure 3.1	Tube carré simplifié.	77
Figure 3.2	Maillage d'une section de la banque de tubes avec des tubes carrés.	78

Figure 3.3	Configuration des tubes pour une banque de tubes de chaudière de type D.	82
Figure 3.4	Vue de plan du maillage de 10 par 10 tubes.	83
Figure 3.5	Vue isométrique de la banque de 10 par 10 tubes.	84
Figure 3.6	Vue isométrique de la banque de 5 par 20 tubes.	85
Figure 3.7	Distribution de pression le long de la ligne du centre de la banque de tubes.	86
Figure 3.8	Distribution de vitesse le long de la ligne du centre de la banque de tubes.	86
Figure 3.9	Perte de charge le long de la banque de tubes de la chaudière de type D.	87
Figure 3.10	Température le long de la banque de tubes de la chaudière de type D.	88
Figure 4.1	Géométrie de la chaudière de type D.	92
Figure 4.2	Géométrie des banques de tubes.	93
Figure 4.3	Vue agrandie de la géométrie des banques de tubes.	94
Figure 4.4	Vue de plan de la géométrie des banques de tubes.	95
Figure 4.5	Géométrie du brûleur (la géométrie n'est pas à l'échelle). . .	98
Figure 4.6	Vue en 3-D du brûleur.	99
Figure 4.7	Maillage de la chaudière.	100
Figure 4.8	Maillage du brûleur.	101
Figure 4.9	Maillage d'une section d'une banque de tubes.	102
Figure 4.10	Coupe du champ de vitesse passant par le centre du brûleur dans le plan vertical - avec tubes carrés.	106
Figure 4.11	Coupe du champ de vitesse passant par le centre du brûleur dans le plan horizontal - avec tubes carrés.	107
Figure 4.12	Contour lumineux de la flamme.	108
Figure 4.13	Contour lumineux de la flamme - vue de face.	109

Figure 4.14	Vecteurs vitesse de la flamme.	110
Figure 4.15	Coupes du contour de la température.	111
Figure 4.16	Coupe de la température passant par le centre du brûleur dans le plan horizontal - avec tubes carrés.	112
Figure 4.17	Coupe de la température passant par le centre du brûleur dans le plan horizontal - sans tubes.	113
Figure 4.18	Coupe de la température à la sortie de la banque de tubes - avec tubes carrés.	114
Figure 4.19	Coupe de la température à la sortie de la banque de tubes - sans tubes.	115
Figure 4.20	Coupe de la pression à travers les banques de tubes - avec tubes carrés.	116
Figure 4.21	Coupe de la pression à travers les banques de tubes - sans tubes.	117
Figure 4.22	Champ de vitesse autour de quelques tubes carrés.	118
Figure 4.23	Champ de vitesse autour de quelques tubes ronds.	119
Figure 4.24	Température autour de quelques tubes carrés.	120
Figure 4.25	Maillage d'un tube dans STAR-CD et maillage 1-D de BOILER- II.	123
Figure 4.26	Flux de chaleur total du mur gauche du foyer.	124
Figure 4.27	Flux de chaleur total d'une série de tubes de la banque de tubes.	125
Figure 4.28	Température du mur gauche du foyer.	126
Figure 4.29	Température de la paroi des tubes de la banque de tubes. . .	127
Figure 4.30	Débit massique dans les tubes du foyer.	130
Figure 4.31	Titre thermodynamique dans les tubes du foyer.	131
Figure 4.32	Titre le long d'un tube typique du foyer.	132
Figure 4.33	Fraction de vide dans un tube de la banque de tubes.	133

Figure 4.34	Fraction de vide dans les tubes du foyer.	134
-------------	---	-----

LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES

Équations de conservation et combustion

Caractères usuels

A_0	facteur de fréquence ou facteur pré-exponentiel
A_{total}	aire normale à la direction principale de l'écoulement dans la banque de tubes
A_{libre}	aire de la section de passage entre les tubes de la banque de tubes
$A_{R_{fu}}$	constante du modèle de combustion à taux de réaction fini
a_{ij}	nombre d'atomes de l'élément i dans l'espèce j
b_i	nombre d'atomes de l'élément i
C_1 et C_2	constantes pour la perte de charge dans les banques de tubes
C_3 et C_4	constantes pour le transfert de chaleur convectif dans les banques de tubes
C_5 et C_6	constantes pour le transfert de chaleur radiatif non-lumineux dans les banques de tubes
C_{gi}	constantes du terme source de l'équation de transport de g
C_{ϵ_i}	constantes; coefficients de fermeture du modèle $k-\epsilon$
C_μ	constante; coefficient de fermeture du modèle $k-\epsilon$
C_{TW}	constante; coefficient de transfert de chaleur corrigé
c_P	chaleur spécifique à pression constante
d_{ij}	tenseur du taux de déformation
D_H	diamètre hydraulique
E	énergie d'activation ou coefficient de rugosité
E_g	puissance émissive d'un corps noir
F	rapport combustible/air
f	taux de mélange
G	énergie libre de Gibbs

g	fluctuation turbulente du taux de mélange ou accélération gravitationnelle
h	enthalpie
h_{htw}	coefficient de transfert de chaleur corrigé pour des murs tubés
h_c	coefficient de transfert de chaleur déterminé par le code pour des murs plats ou les banques de tubes
h_{nt}	coefficient de transfert de chaleur de rayonnement non-lumineux
h_{corr}	coefficient de transfert de chaleur corrigé pour les banques de tubes
H	enthalpie totale
h_{R_i}	enthalpie de formation de l'espèce i
I	intensité de rayonnement
I_t	intensité de turbulence
k	énergie cinétique de turbulence
k_a	coefficient d'absorption
k_{b1}	constante de réaction inverse (NO_x)
k_{f1}	constante de réaction directe (NO_x)
k_s	constante spécifique de la réaction ou coefficient de dispersion
K_f	loi d'Arrhénius
l	longueur de mélange ou nombre d'atomes présents dans la réaction
M_i	masse molaire de l'espèce i
m_i	fraction massique de l'espèce i
N	nombre d'espèces chimiques dans la réaction
P	pression totale
P_k	production de l'énergie cinétique de turbulence
$P(f)$	fonction de densité de probabilité
Pr	nombre de Prandtl
p	pression
$\dot{q}_w$	flux de chaleur à la paroi
Q	chaleur échangée

R	constante universelle des gaz
R_{fu}	taux de réaction du combustible
R_{NO}	taux de réaction de l'oxyde d'azote
Re	nombre de Reynolds
S	entropie
S_ϕ	terme source de l'équation de transport de ϕ
S_{HC}	aire de la demi-surface tubée
S_{TW}	aire de la surface plane des murs tubés dans le foyer
s	coefficient stoechiométrique de la réaction ou distance en rayon- nement
T	température ou période en statistique
T^+	température universelle adimensionnelle; loi de paroi
T_{tube}	température des tubes dans les banques
t	temps
$\mathbf{U}$	vecteur vitesse
u	vitesse dans la direction x
u^*	vitesse de friction à la paroi
u^+	vitesse universelle adimensionnelle; loi de paroi
v	vitesse dans la direction y
y_P	distance du point P à la paroi
y^+	distance de référence; loi de paroi
w	vitesse dans la direction z

Caractères grecs

α	coefficient de perméabilité dans un milieu poreux
β	coefficient de perméabilité dans un milieu poreux
Γ_ϕ	coefficient de diffusion d'un scalaire quelconque ϕ
$\vec{\Omega}$	direction de l'intensité de rayonnement

γ	fonction scalaire
δ	fonction de Dirac
δ_{ij}	delta de Kroenecker
ϵ	taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence
ε	rapport air-combustible stoechiométrique molaire
ζ	concentration massique de combustible en excès ou en défaut de la stoechiométrie
κ	constante de von Karman
λ	facteur de proportionnalité; intensité de turbulence
λ_i	multiplicateur de Lagrange; relations de Gibbs
μ	viscosité laminaire
μ_{eff}	viscosité efficace
μ_i	potentiel chimique de l'espèce i
μ_t	viscosité turbulente
ν	nombre de moles
ρ	densité
σ_ϕ	nombre de Prandtl ou de Schmidt turbulent
τ_{ij}	tenseur de déformation
τ_w	taux de cisaillement à la paroi
ϕ	variable scalaire
φ	richesse du mélange
Ψ	fonction empirique; loi de paroi

Indices

A	dans le jet d'air
eff	valeur efficace due à la turbulence
F	dans le jet de combustible (Fuel)
fu	du combustible (fuel)

fu, b	du combustible brûlé
i	de l'élément chimique; Gibbs ou direction x, y ou z
$inerte$	gaz inerte
j	de l'espèce chimique ou direction x, y ou z
k	direction x, y ou z
mel	du mélange
ox	de l'oxydant
pr	des produits
st	aux conditions stoechiométriques
w	à la paroi

Symboles

∇	opérateur nabla
$-$	valeur moyenne; décomposition non pondérée par la masse
$\sim$	valeur moyenne; décomposition pondérée par la masse
$'$	fluctuation; décomposition non pondérée par la masse
$''$	fluctuation; décomposition pondérée par la masse
$ \quad $	grandeur d'un vecteur

Écoulement diphasique

Caractères usuels

A	section de passage
h	enthalpie
$\mathbf{n}$	vecteur normale
p	pression
$\tilde{q}$	flux de chaleur entre le mélange di-phasique et la paroi
q	flux de chaleur
v	vitesse
x	titre
E	énergie transférée entre les phases
M	transfert de quantité de mouvement entre les phases ou masse
u_r	vitesse relative entre les phases
u_m	vitesse axiale du mélange
p_m	pression du mélange
F_m	débit massique du mélange

Caractères grecs

τ	taux de cisaillement à la paroi
Γ	taux de production volumétrique net de vapeur résultant du changement de phase par unité de volume
α	fraction de vide
ρ	densité
ρ_m	densité du mélange

Indices

$\sim$	aux variables du mélange
l	phase liquide
m	mélange
v	phase vapeur
k	indice de phase

INTRODUCTION

Motivation

Avec l'avènement du protocole de Kyoto visant une réduction massive du niveau d'émission de polluants d'ici 2010 parmi les pays participants, les fabricants de chaudières, de brûleurs et d'équipements de combustion industrielle font face à de nouveaux enjeux qu'ils devront être en mesure de surmonter à moyen terme s'ils veulent pouvoir continuer à opérer sur le marché mondial. Dans la plupart des cas, le design des brûleurs et des chaudières devra être entièrement refait. Or, le design de telles installations a été basé jusqu'à présent sur des règles empiriques et selon un procédé d'essais et d'erreurs. Ces méthodes traditionnelles ne sont cependant pas à la hauteur pour relever ce nouveau défi. L'objectif principal de ce projet consiste donc à développer un nouvel outil de calcul permettant de mesurer l'impact d'un changement au design d'une des composantes du système sur l'opération de l'installation complète.

Une chaudière industrielle comporte plusieurs éléments dont les principaux sont le foyer, les banques de tubes, les brûleurs et les surchauffeurs. La simulation numérique d'une telle installation implique plusieurs phénomènes physiques complexes et étroitement couplés tels l'écoulement turbulent, le transfert de masse, la combustion, le transfert de chaleur convectif, radiatif, conjugué (murs, surchauffeurs, banques de tubes, etc), de même que l'écoulement diphasique dans les tubes à eau. Pour l'instant, les simulations numériques les plus précises ne traitent que d'une partie des composantes à la fois. Il est donc très difficile d'évaluer l'influence qu'aura la variation d'un paramètre donné sur la performance de toutes les composantes de l'installation. La raison de cette ségrégation des composantes est principalement liée aux limites des équipements informatiques et des modèles

physiques présentement disponibles. Le maillage nécessaire afin de traiter convenablement le transfert de chaleur conjugué dans les banques de tubes nécessiterait des ressources mémoire de l'ordre du téra-octet de RAM. De plus, les meilleurs codes de calculs développés par l'industrie nucléaire, capables de traiter un écoulement diphasique avec précision sont pour l'instant unidimensionnels, alors que les codes de calculs pour la mécanique des fluides et le transfert de chaleur sont tridimensionnels. Un certain niveau de modélisation des échangeurs de chaleur s'impose donc afin d'obtenir des simulations réalistes pour ces composantes et de tirer partie des outils de calculs les plus performants et précis. Le but visé est de pouvoir traiter des chaudières complètes avec un minimum de mémoire, soit quelques giga-octets de RAM.

Projet de recherche

Le présent projet vise donc à créer une interface entre les différents modules développés pour l'analyse précise de chacune des composantes afin d'en faire un outil complet capable de simuler simultanément toutes les composantes de la chaudière. Il s'agit d'un problème de taille impliquant le couplage de plusieurs méthodes de calcul différentes ainsi que le développement d'une stratégie d'analyse afin de pouvoir optimiser le design de telles installations. Il est important de spécifier qu'il ne s'agit pas ici de simplement faire en sorte que les codes puissent échanger mutuellement des données. En effet, la création de cette interface sous-entend surtout le développement de modèles physiques. Ces modèles permettront de transformer le transfert de chaleur surfacique (à la surface des tubes) en puits de chaleur ponctuels équivalents dans le code de simulation numérique des écoulements diphasiques BOILER-II.

La première étape consistera à se familiariser avec la théorie des écoulements diphasiques et le code de calcul d'écoulement diphasique 1-D BOILER-II pour

la circulation d'eau dans les chaudières industrielles développé par la firme BMA. Il s'agira ensuite de créer l'interface entre le logiciel de CFD commercial STAR-CD et BOILER-II pour les écoulements diphasiques permettant aux différents modèles d'interagir. La deuxième étape sera celle de la validation de la méthodologie de calcul en simulant des géométries simples comme par exemple un tube droit. Cette étape terminée, la validation se poursuivra sur des chaudières industrielles ayant des géométries complexes en comparant les résultats des simulations avec les mesures obtenues pour des installations existantes.

CHAPITRE 1

REVUE BIBLIOGRAPHIQUE

1.1 Généralités

On retrouve une quantité appréciable de documents fondamentaux traitant de la combustion en général tels Lewis et von Elbe (1961), Béer et Chigier (1972), Gardiner (1984), Williams (1985), Kuo (1986), Borghi et Destriau (1995) et Turns (1996). D'autres ouvrages sont plus appliqués à la simulation des écoulements réactifs comme Spalding (1979) traitant du transfert de masse dans les écoulements réactifs et Gosman et al. (1969) qui présente en détail un programme pour le calcul des écoulements réactifs. Certains manuels présentent une synthèse des modèles disponibles pour la simulation numérique des phénomènes de combustion dans les chaudières tels Khalil et al. (1977), Khalil (1982) et Dervieux et Larrouturou (1989). Il existe aussi plusieurs thèses à caractère numérique telles Nikjooy (1987), Kim (1987) et McKenty (1992) ou à caractère expérimental comme Eatough (1991). Les ouvrages de Libby et Williams (1980) et de Chung (1993) regroupent plusieurs articles traitant des divers aspects de la modélisation de la combustion. On trouve également dans des revues spécialisées les articles de Gosman et al. (1976), Lockwood (1977), Jones et Whitelaw (1982), Jones (1980), Khalil et al. (1975), Viollet (1986), Smooke et al. (1989a) et Maury et Libby (1995) qui font une synthèse de l'état de connaissances de la modélisation des phénomènes de combustion.

1.2 Introduction à la combustion

La combustion est définie comme une oxydation rapide générant de la chaleur et de la lumière ou une oxydation lente libérant une quantité de chaleur mais sans lumière. Seulement l'oxydation rapide est considérée, car c'est ce qui se passe en réalité dans les applications industrielles de grande puissance.

Dans les chaudières industrielles, les fours et les incinérateurs, la combustion implique plusieurs phénomènes physiques complexes qui interagissent entre eux. La combustion regroupe ainsi plusieurs disciplines soient la chimie, la thermodynamique, le transfert de chaleur, le transfert de masse et l'aérodynamique des flammes. C'est l'interdépendance entre ces différentes disciplines qui rend la simulation des phénomènes de combustion assez difficile à résoudre.

Les systèmes industriels de combustion sont classés selon deux types de flammes (de prémélange ou de diffusion) et trois types de combustibles (gazeux, liquides ou solides). Les combustibles liquides tel le mazout doivent être atomisés et les combustibles solides tel le charbon sont pulvérisés. Ces derniers types de combustibles ne seront pas étudiés dans cet ouvrage, mais les détails de la modélisation peuvent être vus dans Jones (1980) et Khalil (1982).

1.3 Flammes de prémélange

Lorsque le combustible et le comburant sont mélangés avant leur injection dans la zone de combustion, il s'agit d'une flamme de prémélange. On retrouve ce type de flamme dans des systèmes de chauffage domestique et dans des installations industrielles de faible puissance c'est-à-dire à moins de 300kW pour des raisons de sécurité (Monnot (1975)).

1.4 Flammes de diffusion

Il s'agit de flammes où le combustible et le comburant sont injectés séparément, le mélange se fait par convection et diffusion (Glassman (1977)). On retrouve ce genre de flamme dans les systèmes de combustion de grande puissance. Ces flammes sont presque toujours turbulentes sauf dans le cas de débits très faibles en atmosphère contrôlée (Monnot (1975)).

1.5 Écoulements turbulents à densité variable

Dans un écoulement turbulent, les fluctuations des quantités transportées telles la vitesse et les concentrations massiques ont des échelles de grandeur et de temps de l'ordre de celles de l'écoulement moyen. Ceci a pour effet que si le nombre de Reynolds est élevé, ces échelles seront plusieurs ordres de grandeur au-dessus de l'échelle à laquelle la diffusion moléculaire devient importante. Selon Jones (1980), pour un écoulement à nombre de Reynolds élevé, il n'est pas nécessaire d'inclure les effets du transport moléculaire dans les équations de transport.

1.5.1 Équations de conservation moyennées

En turbulence, l'écoulement est dominé par un caractère désordonné qui fait fluctuer toutes les propriétés du fluide de manière aléatoire. C'est d'ailleurs cet aspect aléatoire qui a dicté l'approche statistique de la turbulence et donné naissance à la décomposition de Reynolds (1895). Cela consiste à décomposer une variable instantanée selon sa valeur moyenne $\bar{\phi}$ et sa fluctuation ϕ' comme :

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (1.1)$$

Pour un écoulement à densité variable, les équations du champ dynamique et du champ scalaire sont couplées par la densité. Dans le cas où les variations de la densité sont provoquées par la combustion, des interactions turbulentes entre le mouvement fluctuant et la cinétique chimique interviennent également. Ce lien étroit entre les différentes grandeurs qui caractérisent le mouvement indique que les variations de densité influent à la fois sur le champ moyen et sur le champ turbulent.

Ainsi, pour tenir compte des effets de la variation de la densité, on utilise plutôt une décomposition pondérée par la masse selon Favre (1965). Cette moyenne est définie, pour une grandeur ϕ , comme suit :

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (1.2)$$

où

$$\tilde{\phi} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \frac{\rho \phi}{\bar{\rho}} dt \quad (1.3)$$

On utilise cette forme car l'interprétation physique de la quantité moyenne est

souvent plus directe et les équations de conservation sont plus simples. On trouvera une discussion plus détaillée sur les avantages et désavantages de cette décomposition dans Jones (1980) et Libby et Williams (1980).

En partant de cette décomposition, la forme tensorielle des équations pour un écoulement à nombre de Reynolds élevé sont (Khalil (1982)) :

Équation de continuité :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.4)$$

Équation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i - \frac{\partial}{\partial x_j} (\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''}) \quad (1.5)$$

avec

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k}$$

et les flux $\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''}$ sont appelés tensions de Reynolds.

Équation de conservation d'un scalaire :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\phi}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\phi}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \Gamma_\phi \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\widetilde{\bar{\rho} u_j'' \phi''}) + \bar{\rho} \tilde{S}_\phi \quad (1.6)$$

1.5.2 Modèle de turbulence

Les corrélations de la forme $\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''}$ sont appelées tensions de Reynolds. Elles représentent l'apport de quantité de mouvement dû à la turbulence. Ces corrélations de deuxième ordre s'expriment par d'autres corrélations d'ordre trois et

ainsi de suite, créant une infinité d'équations. On appelle ce dilemme le problème de fermeture qui nécessite l'utilisation de modèles de turbulence.

La modélisation des tensions de Reynolds s'effectue grâce au concept de viscosité turbulente introduit par Boussinesq (1877). Ce concept stipule que les contraintes turbulentes sont alignées sur le tenseur des taux de déformation de l'écoulement moyen suivant une constante de proportionnalité appelée viscosité turbulente :

$$\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''} = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} \delta_{ij} k + \frac{2}{3} \bar{\rho} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \quad (1.7)$$

$$\widetilde{\bar{\rho} u_j'' \phi''} = -\frac{\mu_t}{\sigma_\phi} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j} \quad (1.8)$$

Dans ce modèle, k est l'énergie cinétique de turbulence :

$$k = \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_j''} \quad (1.9)$$

et μ_t est la viscosité turbulente qui s'écrit dans le cadre du modèle $k-\epsilon$ comme :

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (1.10)$$

où ϵ est le taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence tel que :

$$\epsilon = C_\mu \frac{k^{\frac{3}{2}}}{l} \quad (1.11)$$

Ce modèle est le modèle $k-\epsilon$ standard de Jones et Launder (1972). Bien que ce modèle n'est pas le plus précis, il demeure néanmoins le plus économique à cause de son rapport temps de calcul sur la précision des résultats. En effet, ses prédictions

sont dans la plupart des cas satisfaisantes (Chieng et Launder (1980), Reggio et al. (1987) et Maury et Libby (1995)).

En dépit des difficultés reliées à la simulation des écoulements à forts taux de cisaillement ou dans de fortes zones de recirculation où la viscosité turbulente n'est plus isotrope, l'utilisation de modèles plus complexes et plus coûteux demeure injustifiable dans le contexte d'une approche industrielle (Gosman et al. (1976)).

1.5.3 Loi de paroi

Les effets d'une paroi sur un écoulement turbulent sont nombreux et complexes. Au voisinage de la paroi, la turbulence revêt un caractère fortement anisotrope et non homogène. Les échelles de longueur sont réduites, les gradients sont intenses et il y a création d'une zone adjacente à la paroi dans laquelle la viscosité moléculaire domine.

Le calcul détaillé de ce genre de comportement nécessite l'introduction de nombreux points de discrétisation. Une méthode pratique pour pallier cet inconvénient est de faire un raccordement à une loi universelle. Dans les cas usuels de couche limite sur plaque plane, la loi logarithmique de vitesse est utilisée (Patankar et Spalding (1970)). Dans les cas plus généraux, avec recirculation, ou dans les écoulements tridimensionnels le problème n'est pas résolu de manière satisfaisante étant donné qu'il n'existe plus de loi universelle.

L'approche des lois de paroi est donc une approche économique. Elle permet de réduire le nombre de points de calcul le long de la paroi. Elle a surtout été adaptée dans le cadre des méthodes des volumes finis. Schiestel (1993) et Wilcox (1993) présentent une étude complète des différentes formulations de la loi de paroi.

Le profil de vitesse pour cette loi universelle est divisé en trois zones. On distingue une zone visqueuse, une zone de transition et une zone de loi logarithmique.

1.6 Modèle numérique

Le premier outil de simulation numérique de la combustion a été celui de Gosman et al. (1969). Leur modèle numérique est basé sur la méthode des volumes finis et utilise une formulation vorticité-courant ayant son lot de problèmes : diffusion numérique et restriction aux géométries simples. Les modèles numériques subséquents furent basés sur l'algorithme SIMPLE de Patankar et Spalding (1972) qui a permis l'usage d'une formulation en variables primitives (u, v, w, p) et a été largement utilisé par la suite dans la simulation numérique de la combustion. Toutefois, l'algorithme SIMPLE appliqué à des maillages cartésiens nécessite l'utilisation de maillages décalés pour éviter les problèmes de pression en damier (Patankar (1980)).

1.7 Modèles de combustion

L'oxydation d'un combustible est un phénomène complexe entraînant une libération de la chaleur et la formation d'espèces chimiques. Le modèle de combustion est une description mathématique approximative du phénomène. Le rôle du modèle de combustion est principalement d'évaluer le taux de formation des espèces dans les produits de combustion, de permettre le calcul de la température moyenne du fluide et de la densité du mélange.

Soit un scalaire ϕ dans un écoulement turbulent, la valeur instantanée de ce scalaire

peut être décomposée selon sa valeur moyenne et sa valeur de fluctuation comme :

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (1.12)$$

La valeur moyenne de ϕ est donnée par :

$$\tilde{\phi} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \frac{\rho\phi}{\bar{\rho}} dt \quad (1.13)$$

L'équation de transport par un champ de vitesse $\vec{u}$ de la propriété scalaire $\tilde{\phi}$ s'écrit (Khalil (1982)) :

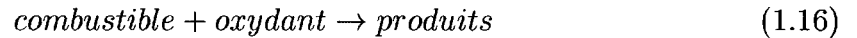
$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\phi}) = \frac{\partial}{\partial x_j}\Gamma_\phi \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}(-\widetilde{\bar{\rho}u_j''\phi''}) + \bar{\rho}\tilde{S}_\phi \quad (1.14)$$

où Γ_ϕ est le coefficient de diffusion d'un scalaire quelconque ϕ .

Le terme $\tilde{S}_\phi$ représente le taux de génération ou de destruction du scalaire $\tilde{\phi}$. Dans le cas où $\tilde{\phi}$ représente $\tilde{m}_{fu}$ (fu pour fuel), la concentration massique du combustible, on aura $\tilde{S}_\phi = \tilde{R}_{fu}$. Le taux de consommation du combustible R_{fu} peut s'exprimer selon Kondratiev (1964) comme :

$$R_{fu} = f(T, P, concentrations) \quad (1.15)$$

pour un mécanisme de réaction tel que :



Le combustible dans ce cas-ci peut représenter une espèce initiale ou intermédiaire provenant d'une réaction précédente.

Le taux de réaction R_{fu} est contrôlé par un mécanisme d'interaction entre une

molécule de combustible et une molécule d'oxydant. La loi d'action de masse stipule que le taux de collisions atomiques ou moléculaires est proportionnel au nombre d'espèces en collision par unité de volume. Ce qui revient à dire que pour une température donnée le nombre de collisions est proportionnel aux concentrations des réactifs dans le mélange, ainsi :

$$R_{fu} = K_f m_{fu} m_{ox} \quad (1.17)$$

L'influence de la température sur le taux de réaction est donnée par la loi d'Arrhenius (1889).

$$K_f = A_0 e^{-E/RT} \quad (1.18)$$

où A_0 est appelé facteur de fréquence et E représente l'énergie d'activation.

Le principal problème relié à l'utilisation de cette loi réside dans la non-linéarité qui apparaît lorsqu'il s'agit de modéliser l'influence de la turbulence sur la réaction chimique. En effet, le calcul du taux de réaction moyen $\tilde{R}_{fu}$ se fait en fonction des valeurs instantanées m_{fu} , m_{ox} et T et non à partir des valeurs moyennes $\tilde{m}_{fu}$, $\tilde{m}_{ox}$, $\tilde{T}$ et $\bar{\rho}$, car cela conduirait, selon Jones et Whitelaw (1982), à des erreurs considérables, donc :

$$\tilde{R}_{fu} \neq R_{fu}(\tilde{m}_{fu}, \tilde{m}_{ox}, \tilde{T}) \quad (1.19)$$

Le taux de réaction instantané s'exprime en fonction des grandeurs moyennes et des fluctuations comme suit :

$$R_{fu} = (\tilde{K}_f + K_f'')(\tilde{m}_{fu} + m_{fu}'')(\tilde{m}_{ox} + m_{ox}'') \quad (1.20)$$

Après quelques manipulations algébriques, on peut exprimer le taux de réaction

comme :

$$R_{fu} = A_0 \bar{\rho}^2 \tilde{m}_{fu} \tilde{m}_{ox} e^{-E/R\tilde{T}} (1 + \Upsilon) \quad (1.21)$$

où

$$\Upsilon = a_0 \frac{\overline{m''_{fu} m''_{ox}}}{\tilde{m}_{fu} \tilde{m}_{ox}} + a_1 \frac{\overline{T''^2}}{\tilde{T}^2} + a_2 \left(\frac{\overline{T'' m''_{fu}}}{\tilde{T} \tilde{m}_{fu}} + \frac{\overline{T'' m''_{ox}}}{\tilde{T} \tilde{m}_{ox}} \right) \quad (1.22)$$

avec

$$a_0 = 1 \quad a_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{E}{R\tilde{T}} \right)^2 - \frac{E}{R\tilde{T}} \quad a_2 = \frac{E}{R\tilde{T}} \quad (1.23)$$

Υ est un terme extrêmement non-linéaire qui représente l'influence de la turbulence sur le taux de réaction moyen (Khalil (1982)).

L'équation (1.22) contient des termes non-linéaires qui sont très difficiles à modéliser. Pour compliquer davantage le problème, on sait que la combustion d'un hydrocarbure typique implique quelque 200 espèces intermédiaires. La résolution de ce problème en tenant compte de toutes ces espèces nécessiterait la solution d'une équation de transport par espèce ainsi que l'évaluation du taux de réaction moyen pour chacune de ces espèces, ce qui demanderait des ressources informatiques importantes. C'est d'ailleurs dans le but de surmonter ou de contourner les difficultés engendrées par la modélisation du terme Υ que les divers modèles de combustion ont été élaborés.

1.7.1 Modèle à chimie infiniment rapide

Le modèle à chimie infiniment rapide suppose que la réaction est tellement rapide par rapport aux mécanismes de mélange que le combustible et l'oxydant ne peuvent

coexister au même endroit et que les réactifs réagissent aussitôt qu'ils sont mélangés.

À partir de cette hypothèse, l'état thermochimique du mélange peut être déterminé en fonction d'une variable scalaire strictement conservée, sans terme source, car il n'est plus nécessaire d'évaluer le taux de réaction. En supposant que toutes les espèces chimiques ont des coefficients de diffusion égaux, on définit selon Khalil (1982), le taux de mélange moyen $\tilde{f}$ comme :

$$\tilde{f} = \frac{\tilde{\zeta} - \zeta_A}{\zeta_F - \zeta_A} \quad (1.24)$$

où

$$\tilde{\zeta} = \tilde{m}_{fu} - \frac{\tilde{m}_{O_2}}{s} \quad (1.25)$$

et s : le coefficient stoechiométrique de la réaction.

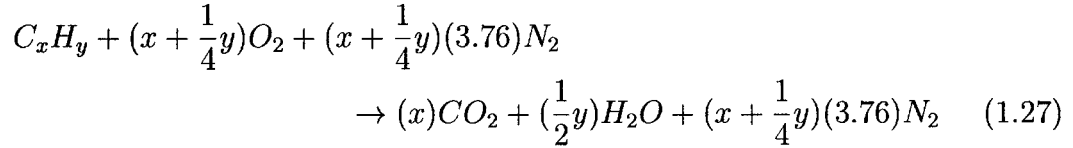
L'équation de transport de $\tilde{f}$ est donné par :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{f})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{f}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \Gamma_f \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \quad (1.26)$$

Les fractions massiques des espèces chimiques en présence sont déterminées à partir de la connaissance de $\tilde{f}$.

Pour ce modèle, la réaction se fait toujours selon des proportions stoechiométriques complètes des réactants. S'il y a un excès de combustible, tout l'oxygène sera consommé et il restera du combustible dans les produits. S'il y a un excès d'air, tout le combustible sera consommé et il restera de l'oxygène dans les produits. La

réaction stoechiométrique pour un hydrocarbure typique est toujours :



L'avantage de cette méthode réside dans sa facilité et sa rapidité de convergence puisque l'équation de transport du taux de mélange ne contient pas de terme source. Elle permet de déterminer les principales espèces de la réaction, de calculer un champ de température réaliste en plus de prédire la forme et la longueur de la flamme. Elle permet aussi de donner l'allure de l'écoulement, et ce à un coût relativement bas. C'est le modèle le plus simple.

Ce modèle ne tient pas compte de la dissociation et permet seulement l'existence des espèces CO_2 et H_2O dans les produits. On néglige aussi les fluctuations de f , ce qui suppose que le combustible et l'oxydant ne peuvent coexister au même endroit pour un instant donné. Cela constitue une simplification considérable du phénomène, mais permet une convergence rapide de la solution.

Ce modèle fut utilisé par Spalding (1971b), Lockwood et Naguib (1975), Bilger (1975), Williams (1985) et McKenty (1992) dans la prédiction de flammes de diffusion en excès d'air. Des erreurs considérables sur la prédiction de la température et du champ de vitesse dans la zone de réaction ont été remarquées, car le modèle ne tient pas compte des fluctuations de f (Khalil (1982)).

1.7.2 Pondération par fonction de densité de probabilité

Cette section introduit l'effet des fluctuations sur le taux de mélange f . Pour ce faire, on introduit un opérateur de moyenne statistique qui nécessite la connaissance

d'une fonction de densité de probabilité que l'on dénote $\tilde{P}(\phi)$. En général, la valeur moyenne d'une quantité scalaire ϕ est définie par :

$$\tilde{\phi} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi \tilde{P}(\phi) d\phi \quad (1.28)$$

Puisque f varie entre 0 et 1, on obtient alors:

$$\tilde{f} = \int_0^1 f \tilde{P}(f) df \quad (1.29)$$

et pour toute autre quantité scalaire $\gamma(f)$ la valeur moyenne est exprimée comme :

$$\tilde{\gamma} = \int_0^1 \gamma(f) \tilde{P}(f) df \quad (1.30)$$

La fonction de densité de probabilité de f doit satisfaire les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} \tilde{P}(f) &\geq 0 & 0 \leq \tilde{f} \leq 1 \\ \tilde{P}(f) &= 0 & \tilde{f} < 0, \tilde{f} > 1 \end{aligned} \quad (1.31)$$

La solution du problème consiste à calculer la fonction de densité de probabilité $\tilde{P}(f)$. La forme exacte de la fonction de densité de probabilité n'étant pas connue, la solution la plus simple consiste à se donner a priori une forme de $\tilde{P}(f)$ en ajustant en chaque point les paramètres de cette loi en supposant que la moyenne $\tilde{f}$ et sa variance $g = \widetilde{f'^2}$ sont connues.

La valeur locale de g est obtenue à partir de la solution de son équation de transport :

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_i g) = \frac{\partial}{\partial x_i} \Gamma_g \frac{\partial g}{\partial x_i} + C_{g1} \mu_{eff} \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \right)^2 - C_{g2} \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} g \quad (1.32)$$

Le terme de gauche représente le taux de convection. Le premier terme de droite est la diffusion turbulente de g , le deuxième terme de droite représente la production de fluctuations de concentration à cause de la non-uniformité du mélange et le dernier terme représente la dissipation des fluctuations due à la diffusion moléculaire. Les coefficients C_{g1} et C_{g2} sont des constantes (Khalil (1982)).

Plusieurs formes de $\tilde{P}(f)$ ont été suggérées comme les fonctions Delta de Spalding (1971a), la loi gaussienne tronquée de Lockwood et Naguib (1975) ou la fonction Beta de Richardson et al. (1953) qui est recommandée par Jones (1980) et appuyée par les résultats expérimentaux de Rhodes (1975).

La fonction de densité de probabilité de forme beta est donnée par :

$$\tilde{P}(f) = \frac{f^{a-1}(1-f)^{b-1}}{\int_0^1 f^{a-1}(1-f)^{b-1} df} \quad (1.33)$$

où

$$a = \tilde{f} \left(\frac{\tilde{f}(1-\tilde{f})}{g} - 1 \right) \quad et \quad b = \frac{(1-\tilde{f})}{g} a$$

Pope (1976) et Lewis et Moss (1978) ont proposé d'utiliser une équation de transport pour $\tilde{P}(f)$, mais cette approche est extrêmement coûteuse et est surtout utilisée pour la simulation de flammes de pré-mélange.

La pondération par fonction de densité de probabilité donne une meilleure approximation des vitesses et des températures (Khalil (1982)). Elle permet à l'air et au combustible d'exister au même endroit, mais à des instants différents. On obtient ainsi un champ de vitesse de l'écoulement plus réaliste. Cette procédure de pondération peut être utilisée pour tous les modèles de combustion où le mécanisme de réaction peut être déduit entièrement à partir de la connaissance du taux de mélange.

1.7.3 Modèle à taux de réaction fini

Le modèle à chimie infiniment rapide sous-estime la consommation de combustible brûlé et ne permet pas l'existence d'espèces autres que CO_2 et H_2O . Par conséquent, un modèle à taux de réaction fini permettant une meilleure estimation du combustible brûlé a été introduite par Hjertagger et Magnussen (1982). Ce modèle est basé sur le modèle d'*Eddy BreakUp* de Spalding (1971a) pour les flammes turbulentes pré-mélangées.

Hjertagger et Magnussen (1982) ont proposé un modèle où il s'agit de résoudre deux équations de transport, l'une pour f et l'autre pour $\tilde{m}_{fu}$. Le taux de réaction moyen $\tilde{R}_{fu}$ est modélisé comme suit :

$$\tilde{R}_{fu} = -\frac{\tilde{m}_{fu,b}}{\tilde{m}_{fu} + \tilde{m}_{fu,b}} A_{R_{fu}} \frac{\epsilon}{k} \cdot \min \left| \tilde{m}_{fu}, \frac{\tilde{m}_{O_2}}{s} \right| \quad (1.34)$$

où $A_{R_{fu}}$ est une constante empirique dépendante de la nature de l'écoulement.

Bien que ce modèle ne permette pas l'existence d'espèces secondaires, il donne toutefois une meilleure approximation du combustible brûlé dans la zone de réaction que le modèle à chimie infiniment rapide non pondéré.

1.7.4 Modèle d'équilibre chimique

Le modèle de chimie infiniment rapide est limité à la prédiction de CO_2 et H_2O et ne tient pas compte de la dissociation. Il fait aussi appel à des modèles thermodynamiques simplifiés. Ceci entraîne une surestimation des températures et des concentrations de CO_2 et H_2O et néglige la formation du monoxyde de carbone.

Pour remédier à ces lacunes, une alternative au modèle de chimie infiniment rapide

est proposée. Elle consiste à faire l'hypothèse que les réactions chimiques de combustion sont suffisamment rapides pour que l'équilibre chimique soit atteint localement. Le modèle permet de calculer cet équilibre et d'en déduire les concentrations des espèces, la température et la densité.

Il existe plusieurs approches pour calculer l'équilibre chimique d'un système en réaction. La méthode la plus simple est basée sur les constantes d'équilibre. Cependant, cette méthode devient très fastidieuse lorsque le nombre d'espèces chimiques et de réactions chimiques impliquées dans la réaction devient important. Il faut alors utiliser une méthode de calcul basée sur les propriétés thermodynamiques des espèces chimiques qui la rend indépendante du mécanisme de réaction (nombre de réactions impliquées). La méthode de calcul de l'équilibre chimique la plus fiable est, selon Jones et Whitelaw (1982), basée sur la minimisation de l'énergie libre de Gibbs. Une bonne partie des auteurs (Kent et Bilger (1976), Jones et Whitelaw (1984) et Weng et Chen (1988)) utilisent le programme de Gordon et McBride (1971). Heywood (1986) et Ferguson (1986) donnent une bonne description de cette méthode.

L'approche consiste à utiliser le modèle à chimie infiniment rapide pour calculer les concentrations des réactants. On calcule ensuite l'équilibre chimique avec la méthode de son choix. Ce modèle peut être utilisé tel quel ou en introduisant une fonction de densité de probabilité de f qui permettra de tenir compte de la fluctuation de f . La méthode de l'équilibre chimique peut fournir en plus un calcul des espèces O , OH , H et permet une meilleure précision sur le calcul de la température et des espèces majoritaires.

1.7.5 Modèle des micro-flammes

Dans ce modèle, la flamme de diffusion turbulente est modélisée par un ensemble de flammelettes laminaires. Selon Bray (1976), les flammes de diffusion turbulentes ne constituent pas un mélange homogène de réactifs, mais plutôt un ensemble de flammelettes de mélange pauvre et riche séparées par une mince zone de diffusion-réaction. Ces minces zones de réaction sont appelées micro-flammes.

Williams (1975) fut un des premiers à explorer ce modèle. Le principe du modèle consiste à effectuer des calculs de flamme de diffusion laminaire avec une chimie détaillée pour générer une librairie dans laquelle les fractions massiques et la température sont données en fonction du taux de mélange f . Liew et al. (1981) ont constitué leur librairie à partir des mesures expérimentales sur les flammes laminares de Mitchell et al. (1980) pour la combustion du méthane dans l'air. Askari-Sardhai et al. (1985) et Peters et Kee (1987) ont constitué leurs librairies de combustion par un calcul complexe de l'équilibre partiel.

McKenty (1992) a établi une librairie pour son modèle de micro-flammes en développant des corrélations basées sur les données expérimentales de Mitchell et al. (1980) et Smooke et al. (1989b). Ces expériences ont été effectuées sur des flammes laminares de méthane dans l'air. Ce modèle étant basé sur des flammes laminares, il n'y a pas d'influence de la turbulence sur le taux de réaction ou sur la structure de la flamme. Ainsi, l'hypothèse que la distribution des espèces n'est fonction que du taux de mélange est parfaitement plausible. Les fractions massiques sont calculées à partir du taux de mélange moyen. Ensuite, connaissant l'enthalpie moyenne du mélange, on itère sur la température jusqu'à ce que l'équation (1.35) soit satisfaite.

$$\tilde{h} = \int_{T_0}^{\tilde{T}} \left(\sum_{i=1}^N \tilde{c}_{P,i} \tilde{m}_i \right) d\tilde{T} + \sum_{i=1}^N h_{R,i} \tilde{m}_i \quad (1.35)$$

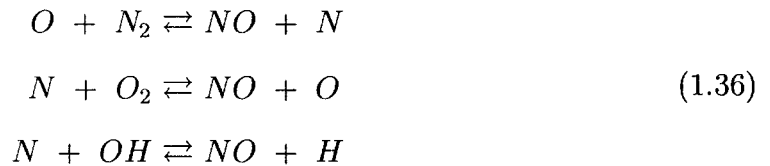
On peut inclure les effets de la turbulence en introduisant des fonctions de densité de probabilité. Ce modèle donne de meilleures prédictions que le modèle d'équilibre chimique pour le cas du CO et du H_2 , mais son application demeure limitée aux cas utilisant le même combustible avec lequel la librairie de micro-flammes a été constituée.

1.8 Formation de NO_x

Dans cette section, on discutera de la formation des oxydes d'azote (NO_x) puisqu'il s'agit d'un polluant important. Les NO_x se retrouvent souvent en très faibles quantités par rapport aux réactifs, ils n'affectent donc pas significativement la cinétique de réaction.

Deux formes principales de NO_x sont le plus souvent formées lors de la combustion soient l'oxyde d'azote NO et le bioxyde d'azote NO_2 . En général, on ne tient compte que du NO puisqu'il représente la majorité des NO_x .

À de hautes températures ($>1800K$) et pour des conditions près de la stoechiométrie, la formation de NO est décrite par le mécanisme de Y. B. Zeldovich et Frank-Kamenetskii (1974) :



Le taux de réaction pour l'équation de transport de NO est alors donné par :

$$\tilde{R}_{NO} = \bar{\rho}^2 \tilde{m}_{NO} \left[k_{f1} \frac{m_O}{\tilde{m}_O} \frac{m_{N_2}}{\tilde{m}_{N_2}} - k_{b1} \frac{m_{NO}}{\tilde{m}_{NO}} \frac{m_N}{\tilde{m}_N} \right] \tag{1.37}$$

où k_{f_1} et k_{b_1} sont respectivement les constantes de réactions directes et inverses. Les concentrations de O et de N sont déduites des hypothèses d'équilibre.

1.9 Écoulements diphasiques

Le présent ouvrage ne porte pas sur la simulation des écoulements diphasiques en tant que tel, car il s'agit là d'un domaine portant sur des phénomènes physiques extrêmement complexes dont la compréhension fine ferait l'objet d'une thèse de doctorat en soi. Cependant, l'étude de la performance des chaudières industrielles nécessite l'étude simultanée des côtés feu et eau de la chaudière puisque son but premier est avant tout la production de vapeur.

Les parois de la chambre de combustion d'une chaudière sont constituées de tubes à eau dont le contenu, un mélange eau-vapeur, absorbe l'énergie qui est transmise des produits de combustion aux parois par convection et rayonnement. Ces parois tubées constituent les frontières du domaine de la simulation de la chambre de combustion. Par conséquent, pour simuler correctement le transfert de chaleur à l'intérieur de l'enceinte, il faut tenir compte aussi précisément que possible des conditions de température et de flux de chaleur aux parois. Ceci n'est possible qu'en incluant les effets de l'écoulement diphasique.

La simulation de la partie diphasique sera donc assurée en faisant l'interface entre le code de calcul commercial modifié (STAR-CD + CMBLIB) au code d'écoulement diphasique spécialisé BOILER-II qui fonctionnera comme une «boîte noire». Cependant, il est tout de même indiqué de donner au lecteur un aperçu des modèles utilisés par ce programme.

1.9.1 Méthodologie et modèles d'écoulements diphasiques

Pour obtenir un ensemble d'équations représentatives des phénomènes d'écoulements diphasiques, les équations locales instantanées pour la conservation de la masse, du mouvement et de l'énergie doivent être moyennées afin d'éliminer les discontinuités rencontrées aux interfaces entre les phases. Plusieurs méthodes sont proposées pour effectuer cette opération de moyenne : la méthode temporelle de Ishii (1975), les méthodes spatiales de Vernier et Delhaye (1968) ou encore celle de Kocamustafaogullari (1971).

Les avantages et les désavantages de chacune de ces formes de moyenne ont été discutés et analysés en détail dans la littérature scientifique. Ces discussions bien qu'entièrement valables dans leur contexte respectif ne sont pas pertinentes dans le cadre de cet ouvrage. Les chaudières industrielles constituent des systèmes complexes comprenant diverses composantes tels les tuyaux ascendants et descendants, les ballons de vapeur, les distributeurs, les séparateurs à cyclone ainsi que plusieurs centaines de mètres de tuyauterie pour n'en énumérer que quelques-unes. Étant donné le niveau de détails très élevé de ces systèmes, leur opération ne peut être prédite adéquatement qu'en utilisant de très gros codes informatiques qui ne permettent qu'une représentation simplifiée du système réel. Par conséquent, un modèle mathématique simple, mais permettant tout de même une bonne représentation physique des phénomènes en jeu doit être utilisé. À cause des diverses hypothèses formulées quant à la nature de l'écoulement diphasique, les modèles cités précédemment représentent la physique du problème de façon plus ou moins complexe.

La description la plus simple d'un écoulement diphasique est le modèle d'équilibre homogène unidimensionnel (homogeneous equilibrium model : HEM). Ces modèles sont décrits suivant la nomenclature suivante 1V1T (1 vitesse, 1 température),

1VDF2T (1 écart de vitesses , 2 températures), 1VS2T (1 vitesse de glissement, 2 températures) ou 2V2T (2 vitesses, 2 températures). Le tableau 1.1 (Delhayé et al. (1981)) donne une liste des modèles, des restrictions qui s'y rattachent, de même que le nombre de relations additionnelles nécessaires à chaque modèle. Le tableau 1.2 (Delhayé et al. (1981)) répertorie les caractéristiques de chaque modèle ainsi que des autres variables dépendantes à être calculées.

Tableau 1.1: Modèles d'écoulement diphasique.

Désignation du modèle	Restrictions		Nombre d'équations de conservation			Nombre d'équations pour l'interface	Relations Constitutives	
	No.	Imposé sur	Masse	Mouvement	Énergie		No.	type
1V1T	3	$v_v = v_l, h_l, h_v$	1	1	1	0	2	$\tilde{\tau}, \tilde{q}$
1VS1T	3	$v_v / v_l, h_l, h_v$	1	1	1	0	3	$\tilde{\tau}, \tilde{q}, v_v / v_l = \text{slip}$
1VDF1T	3	$v_v - v_l, h_l, h_v$	1	1	1	0	3	$\tilde{\tau}, \tilde{q}, v_r = v_v - v_l$
$1VT_k T_{SAT}$	2	$v_v = v_l, h_l$	1	1	2	1	3	$\tilde{\tau}, \tilde{q}, q_v, E$
$1VST_k T_{SAT}$	2	$v_v / v_l, \text{or}$	1	1	2	1	4	$\tilde{\tau}, \tilde{q}, v_v / v_l, E$
$1VDFT_k T_{SAT}$	2	$v_v - v_l, h_v$	2	1	1	1	4	$\tilde{\tau}, \tilde{q}, \Gamma, v_r$
2V1T	2	h_l, h_v	1	2	1	1	4	$\tau_l, \tau_v, \tilde{q}, M$
1V2T	1	$v_v = v_l$	2	1	2	2	5	$\tilde{\tau}, q_l, q_v, \Gamma, E$
1VDF2T	1	v_v / v_l	2	1	2	2	6	$\tilde{\tau}, q_l, q_v, v_r, E$
$2VT_k T_{SAT}$	1	$h_l \text{ or } h_v$	2	2	1	2	5	$\tau_l, \tau_v, \tilde{q}, \Gamma, M$
$2VTF_k T_{SAT}$	1	$h_l \text{ or } h_v$	1	2	2	2	6	$\tau_l, \tau_v, \tilde{q}, q_k, M, E$
2V2T	0	None	2	2	2	3	7	$\tau_l, \tau_v, q_l, q_v, \Gamma, M, E$

Tableau 1.2: Caractéristiques des modèles d'écoulement diphasique.

Désignation du modèle	Caractéristiques	Variables dépendantes
1V1T 1VS1T 1VDF1T	Homogène, équilibre thermique (HEM) Glissement, équilibre thermique À écart de vitesses, équilibre thermique	$p, \tilde{v}, \alpha$ $p, \tilde{v}, \alpha$ $p, \tilde{v}, \alpha$
$1VT_k T_{SAT}$ $1VST_k T_{SAT}$ $1VDFT_k T_{SAT}$ 2V1T	Homogène, non-équilibre partiel Glissement, non-équilibre partiel À écart de vitesses, non-équilibre partiel À deux fluides, équilibre thermique	$p, \tilde{v}, \alpha, h_l \text{ or } h_v$ $p, \tilde{v}, \alpha, h_l \text{ or } h_v$ $p, \tilde{v}, \alpha, h_l \text{ or } h_v$ p, v_l, v_v, α
1V2T 1VDF2T $2VT_k T_{SAT}$	Homogène, non-équilibre thermique À écart de vitesses, non-équilibre thermique À deux fluides, non-équilibre partiel	$p, \tilde{v}, \alpha, h_l, h_v$ $p, \tilde{v}, \alpha, h_l, h_v$ $p, v_l, v_v, \alpha, h_l \text{ or } h_v$
2V2T	À deux fluides, non-équilibre thermique	$p, v_l, v_v, \alpha, h_l, h_v$

Le modèle HEM traite le mélange eau-vapeur comme un seul pseudo-fluide ayant une vitesse, une température (saturation) et des propriétés moyennes déterminées à partir de la fraction massique de vapeur dans le mélange. En employant la

nomenclature mentionnée ci-dessus, la désignation de ce modèle serait 1V1T.

À cause des débits respectifs des phases liquide et gazeuse, différents régimes d'écoulements se développeront. Ils sont schématisés aux figures 1.1 et 1.2 pour des écoulements verticaux et horizontaux respectivement. De plus, ces régimes d'écoulement peuvent être divisés en trois grandes classes : les écoulements séparés (divisés) qui comprennent les écoulements annulaires et stratifiés, les écoulements mixtes ou de transition qui comprennent les écoulements par bouchon et annulaires avec filaments de liquide et finalement les écoulements dispersés tels que les écoulements par bulles et par gouttelettes.

En réalité, le seul régime d'écoulement pouvant être décrit au moyen d'une seule vitesse et d'une seule température est un écoulement par bulle ayant un débit élevé de sorte que la vitesse relative ne représente qu'une petite fraction des vitesses de phase (Webb et Rowe (1986)).

Dans la plupart des cas, les deux phases sont mélangées incorrectement et chaque phase tend à se déplacer à sa propre vitesse. De plus, les deux phases peuvent ne pas être en équilibre. Par exemple, les phases liquide et vapeur ne seront pas à la même température pour l'ébullition sous-refroidie ou un écoulement de vapeur surchauffée. Le seul modèle capable de décrire complètement ce phénomène physique est le modèle 2V2T. On commence à voir l'apparition de ce modèle dans les codes informatiques utilisés pour les études de sécurité des réacteurs nucléaires. Cependant, beaucoup de développement théorique et expérimental restent à faire pour obtenir des modèles qui représentent adéquatement les mécanismes de transfert aux interfaces liquide-vapeur.

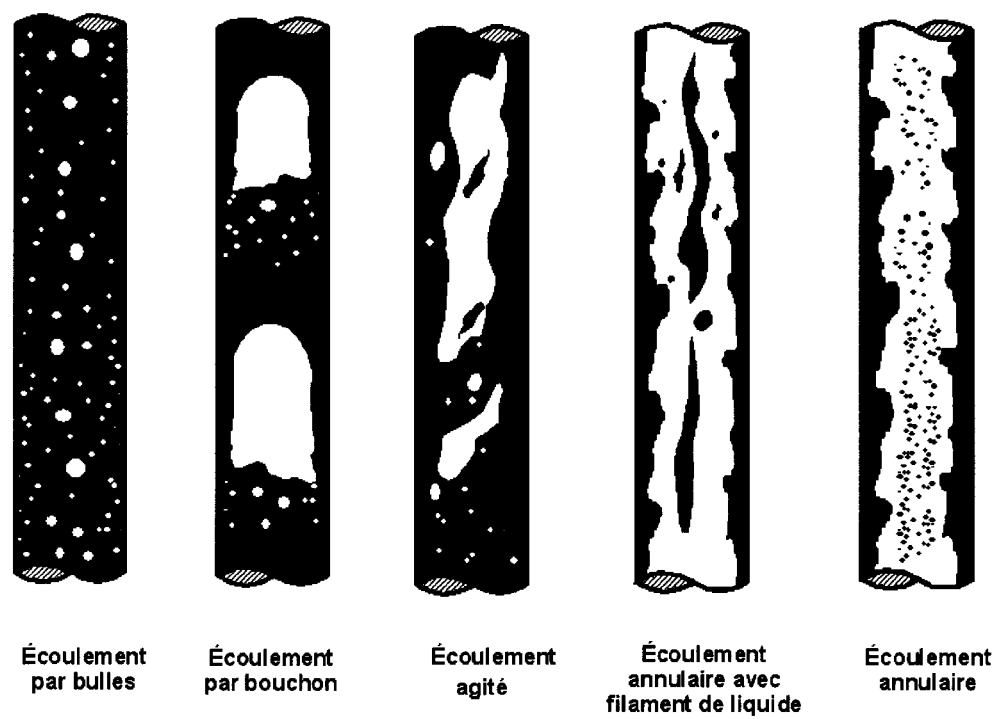


Figure 1.1: Régimes d'écoulements diphasiques verticaux.

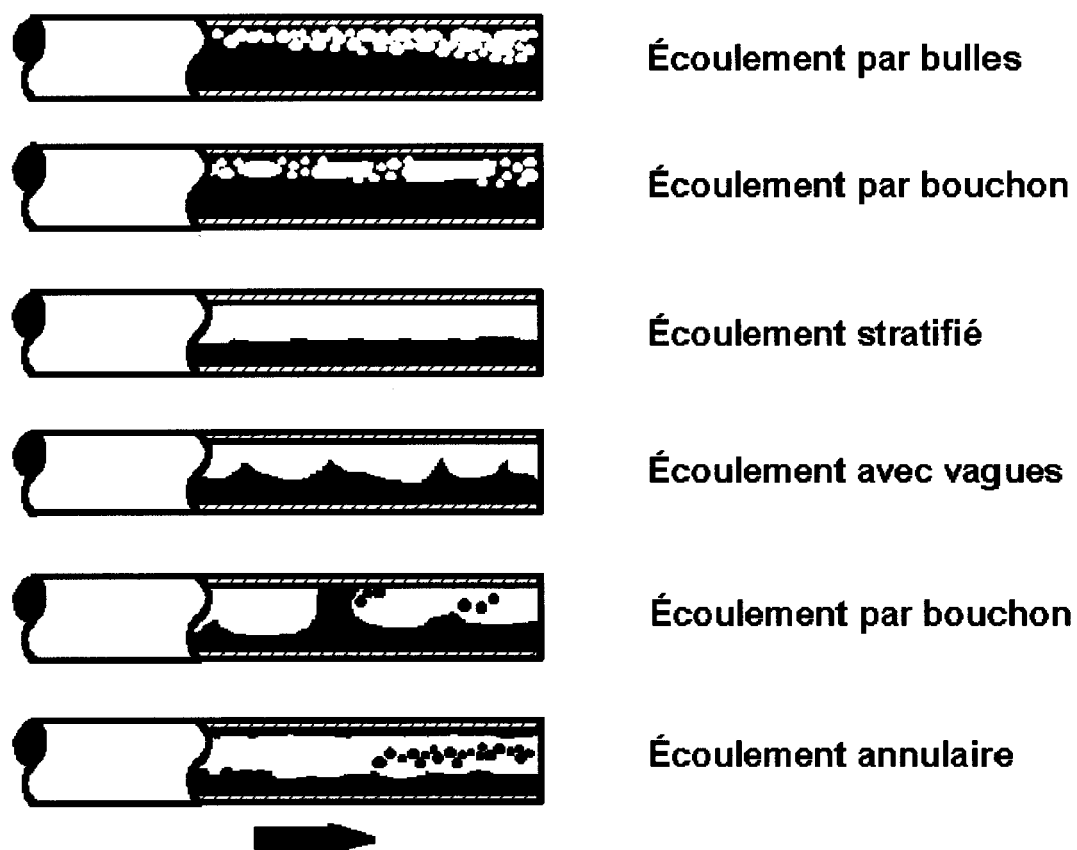


Figure 1.2: Régimes d'écoulements diphasiques horizontaux.

1.9.2 Pratique dans l'industrie nucléaire

La plupart des codes utilisés dans l'industrie nucléaire sont des modèles unidimensionnels. Cependant plusieurs niveaux de complexité sont utilisés pour représenter les phénomènes des écoulements diphasiques. Le modèle le plus simple, 1V1T, est applicable seulement dans des cas très limités et il n'est pas souhaitable de l'utiliser pour modéliser des systèmes complexes. Même si l'équilibre thermique existe entre les phases, il est très rare de trouver des cas où l'équilibre mécanique existe puisque la phase vapeur tend toujours à voyager plus rapidement que la phase liquide. Ceci est causé par les influences de l'accélération ou de la gravité dans un écoulement vertical ou causé par les effets de l'accélération dans un écoulement horizontal. Le modèle à écart de vitesses («drift flux» (1VDF1T)) requiert le même nombre d'équations à résoudre que le modèle 1V1T, mais il nécessite en plus la solution de l'équation constitutive pour la vitesse relative entre les deux phases (voir le tableau 1.2). Il a cependant l'avantage qu'il n'est pas nécessaire de résoudre le couplage mécanique entre les phases. Les modèles à écart de vitesses ou les modèles à écart de vitesses avancés (1VDF2T) permettant le non-équilibre thermique entre les phases sont utilisés dans de nombreux codes d'analyse, de sécurité et de design dans l'industrie nucléaire tels que COBRA-IV (Stewart et al. (1977)) ainsi que ASSERT-IV (Tahir et al. (1988)) et ASSERT-PV (Rowe et al. (1993)). Tandis que les modèles complets à deux fluides ont commencé à être utilisés dans certains codes de sécurité de réacteurs nucléaires tels que RELAP5/MOD3 (Ransom et Team (1995)) et CATHENA (Beuthe et Hanna (1999)). La spécification des relations constitutives entre les phases est encore un sujet complexe et controversé dans la recherche sur les écoulements diphasiques.

1.9.3 Pratique dans l'industrie des chaudières

L'état de connaissances de la technologie des écoulements diphasiques dans l'industrie des chaudières est archaïque par rapport à celui de l'industrie nucléaire. De plus, cette technologie date souvent des années 40 et les plus modernes des années 60. Les détails des méthodes de calcul de la circulation d'eau dans les chaudières industrielles ont été appliqués par les manufacturiers de chaudières les plus importants tels que ABB-Combustion Engineering (Singer (1991)), Babcock & Wilcox (Stultz et Kitto (1992)), et plus tard décrit dans Ganapathy (1998) et Basu et al. (2000) indiquant que l'industrie des chaudières se situe des décennies en arrière de l'industrie nucléaire. Toutes les méthodes de calcul décrites dans les références précédentes impliquent des calculs manuels. Ils utilisent des méthodes graphiques pour balancer l'écoulement entre les tuyaux ascendants et descendants. Des méthodes intégrales sont également utilisées pour déterminer la vapeur générée dans une section entière de la chaudière qui est pré-calculée avec une absorption de chaleur moyenne, et l'écoulement (en négligeant l'accélération) est balancé en utilisant une technique de Hardy-Cross (Carnahan et al. (1969)). Un exemple de cette dernière méthode de calcul est le code ABB-CE CIRC de Nelson (1995). Les seules informations générées par ces techniques ou ces codes sont le rapport de circulation pour chacune des sections de la chaudière et le rapport de circulation globale de la chaudière. Il est important d'indiquer que, dans la plupart des cas, une section dans une chaudière est un mur entier du foyer ou une fraction significative (jusqu'à 1/3) de la banque de convection. Le critère utilisé pour maintenir l'opération d'une chaudière sécuritaire est simplement d'assurer que le rapport de circulation globale est plus grand que la valeur minimale spécifiée laquelle varie pour différents types de chaudières et de pression d'opération. Ces valeurs minimales n'ont pas de base scientifique puisqu'elles ont simplement été prouvées acceptables depuis des années.

CHAPITRE 2

ÉQUATIONS DE BASE

2.1 Description du problème

Le problème type que l'on cherche à résoudre est la prédiction, à l'état stationnaire, du champ de vitesses, de la température et des concentrations massiques des espèces chimiques à l'intérieur d'une chambre de combustion. Le combustible et le comburant sont injectés séparément à travers le brûleur dans l'enceinte de combustion où ils se mélangent et réagissent exothermiquement pour donner une flamme diffusive (figure 2.1). La chaleur dégagée par la réaction modifie considérablement les propriétés des fluides notamment la température et donc la densité ce qui entraîne une accélération du fluide. En outre, l'écoulement est turbulent et contribue fortement à l'interaction combustible-oxydant et donc à l'inter-diffusion moléculaire. Un autre moyen de forcer l'inter-diffusion des particules fluides consiste à injecter l'air avec un certain degré de mise en rotation (*swirl*) afin de créer un noyau central de recirculation. Par la même occasion, ce tourbillon permet aux gaz chauds de la combustion d'être recirculés vers la racine du jet pour chauffer les réactifs frais pour entretenir la réaction.

Étant donné que l'on a maintenant des produits de combustion chauds, il en résulte habituellement un important transfert de chaleur. Ce transfert de chaleur est évidemment convectif et radiatif. En plus, certains produits de combustion sont très nocifs pour notre environnement. Ces polluants sont rejetés à l'atmosphère en quantités plus ou moins importantes tout dépendant du système de combustion.

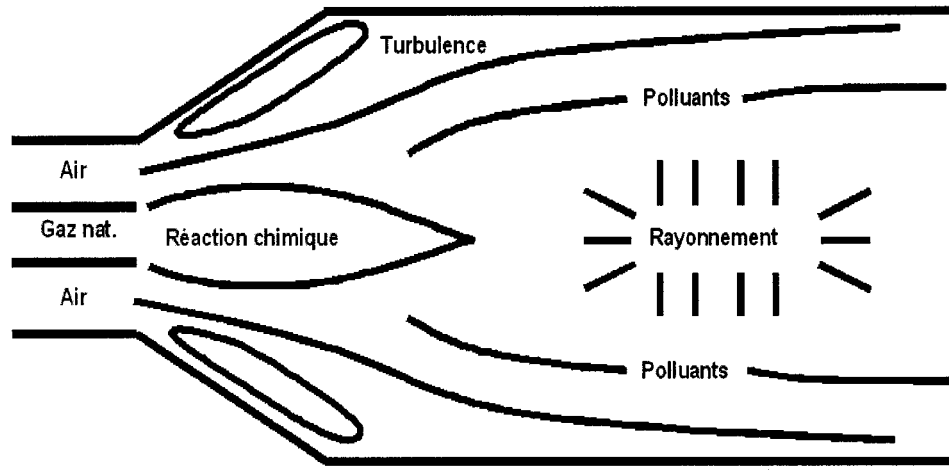


Figure 2.1: Description du problème.

Le but de la thèse étant de coupler le code STAR-CD avec la librairie de combustion CMBLIB et le code BOILER-II pour les écoulements diphasiques, il est donc nécessaire de discuter plus en détail de ces deux codes. C'est ce que l'on se propose de faire dans les sections suivantes. On introduira également le logiciel MpCCI qui permet de faire correspondre les maillages de part et d'autre des deux codes.

2.2 Code commercial STAR-CD

Nous avons choisi STAR-CD car il a été largement utilisé pour traiter de grandes géométries complexes comme les chaudières et les brûleurs industriels depuis 1995. Il permet également de traiter la combustion grâce à notre librairie de combustion CMBLIB. Bien que STAR-CD traite la combustion avec ces propres modèles, l'ajout de CMBLIB permet de traiter la combustion avec une meilleure précision car ses modèles sont à la fine pointe de la recherche.

2.2.1 Description du code

Avant de donner une description de STAR-CD, il serait intéressant de mentionner qu'est-ce que l'acronyme STAR-CD signifie. L'acronyme STAR signifie Simulation of Turbulent flow in Arbitrary Regions et CD est le nom de la compagnie soit Computational Dynamics, Limited. STAR-CD est un logiciel commercial d'analyse thermofluide à usages multiples. Il permet de faire la simulation numérique de la mécanique des fluides incluant le transfert de chaleur et de masse ainsi que les réactions chimiques. De plus, il permet en outre de traiter la physique dans différents domaines de l'industrie tels que l'aérospatiale, l'industrie de l'automobile, les procédés chimiques, l'environnement, les édifices (ventilation et climatisation, etc.) et plusieurs autres comme la génération de puissance et les chaudières.

STAR-CD est capable de simuler les phénomènes en régime permanent et transitoire, l'écoulement peut être laminaire ou turbulent, Newtonien ou non-Newtonien ainsi qu'incompressible ou compressible. On peut également traiter des problèmes de transfert de chaleur soit la conduction, la convection, le rayonnement thermique en milieu participant ou non et le transfert de chaleur conjugué entre un fluide et un solide. Il peut effectuer aussi la simulation des réactions chimiques incluant la combustion. Cependant, dans le cadre de cette étude, cette dernière est traitée par la librairie de combustion CMBLIB. Plusieurs autres phénomènes physiques peuvent également être simulés.

Plusieurs schémas numériques ont été implantés dans STAR-CD. Dans cette étude, le schéma de différentiation en amont est utilisé. Pour ce qui est de l'algorithme de résolution, l'algorithme SIMPLE de Patankar et Spalding (1972) est utilisé. Le lecteur peut trouver une description détaillée de l'algorithme SIMPLE dans le livre de Patankar (1980).

STAR-CD accepte des maillages non-structurés et structurés avec différents types d'éléments de calcul tels que hexahédres, tétraèdres, prismes, pyramides et polyèdres.

2.2.2 Équations de conservation pour l'aspect aérodynamique

On présente les équations de base exprimant la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et les équations de transport du modèle de turbulence $k-\epsilon$. Pour tenir compte de la turbulence, les équations décrivent l'évolution des quantités moyennes de chaque variable. Elles sont présentées selon la décomposition de Favre (1965).

L'équation de continuité est:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

L'équation de la quantité de mouvement est :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \tilde{S}_i \quad (2.2)$$

où $\bar{\tau}_{ij}$ sont les composantes tensorielles de contraintes données par :

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu_{eff} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \mu_{eff} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''})$$

et les flux $\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''}$ sont appelés tensions de Reynolds.

Le terme source $\tilde{S}_i$ représente dans ce cas-ci, les forces gravitationnelles $\bar{\rho} g_i$ et des termes additionnels pour la perte de pression dans les banques de tubes que l'on discutera au chapitre 3.

La viscosité efficace est définie par :

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (2.3)$$

où μ est la viscosité laminaire et μ_t la viscosité turbulente qui s'exprime dans le cadre du modèle de turbulence $k-\epsilon$ (Jones et Launder (1972)) par :

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.4)$$

Pour que la formulation soit complète, il faut résoudre les équations de transport qui expriment la conservation de l'énergie cinétique de turbulence k et son taux de dissipation ϵ .

L'équation de l'énergie cinétique de turbulence est :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j k) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} = P_k - \bar{\rho}\epsilon \quad (2.5)$$

Le terme P_k représente la production de l'énergie cinétique de la turbulence :

$$P_k = 2\mu_t d_{ij} d_{ij} \quad (2.6)$$

où d_{ij} est le tenseur du taux de déformation :

$$d_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.7)$$

L'équation du taux de dissipation de k est :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j \epsilon) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} = (C_{\epsilon 1} P_k - C_{\epsilon 2} \bar{\rho} \epsilon) \frac{\epsilon}{k} \quad (2.8)$$

Les coefficients de fermeture du modèle de turbulence sont les suivants :

C_μ	σ_k	σ_ϵ	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$
0.09	1.0	1.22	1.44	1.92

2.2.3 Équations de conservation pour l'aspect thermochimique

Les écoulements turbulents réactifs sont régis par trois aspects complémentaires et distincts. La dynamique des fluides, le transfert de chaleur et les réactions chimiques. Le défi consiste alors à modéliser ces trois aspects tout en tenant compte de leurs interactions.

Le premier aspect consiste à résoudre l'écoulement du fluide, c'est-à-dire les équations de continuité et de Navier-Stokes moyennées à densité variable. La turbulence est traitée par le modèle $k-\epsilon$ avec lois de paroi.

Toutefois, le système d'équations qui gouverne l'écoulement ne peut être fermé sans avoir recours à une équation d'état qui spécifie la distribution de la densité. Ceci requiert la détermination du taux de réaction et des concentrations massiques des produits et donc le calcul de la température et de l'enthalpie (second aspect). Le taux de réaction est le taux auquel une espèce chimique est détruite pour en produire d'autres (troisième aspect). L'équation d'état 2.9 des gaz parfaits contenant N espèces chimiques apparaît alors comme étant le dénominateur commun des trois aspects de la combustion.

$$\bar{P} = \bar{\rho} R \tilde{T} \sum_{i=1}^N \frac{\tilde{m}_i}{M_i} \quad (2.9)$$

La fermeture du système d'équations qui régit l'aérodynamique de l'écoulement est

réalisée une fois la densité calculée. Toutefois, l'équation d'état fait aussi intervenir le calcul de la température (l'enthalpie) et des espèces chimiques. La détermination de ces variables peut se faire par le biais d'équations de transport et de relations thermodynamiques.

L'équation de transport de d'enthalpie pour le calcul de la température est :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{h}) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_h}\right)\frac{\partial\tilde{h}}{\partial x_j} = \tilde{S}_h \quad (2.10)$$

où $\tilde{S}_h$ représente les échanges radiatifs et les échanges avec le milieu ambiant.

L'enthalpie est alors reliée au reste des variables par (Viollet (1986)) :

$$\tilde{h} = \int_{T_0}^{\tilde{T}} \left(\sum_{i=1}^N \tilde{c}_{P,i} \tilde{m}_i \right) d\tilde{T} + \sum_{i=1}^N h_{R,i} \tilde{m}_i \quad (2.11)$$

où $h_{R,i}$ est l'enthalpie de formation de l'espèce i et T_0 représente la température de l'état de référence de l'enthalpie. Quant aux coefficients $\tilde{c}_{P,i}$, ils peuvent être exprimés en fonction de la température à partir de corrélations basées sur les tables empiriques de Janaf (1986).

D'autre part, le transport des concentrations massiques des espèces chimiques $\tilde{m}_i$ est régie par des équations de convection-diffusion avec terme source.

L'équation de transport des espèces chimiques $\tilde{m}_i$ ($i \in [1, N]$) est :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{m}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{m}_i) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_i}\right)\frac{\partial\tilde{m}_i}{\partial x_j} = \bar{\rho}\tilde{R}_i \quad (2.12)$$

Ces équations sont toutefois assujetties à la contrainte

$$\sum_{i=1}^N \tilde{m}_i = 1 \quad (2.13)$$

pour un système contenant N espèces chimiques.

Pour toutes les espèces chimiques, les coefficients σ_i sont posés égaux à 0.9 (Khalil et al. (1975)) afin de souligner l'effet de la turbulence sur les échanges par diffusion. Quant au terme source $\tilde{R}_i$, il représente le taux de formation moyen ou le taux de destruction moyen de l'espèce i .

Dans un écoulement turbulent réactif, l'aspect thermochimique de la combustion devient aussi important que son caractère turbulent à cause des nombreux phénomènes physiques qui s'y passent. L'énergie libérée lors d'une réaction chimique entraîne une grande variation des propriétés physiques du fluide dans l'enceinte ainsi qu'un échange convectif et radiatif avec le milieu ambiant. En plus, la réaction chimique génère un nombre appréciable de radicaux libres et d'espèces intermédiaires. La plus grande difficulté consiste alors à prédire les taux moyens de réaction $\tilde{R}_i$ de la réaction. Cette difficulté découle du fait que les modèles de turbulence ne fournissent que des valeurs moyennées et que le taux de réaction calculé à partir de ces valeurs moyennées est très différent du taux de réaction moyen. Le taux de réaction dépend principalement de la turbulence ou, plus précisément, du mélange des réactifs qui varie en fonction du taux de création et de dégénérescence des tourbillons.

Rayonnement en milieu participant

Dans le foyer d'une chaudière industrielle les échanges radiatifs du milieu participant avec les parois tubées contribuent à 80% des échanges de la chaleur. Il est donc important que la simulation numérique de chaudières industrielles tienne

compte du transfert de chaleur par rayonnement. Le transfert de chaleur radiatif est relativement simple entre les parois d'une enceinte tel que vu dans les cours de transfert de chaleur de base. Nous n'en discuterons pas ici et le lecteur peut se référer à n'importe quel livre de transfert de chaleur. Par contre, le transfert de chaleur radiatif en milieu participant sera présenté ici plus en détails puisqu'il s'agit d'une notion moins courante.

La méthode utilisée pour le transfert de chaleur radiatif en milieu participant est la méthode de transfert de chaleur discrète de Lockwood et Shah (1981).

L'équation de transfert de chaleur radiatif en milieu participant peut être exprimée comme suit :

$$\frac{dI}{ds} = -(k_a + k_s) + \frac{k_a E_g}{\pi} + \frac{k_s}{4\pi} \int_{4\pi} p(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') I(\vec{\Omega}') d\Omega' \quad (2.14)$$

où I est l'intensité de rayonnement dans la direction de $\vec{\Omega}$, s est la distance le long de cette direction et $d\Omega'$ est l'incrément d'angle solide autour de Ω' mesuré en stéradian. Les termes k_a et k_s sont des coefficients d'absorption et de dispersion respectivement, E_g est la puissance émissive d'un corps noir à la température T_g du milieu (égale à σT_g^4) et $p(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$ est la probabilité que le rayonnement incidente dans la direction $\vec{\Omega}'$ sera dispersée à l'intérieur de l'incrément de l'angle solide $d\Omega$ autour de $\vec{\Omega}$ (figure 2.2). L'équation 2.14 représente le changement d'intensité dans la direction $\vec{\Omega}$ en fonction de l'absorption et de la dispersion extérieure (out-scattering) ainsi que de l'émission et de la dispersion intérieure (in-scattering) qui sont représentés par les trois termes de droite de l'équation 2.14.

En définissant,

$$k_e = k_a + k_s \quad (2.15)$$

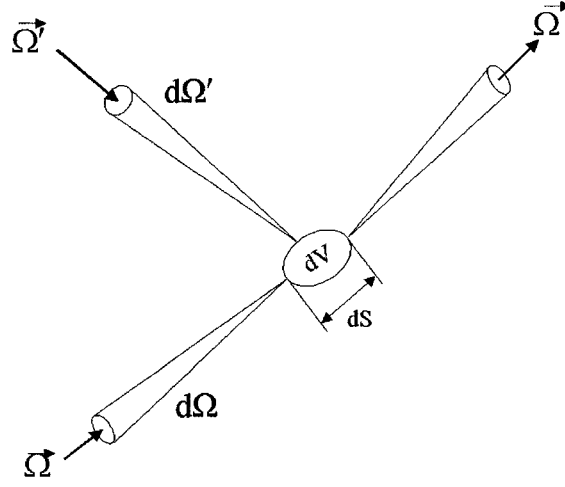


Figure 2.2: Rayonnement à travers un élément de volume le long du chemin de propagation.

$$s^* = k_e s \quad (2.16)$$

et

$$E^* = \frac{1}{k_e} \left(k_a E_g + \frac{k_s}{4} \int_{4\pi} p(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') I(\vec{\Omega}') d\Omega' \right) \quad (2.17)$$

On obtient :

$$\frac{dI}{ds^*} = -I + \frac{E^*}{\pi} \quad (2.18)$$

Considérant un rayon traversant un élément avec une intensité entrante I_n et sortante I_{n+1} , comme le montre la figure 2.3, la solution de l'équation 2.18 est :

$$I_{n+1} = I_n e^{-ds^*} + \frac{E^*}{\pi} (1 - e^{-ds^*}) \quad (2.19)$$

où on suppose que E^* est constant dans l'élément.

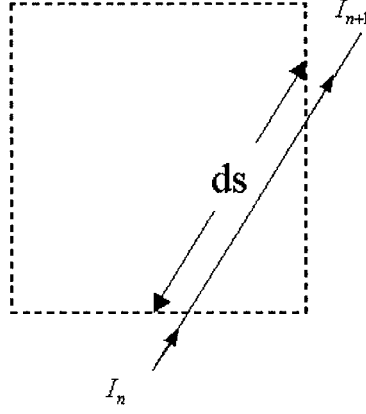


Figure 2.3: Rayon traversant un élément.

Ainsi pour un rayon i et une région émettrice j

$$S_j^i = (I_{n+1} - I_n) \vec{\Omega}^i \cdot \vec{dA}_j^i \delta \vec{\Omega}^i \quad (2.20)$$

où $\vec{dA}_j$ est la surface de la région émettrice.

Le terme source total pour tous les rayons traversant un élément est alors :

$$S_R = \sum_{\forall_j} \sum_{\forall_i} S_j^i \quad (2.21)$$

où $\forall_j$ sont toutes les régions émettrices et $\forall_i$ sont tous les rayons provenant de la région émettrice j entrant un élément. Ce dernier est le terme source que l'on inclus dans l'équation de transport de l'enthalpie 2.10.

2.3 Librairie de combustion CMBLIB

Dans les sous-sections suivantes, on présente les différents modèles de combustion implantés dans CMBLIB et utilisés dans cette étude. Cette description n'est

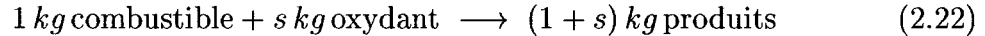
cependant pas exhaustive puisque CMBLIB contient de nombreux modèles qui ne seront pas discutés dans le cadre de cette étude.

2.3.1 Relations communes aux modèles de combustion

On a identifié $(10+N)$ inconnues soient: $\tilde{u}$, $\tilde{v}$, $\tilde{w}$, $\bar{p}$, k , ϵ , μ_t , $\bar{\rho}$, $\tilde{T}$, $\tilde{h}$ et $\tilde{m}_i$ où $i \in [1, N]$ lors de la modélisation de la combustion. Pour les déterminer, il faut résoudre $(10+N)$ équations dont $(7+N)$ sont différentielles ce qui constitue déjà un système de taille. Toutefois, on peut éliminer une équation différentielle en exploitant l'équation algébrique (2.13). Quant au nombre des espèces chimiques prises en compte dans la composition du mélange, il dépend essentiellement du type de réaction considéré (à une ou à plusieurs étapes).

Nous allons maintenant voir comment il est possible de réduire le nombre d'équations à résoudre tout en préservant la physique du phénomène.

On considère une réaction chimique à une étape où le combustible (généralement un hydrocarbure C_xH_y) réagit avec le comburant pour donner des produits selon les proportions :



où s est le coefficient stoechiométrique de la réaction. Écrivons les équations de transport du combustible $\tilde{m}_{fu}$ et de l'oxydant $\tilde{m}_{O_2}$ à partir de l'équation (2.12) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{m}_{fu}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{m}_{fu}) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{fu}}\right)\frac{\partial\tilde{m}_{fu}}{\partial x_j} = \bar{\rho}\tilde{R}_{fu} \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{m}_{O_2}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{m}_{O_2}) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{O_2}}\right)\frac{\partial\tilde{m}_{O_2}}{\partial x_j} = \bar{\rho}\tilde{R}_{O_2} \quad (2.24)$$

On introduit ensuite la variable $\tilde{\zeta}$ pour représenter la concentration massique moyenne du combustible en excès ou en défaut de la stoechiométrie :

$$\tilde{\zeta} = \tilde{m}_{fu} - \frac{\tilde{m}_{O_2}}{s} \quad (2.25)$$

Williams (1965) a établi une combinaison linéaire des équations (2.23) et (2.24), ce qui permet de déduire une équation de transport pour $\tilde{\zeta}$ sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\zeta}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\zeta}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_f} \right) \frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial x_j} = 0 \quad (2.26)$$

Il est à noter que l'équation de $\tilde{\zeta}$ n'a pas de terme source puisque les proportions de la réaction chimique imposent $\tilde{R}_{fu} = \tilde{R}_{O_2}/s$. En outre, on suppose que toutes les espèces chimiques ont le même coefficient de diffusion turbulente et donc que le nombre de Schmidt turbulent est constant (Spalding (1979)), en l'occurrence, $\sigma_{fu} = \sigma_{O_2} = \sigma_f$.

On définit ensuite une variable scalaire qui sert à déterminer les proportions de chaque réactif dans le mélange. Selon Khalil (1982), le choix le plus direct est le taux de mélange $\tilde{f}$ défini par :

$$\tilde{f} = \frac{\tilde{\zeta} - \tilde{\zeta}_A}{\tilde{\zeta}_F - \tilde{\zeta}_A} \quad (2.27)$$

où les indices A et F désignent respectivement les conditions dans le jet d'entrée de l'oxydant (Air) et du combustible (*Fuel*) pour lesquelles $\tilde{f}$ prend respectivement les valeurs 0 et 1.

L'équation de transport du taux de mélange $\tilde{f}$ est déduite de celle de $\tilde{\zeta}$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{f}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{f}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_f} \right) \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} = 0 \quad (2.28)$$

Le scalaire $\tilde{f}$ est strictement conservé puisqu'il obéit à des conditions de Neumann nulles ($\nabla \tilde{f} \cdot \mathbf{n} = 0$) sur toutes les frontières (de vecteur normal $\mathbf{n}$) à l'exception de l'entrée des réactifs et que le terme source est nul. Par conséquent, chaque valeur de $\tilde{f}$ entre 0 et 1 correspond à un état particulier du mélange et permet de déduire les concentrations massiques des réactifs. D'ailleurs, dans tous les modèles de combustion utilisés dans cette étude, on cherche à déterminer la concentration massique des espèces chimiques en fonction du taux de mélange et cela aboutit à des distributions comme celles montrées à la figure 2.4. Ces distributions de la concentration massique des espèces chimiques pour une réaction à une étape sont très différentes d'une réaction chimique réelle (plusieurs étapes) comme on peut le remarquer à la figure 2.5. On voit qu'on a des distributions plus lisses des concentrations massiques. Les autres variables communes aux modèles de combustion sont l'enthalpie et la température, que l'on détermine à partir des équations 2.10 et 2.11.

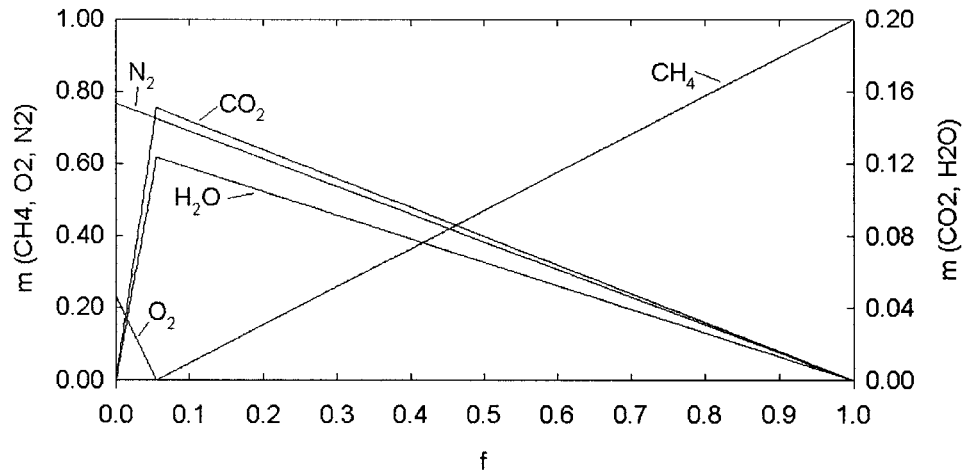


Figure 2.4: Concentration massique des produits de combustion en fonction du taux de mélange pour une réaction chimique à une étape (combustion du méthane dans l'air).

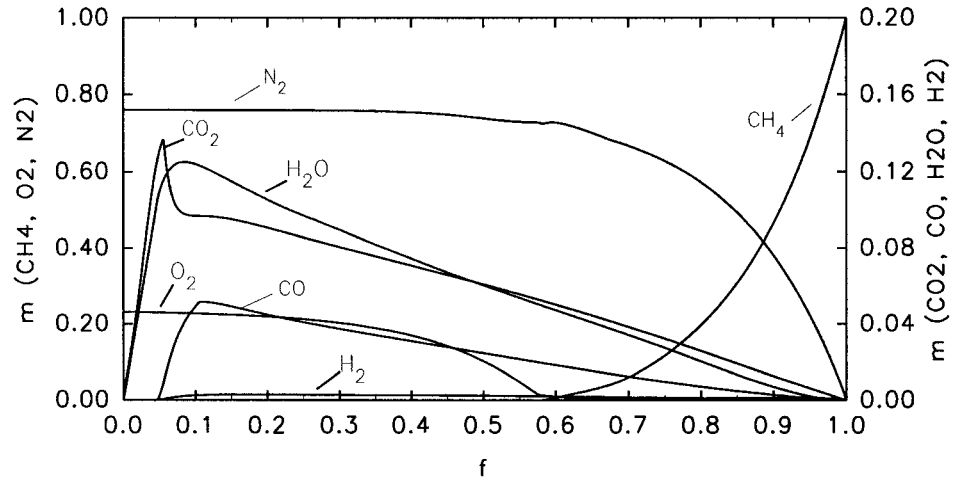
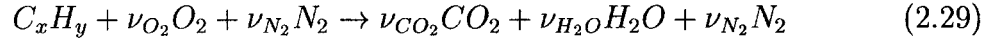


Figure 2.5: Concentration massique des produits de combustion en fonction du taux de mélange pour une réaction chimique réelle (combustion du méthane dans l'air).

2.3.2 Modèle à chimie infiniment rapide

Dans ce modèle, on suppose que la réaction chimique est complétée aussitôt que les réactifs sont mélangés. Le temps nécessaire à la réaction chimique est donc négligeable par rapport au temps pour mélanger les réactifs. La réaction chimique est donc considérée comme étant infiniment rapide par rapport au temps de mélange des réactifs. Ceci est effectivement le cas des flammes de diffusion où la propagation de la flamme est entièrement déterminée par la diffusion turbulente. Cependant, cette hypothèse suppose aussi que le combustible et le comburant ne peuvent pas coexister en même temps au même endroit. En d'autres termes, dans le cas de mélange stoechiométrique, le combustible et l'oxydant disparaissent rapidement et complètement pour générer des produits. Toutefois, si le mélange est pauvre, tout le combustible est consommé et il reste de l'oxygène dans les produits. Par contre, si le mélange est riche, tout l'oxygène est consommé et le combustible fait partie des produits.

On considère donc une réaction chimique irréversible à une étape où le combustible (généralement un hydrocarbure C_xH_y) réagit avec le comburant pour donner des produits de combustion selon la réaction stoechiométrique suivante :



où les coefficients ν représentent le nombre de moles de chacune des espèces chimiques.

La réaction complète est modélisée de la façon suivante et permet de déterminer la concentration massique des réactifs.

$$\begin{aligned} 0 \leq \tilde{f} \leq f_{st} : \quad & \tilde{m}_{fu} = 0 \\ & \tilde{m}_{O_2} = m_{O_2,A} \frac{f_{st} - \tilde{f}}{f_{st}} \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} f_{st} \leq \tilde{f} \leq 1 : \quad & \tilde{m}_{O_2} = 0 \\ & \tilde{m}_{fu} = m_{fu,F} \frac{\tilde{f} - f_{st}}{1 - f_{st}} \end{aligned} \quad (2.31)$$

où le taux de mélange à la stoechiométrie est donné par :

$$f_{st} = \frac{m_{O_2,A}}{s m_{fu,F} + m_{O_2,A}} \quad (2.32)$$

Le détail de cette formulation peut être trouvé dans le livre de Spalding (1979).

La concentration massique d'un gaz inerte (généralement de l'azote) dans les produits de combustion est donnée par :

$$\tilde{m}_{inerte} = \tilde{m}_{inerte,A} (1 - \tilde{f}) \quad (2.33)$$

Maintenant que les concentrations $\tilde{m}_{fu}$, $\tilde{m}_{O_2}$ et $\tilde{m}_{inerte}$ sont connues, la concentration massique des produits est déduite de l'équation 2.13 :

$$\tilde{m}_{pr} = 1 - (\tilde{m}_{O_2} + \tilde{m}_{fu} + \tilde{m}_{inerte}) \quad (2.34)$$

On peut obtenir les concentrations massiques des différents produits, en ayant recours aux proportions de la réaction chimique 2.29 avec les relations suivantes :

$$\tilde{m}_{CO_2} = \frac{\nu_{CO_2} M_{CO_2}}{\nu_{CO_2} M_{CO_2} + \nu_{H_2O} M_{H_2O}} \tilde{m}_{pr} \quad (2.35)$$

$$\tilde{m}_{H_2O} = \frac{\nu_{H_2O} M_{H_2O}}{\nu_{CO_2} M_{CO_2} + \nu_{H_2O} M_{H_2O}} \tilde{m}_{pr} \quad (2.36)$$

Calcul de l'enthalpie, de la température et de la densité :

L'enthalpie est déterminée par son équation de transport 2.10. La relation entre la température et l'enthalpie est donnée par :

$$\tilde{h} = \int_{T_0}^{\tilde{T}} \left(\sum_{i=1}^N \tilde{c}_{P,i} \tilde{m}_i \right) d\tilde{T} + \sum_{i=1}^N h_{R,i} \tilde{m}_i \quad (2.37)$$

La méthode itérative de Newton est utilisée pour résoudre cette équation non-linéaire et obtenir la température du mélange $\tilde{T}$. Les chaleurs spécifiques sont obtenues des corrélations de Gordon et McBride (1971). Enfin, la densité du mélange est calculée de l'équation des gaz parfaits :

$$\bar{\rho} = \frac{M_{mel} \bar{P}}{R \tilde{T}} \quad (2.38)$$

où M_{mel} représente la masse molaire du mélange définie par :

$$\frac{1}{M_{mel}} = \sum_{i=1}^N \frac{\tilde{m}_i}{M_i} \quad (2.39)$$

2.3.3 Modèle à taux de réaction fini

Le modèle à chimie infiniment rapide tend à surestimer la concentration du combustible non-brûlé. En effet, il n'est pas tout à fait exact de supposer que le taux de réaction est infiniment rapide car, compte tenu de l'influence de la turbulence, ce taux est fini dans certaines régions de la flamme. Ainsi, l'hypothèse d'une réaction infiniment rapide, valable dans la plupart des cas, peut toutefois mener à d'importantes erreurs, notamment sur la prédiction de la température lorsqu'elle surestime la quantité de combustible qui réagit.

Afin de pallier cet inconvénient, le modèle à taux de réaction fini ajoute une équation de transport pour la fraction massique du combustible pour introduire les effets de la turbulence sur le taux de réaction et avoir une meilleure estimation de $\tilde{m}_{fu}$. Le terme source de cette équation est donné par Hjertagger et Magnussen (1982).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{m}_{fu}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{m}_{fu}) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{fu}}\right)\frac{\partial\tilde{m}_{fu}}{\partial x_j} = \\ -\frac{\tilde{m}_{fu,b}}{\tilde{m}_{fu} + \tilde{m}_{fu,b}} A_{R_{fu}} \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} \cdot \min\left|\tilde{m}_{fu}, \frac{\tilde{m}_{O_2}}{s}\right| \end{aligned} \quad (2.40)$$

où $\tilde{m}_{fu,b}$ est la concentration de combustible brûlé et $A_{R_{fu}}$ est une constante empirique qui dépend de la nature de l'écoulement.

Le calcul des concentrations massiques, de la température et de la densité se fait de la même manière que dans le modèle à chimie infiniment rapide à l'exception

de la concentration du combustible non-brûlé qui est donnée par l'équation 2.40.

2.3.4 Modèle d'équilibre chimique

Les deux modèles précédents ne tiennent pas compte de la dissociation et ne permettent pas l'existence d'espèces chimiques autres que le CO_2 et le H_2O dans les produits de combustion. Les profils de concentration sont alors quelque peu faussés, car on retrouve généralement une quantité appréciable de CO lorsqu'on fonctionne en défaut d'air. Par conséquent, la quantité de combustible non-brûlé et la température sont souvent surrestimés. Pour remédier à ces lacunes, on introduit le modèle d'équilibre basé sur la minimisation de l'énergie libre de Gibbs. Pour décrire cette méthode, nous allons d'abord démontrer ce que représente l'énergie libre de Gibbs. La première loi de la thermodynamique stipule que si un système d'espèces chimiques réagit à température et pression constantes en absence de travail on a :

$$\delta Q = dH \quad (2.41)$$

et la deuxième loi stipule que :

$$\delta Q \leq TdS \quad (2.42)$$

En combinant les équations (2.41) et (2.42), on obtient :

$$dH - TdS \leq 0 \quad (2.43)$$

et

$$d(H - TS)_{P,T} \leq 0 \quad (2.44)$$

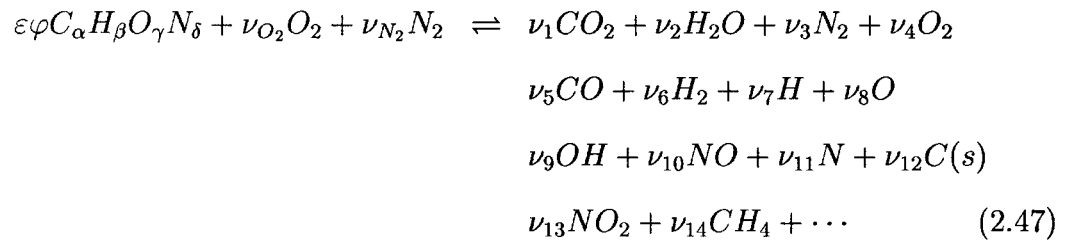
$$d(G)_{P,T} \leq 0 \quad (2.45)$$

où G est appelé l'énergie libre de Gibbs.

Le deuxième principe de la thermodynamique donne le sens de l'évolution. Ainsi lors d'une réaction chimique de la gauche vers la droite (transformation des réactifs en produits), à T et P données, la variation dG de la fonction d'énergie libre $G = H - TS$ est négative; et dans le sens contraire (les produits se reforment en réactifs) la variation est positive soit $dG > 0$. À l'équilibre, l'énergie libre de Gibbs totale du système passe par un minimum et la relation suivante est satisfaite :

$$d(G)_{P,T} = 0 \quad (2.46)$$

Décrivons maintenant le processus de calcul de l'équilibre chimique pour la réaction chimique stoechiométrique d'un hydrocarbure quelconque $C_\alpha H_\beta O_\gamma N_\delta$ dans l'air. Cette réaction est donnée par :



où ε est défini par :

$$\varepsilon = \frac{\nu_{O_2}}{\alpha + \frac{1}{4}\beta - \frac{1}{2}\gamma} \quad (2.48)$$

et φ est la richesse du mélange définie comme :

$$\varphi = \frac{F}{F_{st}} \quad (2.49)$$

où

$$F = \frac{\text{masse de combustible}}{\text{masse d'air}} \quad (2.50)$$

Pour un mélange de n espèces chimiques, l'énergie libre de Gibbs est donnée par :

$$g = \sum_{j=1}^n \mu_j \nu_j \quad (2.51)$$

où μ_j , le potentiel chimique, est défini par :

$$\mu_j = \left(\frac{\partial g}{\partial \nu_j} \right)_{T, P, \nu_i (i \neq j)} \quad (2.52)$$

L'état thermodynamique du mélange est déterminé en minimisant l'énergie libre de Gibbs assujettie aux contraintes imposées par la conservation des atomes soit :

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} \nu_j = b_i^0 \quad i = 1, \dots, l \quad (2.53)$$

avec

$$b_i = b_i^0 \quad i = 1, \dots, l \quad (2.54)$$

où

a_{ij} : nombre d'atomes de l'élément i dans l'espèce j

b_i^0 : nombre d'atomes de l'élément i dans les réactifs

l : nombre des différents atomes présents dans la réaction

b_i : nombre d'atomes de l'élément i dans les produits

$$b_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} \nu_j \quad (2.55)$$

Définissons le terme G par :

$$G = g + \sum_{i=1}^l \lambda_i (b_i - b_i^0) \quad (2.56)$$

où λ_i représentent des multiplicateurs de Lagrange associés à chaque atome présent dans la réaction.

La condition d'équilibre devient :

$$0 = dG = \sum_{j=1}^n \left(\mu_j + \sum_{i=1}^l \lambda_i a_{ij} \right) \delta \nu_j + \sum_{i=1}^l (b_i - b_i^0) \delta \lambda_i \quad (2.57)$$

En supposant que les variations $\delta \lambda_i$ et $\delta \nu_i$ sont indépendantes, l'équation (2.57) peut être scindée en deux systèmes d'équations :

$$\mu_j + \sum_{i=1}^l \lambda_i a_{ij} = 0 \quad i = 1, \dots, l \quad (2.58)$$

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} \nu_j - b_i^0 = 0 \quad i = 1, \dots, l \quad (2.59)$$

Or pour un gaz parfait le potentiel chimique μ_j est donné par :

$$\mu_j = \mu_j^0 + RT \ln \left(\frac{\nu_j}{\nu} \right) + RT \ln \left(\frac{P}{P_0} \right) \quad (2.60)$$

En combinant les équations (2.58) et (2.60), on obtient :

$$\frac{\mu_j^0}{RT} + \ln \left(\frac{\nu_j}{\nu} \right) + \ln \left(\frac{P}{P_0} \right) + \sum_{i=1}^l \frac{\lambda_i}{RT} a_{ij} = 0 \quad i = 1, \dots, l \quad (2.61)$$

et

$$\frac{\mu_j^0}{RT} = \frac{(G^0 - H_{298}^0)}{RT} + \frac{\Delta H_{f298}^0}{RT} \quad (2.62)$$

Le système d'équations est complété par :

$$\nu = \sum_{j=1}^n \nu_j \quad (2.63)$$

On obtient donc le système à $(n + l + 1)$ équations non-linéaires suivant dont la solution fournit l'état de l'équilibre chimique du mélange à une température donnée.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \sum_{j=1}^n a_{ij} \nu_j - b_i^0 = 0 & i \in [1, n] \\ \frac{\mu_j^0}{RT} + \ln \left(\frac{\nu_j}{\nu} \right) + \ln \left(\frac{P}{P_0} \right) + \sum_{i=1}^l \frac{\lambda_i}{RT} a_{ij} = 0 & j \in [1, n] \\ \nu = \sum_{j=1}^n \nu_j & \end{array} \right. \quad (2.64)$$

où les inconnues sont ν_j , λ_i et ν .

Les valeurs de $(G^0 - H_{298}^0)/RT$ et de $\Delta H_{f298}^0/RT$ peuvent être déterminées à partir de corrélations empiriques représentant l'évolution des propriétés thermodynamiques en fonction de la température telles celles de Gordon et McBride (1971).

Connaissant l'enthalpie du mélange on peut itérer sur la température jusqu'à ce que l'équation suivante soit satisfaite :

$$\tilde{h} = \int_{T_0}^{\tilde{T}} \left(\sum_{i=1}^N \tilde{c}_{P,i} \tilde{m}_i \right) d\tilde{T} + \sum_{i=1}^N h_{R_i} \tilde{m}_i \quad (2.65)$$

La procédure de calcul pour le modèle d'équilibre chimique est donc finalement la suivante :

1. Effectuer un calcul initial des concentrations massiques en fonction du taux de mélange en utilisant le modèle à chimie infiniment rapide.
2. Obtenir un premier estimé de la température du mélange et comme la pression est supposée constante dans l'enceinte, $\tilde{T}$ et $\bar{P}$ sont connues.
3. À partir de $\tilde{T}$ et $\bar{P}$, résoudre le système 2.64 par une méthode de Newton pour déterminer les concentrations massiques des produits de combustion.
4. Connaissant l'enthalpie de mélange de son équation de transport, on itère sur la température jusqu'à ce que la relation intégrale 2.65 soit satisfaite.
5. Dans l'affirmative, la densité est calculée sinon on retourne à l'étape 3.

Afin de valider le modèle d'équilibre chimique, McKenty (1992) a réalisé un calcul d'équilibre chimique dans le cas de la combustion du méthane dans l'air où seules les espèces CH_4 , O_2 , N_2 , CO_2 , CO , H_2O , H_2 et NO ont été considérées dans l'équation de réaction (2.47). Des comparaisons ont été effectuées avec les résultats numériques du code de calcul de la NASA, SP-273 de Gordon et McBride (1971), qui fait un calcul d'équilibre chimique en considérant toutes les espèces.

On observe à la figure 2.6 une bonne concordance en dépit du fait que l'on a négligé l'existence de plusieurs espèces secondaires contrairement à Gordon et McBride (1971). Ce modèle se distingue des deux précédents en ce qu'il permet le calcul des espèces dissociées telles CO et H_2 donnant ainsi une meilleure prédiction du champ de température. Toutefois, ce modèle tend à surestimer les concentrations de combustible non-brûlé et de monoxyde de carbone pour les mélanges riches.

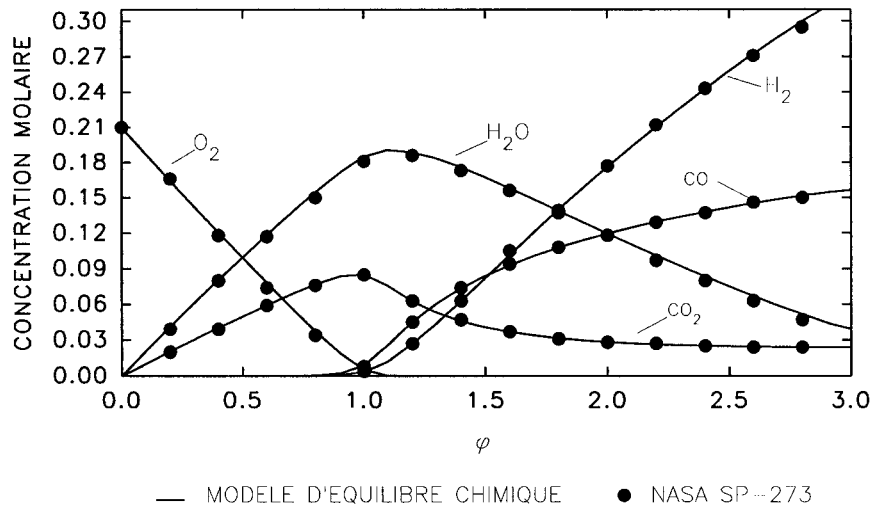


Figure 2.6: Équilibre chimique du méthane dans l'air. Comparaison des concentrations molaires en fonction de la richesse du mélange avec les résultats de Jones (1980).

2.3.5 Modèle de micro-flammes

Les modèles précédents négligent complètement la formation du monoxyde de carbone ou alors la surestime dans certains cas. Les hypothèses sous-jacentes supposent que la réaction chimique est assez rapide pour être complète ou pour atteindre l'équilibre chimique.

L'approche du modèle de micro-flammes est différente, elle est basée sur le concept des flammelettes. On suppose que la combustion dans une flamme de diffusion ne se fait pas dans un mélange parfaitement homogène mais que les réactifs sont présents en poches de combustible et de comburant. Dans l'interstice qui sépare ces poches, il y a naissance de petites flammes communément appelées micro-flammes. L'intérêt derrière cette approche réside dans la possibilité de traiter ces micro-flammes comme des flammes laminares où le taux de réaction ne dépend pas de la turbulence. Cependant, ces micro-flammes restent influencées par la

production et la dégénérescence des tourbillons. Ainsi, l'influence de la turbulence sur la combustion se fera par le taux de mélange moyen et la distribution des concentrations des espèces chimiques en fonction de ce taux de mélange moyen et de sa fluctuation.

Dans le cadre de cette hypothèse, il est possible de déduire les produits de combustion à partir de mesures expérimentales dans des flammes laminaires. Actuellement, la librairie CMBLIB dispose de corrélations empiriques pour des flammes laminaires de méthane dans l'air. Avec ces données, nous supposons que chaque point de calcul est le lieu d'une micro-flamme laminaire et que l'influence de la turbulence se fait à travers $\tilde{f}$ et f'' (figure 2.7).

Le modèle est constitué de corrélations entre le taux de mélange et les concentrations massiques d'espèces chimiques. Ces corrélations ont été établies (McKenty (1992)) à partir des données expérimentales de Mitchell et al. (1980) et Smooke et al. (1989b) pour des flammes laminaires de méthane dans l'air. En basant ce modèle sur des données prises dans des flammes laminaires, le taux de réaction et la structure de la flamme n'étaient pas influencés par la turbulence. Dans ce cas, l'hypothèse que la distribution des espèces n'est fonction que du taux de mélange est plausible. La figure 2.7 montre la distribution d'espèces chimiques en fonction du taux de mélange donnée par ce modèle pour la combustion du méthane dans l'air.

La procédure de calcul est sensiblement la même que pour le modèle d'équilibre chimique. On calcule la distribution d'espèces chimiques à partir du taux de mélange moyen. Ensuite, connaissant l'enthalpie moyenne du mélange, on itère sur la température jusqu'à ce que l'équation 2.65 soit satisfaite.

En résumé, l'approche physique de la réaction change avec le modèle de micro-flammes. L'hypothèse émise ne concerne plus la vitesse de réaction mais plutôt

le mécanisme de la réaction. Néanmoins, la procédure de calcul reste presque identique à celle du modèle d'équilibre chimique. Les avantages du modèle de micro-flammes sont la simplicité d'utilisation, le coût relativement bas et la possibilité de prédire les concentrations des espèces dissociées comme CO et H_2 . En revanche, ce modèle est très dépendant de la précision des mesures expérimentales et n'est valide, que pour le combustible utilisé. Néanmoins, le concept du modèle reste facilement transposable à d'autres combustibles à condition de disposer des données expérimentales correspondantes pour préparer les corrélations.

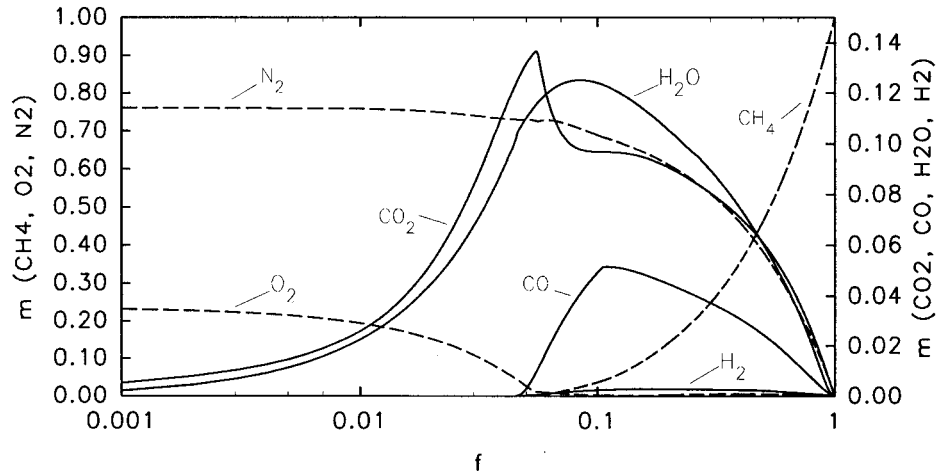


Figure 2.7: Concentration massique des produits en fonction du taux de mélange calculé avec le modèle de micro-flammes pour la combustion du méthane dans l'air (McKenty (1992)).

2.3.6 Pondération par fonction de densité de probabilité

Tous les modèles présentés donnent l'état thermodynamique instantané du mélange en fonction de $\tilde{f}$. Or, pour un écoulement turbulent réactif, les fluctuations de concentration du combustible et de l'oxydant varient d'un endroit à l'autre dans la zone de réaction. Ces fluctuations font en sorte que le combustible et l'oxydant

peuvent exister au même endroit dans la flamme, mais à des instants différents. Ainsi, l'influence du caractère intermittent de la turbulence sur les concentrations se fait à travers le taux de mélange moyen et de sa fluctuation f'' . La distribution des concentrations massiques moyennes est alors déterminée uniquement en fonction de $\tilde{f}$ et de f'' en ayant recours à une pondération statistique.

L'expression de la fraction massique de combustible ou d'oxydant en fonction du taux de mélange (équations 2.30 et 2.31) est non-linéaire. Elle comporte une rupture de pente pour $\tilde{f} = f_{st}$. Il devient donc nécessaire d'appliquer l'opérateur de moyenne statistique pour traiter le cas des écoulements turbulents réactifs (Viollet (1986)). Cet opérateur ainsi que les différentes fonctions de densité de probabilité $\tilde{P}(f)$ ont été introduits à la section 1.7.2 de cet ouvrage.

La valeur moyenne pour toute quantité scalaire au sens de Favre (1965) est donnée par :

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \phi(f) \tilde{P}(f) df \quad (2.66)$$

et les valeurs moyennes non pondérées par :

$$\bar{\phi} = \bar{\rho} \int_0^1 \frac{\phi(f)}{\rho(f)} \tilde{P}(f) df \quad (2.67)$$

Une exception pour l'expression de la densité moyenne est obtenue par :

$$\bar{\rho} = \left[\int_0^1 \frac{1}{\rho(f)} \tilde{P}(f) df \right]^{-1} \quad (2.68)$$

L'usage de la décomposition pondérée par la masse selon Favre (1965) n'est pas toujours reconnue; souvent la moyenne non pondérée est utilisée, mais les corrélations impliquant la fluctuation de la densité sont ignorées. Cependant, le fait de négliger les fluctuations de la densité réduit simplement les équations moyennées, non

pondérées par la masse, à une forme identique aux équations moyennées pondérées par la masse. La solution de ces équations donne alors des valeurs pondérées par la masse; exception faite que la densité est évaluée d'une manière inconsistante avec la pondération de Favre (1965), conduisant à des résultats erronés (Pope (182)).

L'expression de $\tilde{P}(f)$ étant inconnue, il s'agit de supposer une forme qui tienne compte de $\tilde{f}$ et de sa variance $g = \widetilde{f''^2}$. Dans cette étude, deux formes de fonction $\tilde{P}(f)$ ont été choisies, la fonction Beta de Richardson et al. (1953) et la fonction Delta de Spalding (1971a).

La fonction Beta

La fonction Beta semble la mieux adaptée aux calculs puisqu'elle est naturellement bornée entre 0 et 1 (Rhodes (1975)). Elle est donnée par :

$$\tilde{P}(f) = \frac{f^{a-1} (1-f)^{b-1}}{\int_0^1 f^{a-1} (1-f)^{b-1} df} \quad (2.69)$$

où les paramètres a et b permettent d'ajuster $\tilde{P}(f)$ à chaque point de calcul en fonction de $\tilde{f}$ et de g tel que :

$$a = \tilde{f} \left(\frac{\tilde{f}(1-\tilde{f})}{g} - 1 \right) \quad b = \frac{(1-\tilde{f})}{\tilde{f}} a$$

La valeur locale de la variance g est obtenue à partir de son équation de transport (Khalil (1982)) :

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i g) = \frac{\partial}{\partial x_i} \Gamma_g \frac{\partial g}{\partial x_i} + C_{g1} \mu_{eff} \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \right)^2 - C_{g2} \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} g \quad (2.70)$$

Le terme de gauche et le premier terme du membre de droite représentent respectivement le taux de convection et la diffusion turbulente de g . Le second et le

troisième termes du membre de droite représentent la production et la dissipation des fluctuations. Les coefficients C_{g1} et C_{g2} sont des constantes.

Les fonctions Beta ont un comportement aberrant lorsque $\tilde{f}$ est proche de 0 ou de 1, lié au fait que la densité de probabilité associée à 0 et à 1 est nulle, ce qui n'est pas physique; dans ces conditions, de trop grandes valeurs de la variance peuvent conduire à des valeurs des paramètres a ou b inférieures à 1, et à des formes de lois non réalistes pour lesquelles $\tilde{P}(f)$ tend vers l'infini à l'une ou l'autre des bornes (Viollet (1986)). Dans ce cas, on utilise la fonction Delta.

La fonction Delta

L'approche de la fonction Delta consiste à diviser le domaine en quatre régions selon les valeurs que prennent $\tilde{f}$ et g au point où l'on veut calculer la valeur moyenne d'une grandeur donnée. La fonction Delta est définie par une distribution d'onde carrée de $\tilde{f}$ avec le temps.

- Région 1: $0 < \tilde{f} < 1$

$$\tilde{P}(f) = a_1 [\delta(f_+) + \delta(f_-)] \quad (2.71)$$

$$a_1 = \frac{1}{2} \quad f_+ = \tilde{f} + \sqrt{g} \quad f_- = \tilde{f} - \sqrt{g}$$

- Région 2: $\tilde{f} < 0,5$ et $\tilde{f} - \sqrt{g} < 0$

$$\tilde{P}(f) = a_2 \delta(0) + a_3 \delta(f_+) \quad (2.72)$$

$$a_2 = \frac{g}{\tilde{f}^2 + g} \quad a_3 = \tilde{f}^2 + g$$

- Région 3: $\tilde{f} > 0,5$ et $\tilde{f} + \sqrt{g} > 1$

$$\tilde{P}(f) = a_2 \delta(f_-) + a_3 \delta(1) \quad (2.73)$$

$$a_2 = \frac{(1 - \tilde{f})^2}{(1 - \tilde{f})^2 + g} \quad a_3 = \frac{g}{(1 - \tilde{f})^2 + g}$$

- Région 4: grandes oscillations de $\tilde{f}$ et $g > g_{max}$

$$\tilde{P}(f) = (1 - \tilde{f})\delta(0) + \tilde{f}\delta(1) \quad (2.74)$$

$$g_{max} = (1 - \tilde{f})\tilde{f}$$

2.3.7 Formation de NO_x

Le taux de formation des oxydes d'azote est sensiblement plus lent que celui des mécanismes de réaction des autres espèces. Dans ce cas, on ne peut plus supposer que cette réaction atteint l'équilibre. Le modèle d'équilibre chimique surestimera alors les concentrations de NO_x . Il s'avère donc nécessaire de solutionner l'équation de transport des concentrations massiques de NO_x . On a choisi de prédire la formation d'oxydes d'azote thermiques (Thermal NO_x) par le mécanisme (1.36) de Y. B. Zeldovich et Frank-Kamenetskii (1974) en solutionnant l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{m}_{NO}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{m}_{NO}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{NO}} \right) \frac{\partial \tilde{m}_{NO}}{\partial x_j} = \bar{\rho}^2 \tilde{m}_{NO} \left[k_{f1} \frac{m_O}{\tilde{m}_O} \frac{m_{N_2}}{\tilde{m}_{N_2}} - k_{b1} \frac{m_{NO}}{\tilde{m}_{NO}} \frac{m_N}{\tilde{m}_N} \right] \quad (2.75)$$

où k_{f1} et k_{b1} sont les constantes de réactions directes et inverses respectivement. Les concentrations de O et de N sont déduites des hypothèses d'équilibre.

2.4 Conditions frontières

Dans cette section, on présente les différentes conditions frontières que l'on retrouve habituellement sur les chaudières soient : les entrées, les sorties et les parois.

2.4.1 Conditions aux entrées

Les vitesses à l'entrée pour un brûleur sont connues. Les fractions massiques m_i de chacune des espèces chimiques sont également connues. Le taux de mélange f est fixé à 1 à l'entrée du combustible et à 0 à l'entrée d'air.

Pour un écoulement turbulent, les valeurs de k et ϵ sont inconnues à moins d'avoir des données expérimentales. On peut cependant les estimer avec les relations suivantes :

$$k = \lambda U^2 = \frac{3}{2} I_t U^2 \quad \text{et} \quad \epsilon = C_\mu \frac{k^{3/2}}{\alpha D_H} \quad (2.76)$$

où I_t est l'intensité de turbulence, D_H est le diamètre hydraulique et α est une quantité qui dépend de la longueur de mélange.

L'intensité de turbulence est définie comme :

$$I_t = \frac{\sqrt{\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}}}{U} \quad (2.77)$$

Les valeurs des coefficients λ et α que l'on retrouve dans la littérature varient entre $0.003 < \lambda < 0.02$ et $0.003 < \alpha < 0.005$.

2.4.2 Conditions aux sorties

On suppose que le domaine est suffisamment long pour que le gradient d'une variable ϕ dans la direction normale à la sortie s'annule. On a donc :

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad (2.78)$$

2.4.3 Conditions aux parois

Le modèle à haut nombre de Reynolds $k-\epsilon$ utilisé dans cette étude n'est pas applicable près des parois où les effets visqueux dans la couche limite sont importants. Il faut un mécanisme pour relier la couche limite à la zone pleinement turbulente. On utilise donc la méthode de loi de paroi de Launder et Spalding (1974) qui modélise les effets de la paroi par l'entremise de la friction qu'elle impose au fluide. On introduit alors :

$$u^* = \left(\frac{\tau_w}{\rho} \right)^{1/2} \quad (2.79)$$

où u^* et τ_w sont la vitesse de friction et le cisaillement à la paroi respectivement.

La couche limite est divisée en deux zones : la zone visqueuse et la zone de loi logarithmique. On définit alors une vitesse universelle adimensionnelle comme :

$$u^+ = \begin{cases} y^+ & , \quad y^+ < 11.6 \\ \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+) & , \quad 11.6 \leq y^+ < 300 \end{cases} \quad (2.80)$$

et

$$y^+ = \frac{\rho y_P u^*}{\mu} \quad (2.81)$$

où y_P est la distance à la paroi du premier point de calcul P comme le montre la figure 2.8. La constante de Karman κ est égale à 0.41 et le coefficient de rugosité E est égal à 9.0.

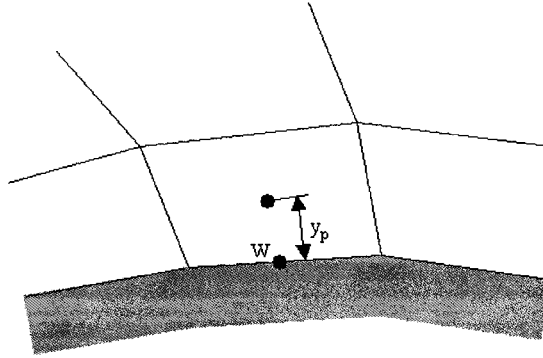


Figure 2.8: Distance du premier point de calcul y_P .

La vitesse de friction est reliée à la vitesse universelle par :

$$u^+ = \frac{u_P}{u^*} \quad (2.82)$$

Finalement, on obtient les valeurs de k et ϵ au point P avec les relations :

$$k_P = \frac{u^{*2}}{C_\mu^{1/2}} \quad (2.83)$$

$$\epsilon_P = \frac{u^{*3}}{\kappa y_P} \quad (2.84)$$

Les valeurs de k_P et ϵ_P sont utilisées comme conditions frontières pour la solution des équations 2.5 et 2.8.

Dans le cas de conditions non adiabatiques, on définit T^+ , une température universelle adimensionnelle de la façon suivante :

$$\begin{cases} T^+ = Pr y^+ & y^+ \leq y_T^+ \\ T^+ = Pr_t (u^+ + \Psi) & y^+ > y_T^+ \end{cases} \quad (2.85)$$

où y_T^+ est la valeur de transition donnée par :

$$y_T^+ = \frac{Pr_t}{\kappa Pr} (\ln(Ey_T^+) + \Psi\kappa) \quad (2.86)$$

La fonction empirique Ψ est la corrélation de Jayatilleke (1969) suivante :

$$\Psi = 9.24 \left[\left(\frac{Pr}{Pr_t} \right)^{3/4} - 1 \right] \left[1 + 0.28 \exp \left(-0.007 \frac{Pr}{Pr_t} \right) \right] \quad (2.87)$$

On impose donc une température de paroi T_w et on a le flux de chaleur correspondant suivant :

$$\dot{q}_w = u^* \frac{\rho C_p (T_P - T_w)}{T^+} \quad (2.88)$$

Les conditions pour les autres variables sont obtenues en supposant que les parois sont adiabatiques et que les espèces chimiques ne les traversent pas. On a donc pour tout scalaire ϕ :

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad (2.89)$$

2.5 Code BOILER-II

Le code BOILER-II (Tye (2001)) a été développé pour modéliser la circulation d'eau et les caractéristiques du transfert de chaleur des chaudières à circulations

naturelle et assistée. Le code BOILER-II utilise un modèle diphasique à écart de vitesses à une dimension ($1VDFT_k T_{SAT}$: tableau 1.2). Dans ce modèle, l'écoulement est représenté par l'équation du mélange et par un terme correctif qui est ajouté dans les équations de conservation du mélange pour tenir compte de la différence des vitesses entre les phases liquide et vapeur. À la différence des autres codes de circulation et des méthodes utilisées dans l'industrie des chaudières, le code BOILER-II utilise une représentation complètement discrétisée des tubes de la chaudière similaire aux codes de l'industrie nucléaire. Malgré l'augmentation des détails comparativement aux autres méthodes de calcul de la circulation d'eau dans les chaudières industrielles, une certaine quantité d'information est quand même perdue. Ceci est dû au fait que BOILER-II utilise une représentation 1-D des phénomènes physiques de l'écoulement diphasique dans les tubes. En réalité, même dans un tube, il se produit des phénomènes tridimensionnels. Le code BOILER-II incorpore donc certains modèles phénoménologiques pour la détermination du régime de l'écoulement, la prédiction du flux de chaleur critique (CHF), la prédiction de limites anisothermes ainsi qu'un modèle d'ébullition sous-refroidie (Thurgood et al. (1981)). Le code BOILER-II calcule aussi les températures internes et externes des tubes et tient compte de l'influence de l'encrassement des tubes. Finalement, le code peut modéliser la circulation d'eau-vapeur dans les chaudières contenant un seul circuit d'eau ou des circuits d'eau multiples circulant indépendamment.

2.5.1 Équations de conservation de BOILER-II

Comme on l'a déjà mentionné, le code BOILER-II utilise un modèle unidimensionnel à écart de vitesses de l'écoulement diphasique. Dans ce modèle l'écoulement est représenté en terme des équations du mélange. Un terme correctif est ajouté aux équations de conservation de base du mélange, car les phases vapeur et liquide

ont des vitesses différentes.

2.5.1.1 Conservation de la masse du mélange

L'équation de conservation de la masse du mélange à une dimension en régime permanent est donnée par :

$$\Delta x \frac{\partial}{\partial x} F_m = 0 \quad (2.90)$$

où F_m est le débit massique du mélange satisfaisant la définition suivante :

$$F_m = A \rho_m u_m \quad (2.91)$$

où u_m est la vitesse du mélange diphasique et ρ_m est la densité du mélange qui est définie par la proportion de la fraction de vide et par les densités de phases individuelles.

$$\rho_m = (1 - \alpha) \rho_l + \alpha \rho_v \quad (2.92)$$

La fraction de vide α est définie comme le rapport de l'aire prise par la phase vapeur à l'aire de l'écoulement entière dans le tuyau :

$$\alpha = \frac{A_v}{A_l + A_v} \quad (2.93)$$

où A_v est l'aire de la section transversale de la phase vapeur et A_l est l'aire de la section transversale de la phase liquide. Puisque la fraction de vide n'est pas une quantité calculée directement dans les équations de conservation, elle doit être

spécifiée en utilisant la relation taux de vide-titre donnée par :

$$\alpha = \frac{x}{x + (1 - x) \frac{\rho_v}{\rho_l}} \quad (2.94)$$

où x est le titre défini par l'équation suivante :

$$x = \frac{M_g}{M_g + M_l} \quad (2.95)$$

où M_g et M_l sont respectivement les masses des phases gazeuse et liquide obtenues lorsque l'écoulement est arrêté.

2.5.1.2 Équation de conservation de la quantité de mouvement du mélange

L'équation de la quantité de mouvement du mélange à une dimension en régime permanent est donnée par :

$$\begin{aligned} \Delta x \frac{\partial}{\partial x} F_m u_m + \Delta x \frac{\partial}{\partial x} A \frac{\alpha (1 - \alpha) \rho_l \rho_v}{\rho_m} u_r^2 = \\ - A \Delta x \frac{\partial}{\partial x} p_m - \mathcal{F}(A, K, |F|, F) - A \Delta x \rho_m g_x \end{aligned} \quad (2.96)$$

Les termes de gauche de l'équation (2.96) tiennent compte de la chute de pression à cause de l'accélération de l'écoulement qui survient lors du changement de phase. Le premier terme de droite de l'équation représente le changement de pression dans le tube, le terme suivant tient compte des pertes de pression par friction et le dernier terme représente les pertes de pression gravitationnelle (ou les gains dans le cas d'un tuyau descendant).

2.5.1.3 Équation de conservation de l'énergie du mélange

L'équation de conservation de transport de l'énergie du mélange à une dimension en régime permanent est donnée par :

$$F_m \Delta x \frac{\partial}{\partial x} h_m + \Delta x \frac{\partial}{\partial x} \frac{\alpha(1-\alpha)\rho_l\rho_v}{\rho_m} (h_v - h_l) A u_r = - \iint_{A_{mw}} \hat{n}_{mw} \cdot \vec{q}_m dA \quad (2.97)$$

Le premier terme de l'équation (2.97) représente le flux d'enthalpie transporté par l'écoulement dans le tube et le deuxième terme représente la contribution de la vitesse relative au flux d'enthalpie. Plus spécifiquement, ce terme tient compte du fait que la phase vapeur a une enthalpie plus élevée que la phase liquide et la phase vapeur se déplace avec une vitesse plus élevée que le mélange. Le terme final de l'équation (2.97) représente la contribution du flux de chaleur provenant du mur sur le bilan de l'enthalpie globale.

2.6 Logiciel MpCCI

Le but de cette thèse est de développer un modèle physique permettant de transférer des quantités surfaciques (STAR-CD) à des quantités ponctuelles (BOILER-II). Il s'agit de passer les flux de chaleur au code BOILER-II. Ces flux de chaleur proviennent de la simulation du côté feu dans la chaudière avec STAR-CD. Ensuite, la température à la paroi des tubes est fournie au code STAR-CD après le calcul de la circulation d'eau par le code BOILER-II. La correspondance nécessaire et l'interpolation des quantités seront faites par l'entremise d'un logiciel nommé MpCCI.

Le logiciel MpCCI (Mesh-based parallel Code Coupling Interface) permet d'échanger

de l'information entre plusieurs codes de calculs qu'ils s'agissent de codes de CFD, de structure ou de codes d'analyse thermique, etc. MpCCI peut être considéré comme MPI (Message Passing Interface) mais à un niveau plus élevé. MpCCI est situé entre l'application et la librairie MPI. Au lieu de transférer seulement des données, d'un processus à un autre, MpCCI prend en compte les maillages sur lesquels les données sont localisées. Ainsi, des outils de recherche de voisins et d'interpolation sont fournis par MpCCI. En plus, MpCCI est capable de supporter plusieurs maillages définis à l'intérieur de chaque code.

MpCCI est indépendant de la stratégie de parallélisation utilisée par un code. Il intègre les programmes SPMD (Single Program Multiple Data) aussi bien que les programmes MPMD (Multiple Program Multiple Data). Il peut aussi bien fonctionner sur un ou plusieurs processeurs que sous différentes plates-formes incluant Windows et Linux.

Il est possible d'inclure n'importe quels schémas d'interpolation utiles et nécessaires pour des applications spéciales. La structure dans MpCCI est montrée à la figure 2.9.

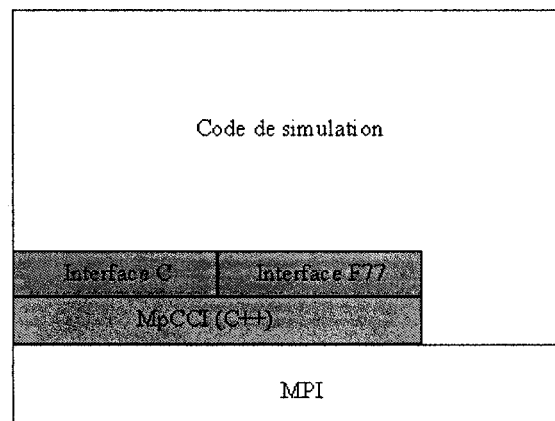


Figure 2.9: Structure de MpCCI lors d'un processus.

Les valeurs transférées par MpCCI sont ce qu'on appelle des quantités. Une quantité peut être n'importe quelle variable utilisée dans n'importe quel code. La vitesse, la température, le pas de temps sont des exemples typiques de quantités. Les quantités sont associées à des noeuds définis sur différents types d'éléments tels que des triangles, des quadrilatères, des pentagones, etc.

MpCCI supporte deux genres de concepts pour l'échange de données. Le premier concept est ce qu'on appelle la communication «blocking» et «non-blocking» similaire à MPI. Ce concept consiste à envoyer ou à recevoir des données. C'est-à-dire qu'un processus ne peut envoyer et recevoir de l'information simultanément. Ce concept n'est pas utilisé par l'interface qu'on veut développer. Le deuxième concept qui est beaucoup plus approprié est ce qu'on appelle les points de synchronisation. Ce concept offre l'opportunité d'une communication bidirectionnelle. Ainsi, un processus atteignant un point de synchronisation peut envoyer et recevoir de l'information simultanément. Ce concept est utilisé par l'interface que l'on a implanté, car il permet d'avoir une rétroaction entre les 2 codes. La figure 2.10 montre un schéma typique du concept des points de synchronisation.

L'échange de quantités basées sur le maillage de part et d'autre des codes n'est pas une tâche triviale. Ceci est causé par les différences de discrétisation de base dans les codes de simulation numérique; les données à coupler sont habituellement arrangées sur des maillages différents structurés ou non-structurés. Un exemple de maillages à coupler est montré à la figure 2.11.

MpCCI effectue donc la recherche des noeuds et des éléments et l'interpolation entre les maillages pour réaliser l'échange des valeurs à coupler. Le problème principal est de déterminer la correspondance entre les surfaces de chacun des codes. Cette correspondance est ce qu'on appelle le calcul et la recherche des noeuds et des éléments voisins. Ensuite, les valeurs à coupler sont interpolées

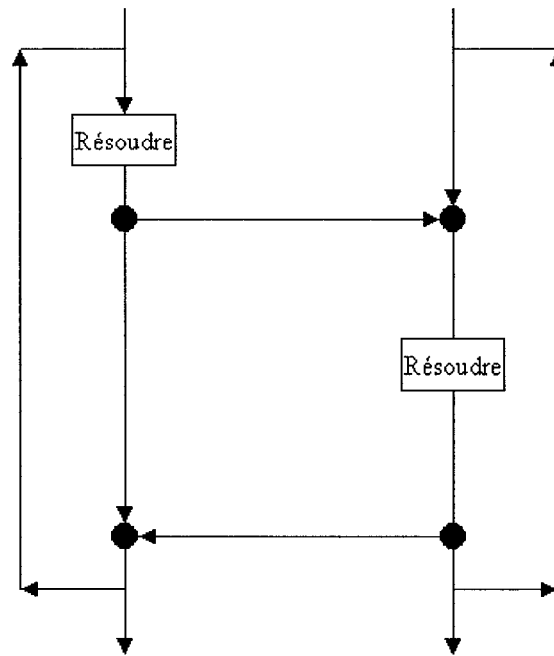


Figure 2.10: Schéma du concept des points de synchronisation.

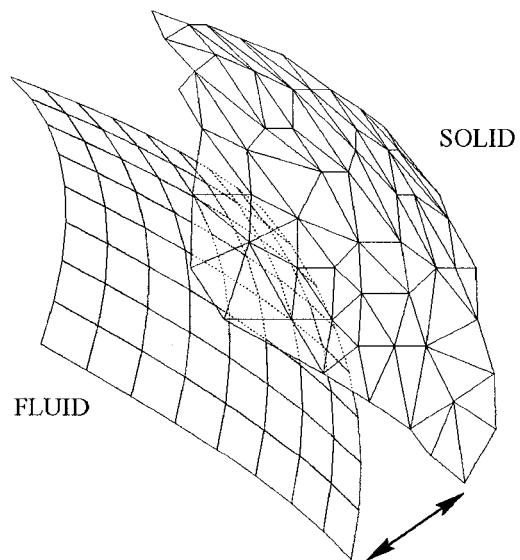


Figure 2.11: Échange de données entre deux maillages non-correspondants (la distance est exagérée).

linéairement ou bilinéairement dépendant du type d'éléments. L'utilisateur peut aussi choisir entre une interpolation conservative (énergie, force, etc.) et non-conservative (température, pression, flux de chaleur, etc.).

MpCCI permet de transférer des quantités de surface à surface. Il ne permet pas de transférer des informations de surfaces à des informations ponctuelles (noeuds). Il est utilisé ainsi pour transférer les informations de surface du code STAR-CD au code BOILER-II. Puisque BOILER-II est unidimensionnel, on a implanté des modèles physiques pour transformer l'information surfacique à de l'information ponctuelle c'est-à-dire aux noeuds du maillage dans le code BOILER-II.

CHAPITRE 3

INTERFACE STAR-CD(CMBLIB)/BOILER-II

Dans les sections précédentes, on a grandement discuté de programmes et de modèles pouvant traiter séparément les différentes composantes d'une chaudière industrielle. Dans ce chapitre, on présente la méthodologie adoptée pour coupler ces programmes et modèles pour faire la simulation d'une chaudière complète.

3.1 Méthodologie

L'état de connaissances actuel consiste à faire les approximations suivantes afin d'imposer les conditions frontières aux murs d'une chaudière.

- Pour le côté feu :

On impose une température constante sur les parois dans le foyer (température de saturation de l'eau à la pression d'opération de la chaudière et un ΔT à cause de l'échauffement de la paroi du tube et du coefficient de transfert de chaleur interne) et un puits de chaleur volumique dans les banques de tubes puisque les tubes ne sont pas discrétisés.

- Pour le côté eau :

On utilise un flux de chaleur fourni par le manufacturier pour un mur complet du foyer ou pour une section dans les banques de tubes.

Il est certainement possible d'utiliser les résultats des simulations numériques du côté feu comme conditions frontières pour le côté eau. Cependant, sans interface cette opération, qui doit être réalisée à la main, est très laborieuse. Les résultats seront plus précis, mais il n'y aura toujours pas de rétroaction du côté eau sur le côté feu de l'influence des conditions frontières locales (exemple : température locale des parois sur l'écoulement). Une précision accrue ne sera possible qu'en imposant des conditions frontières variables, c'est-à-dire qui varient localement en fonction de l'interdépendance des phénomènes physiques du côté feu et du côté eau de la chaudière.

La meilleure façon d'imposer ces conditions frontières variables serait de coupler les deux codes. Ceci implique donc de coupler un code 3-D (STAR-CD) et un code 1-D (BOILER-II). Ainsi, en lui passant le flux de chaleur, BOILER-II, retourne la température des parois à STAR-CD et réciproquement jusqu'à l'obtention d'une solution convergée. Une des difficultés est de communiquer l'information d'un code à l'autre.

Une autre difficulté est de faire correspondre le maillage des tubes 1-D de BOILER-II au maillage des parois du foyer et des tubes dans les banques de tubes de convection de la simulation numérique du côté feu de STAR-CD. Le passage de l'information d'un maillage à l'autre se fera en deux étapes.

1. Dans la première étape, on traite les parois de tubes dans le foyer de la chaudière. Cette étape se divise également en deux opérations.
 - La première consiste à traiter les murs qui ne touchent pas la banque de convection. Ces murs reçoivent un flux de chaleur convectif et radiatif, lumineux et non-lumineux, du côté du foyer et ils sont isolés à l'extérieur.

- La deuxième opération est le mur séparant le foyer de la banque de tubes de convection. Ce mur reçoit du côté du foyer un flux de chaleur convectif et radiatif, lumineux et non-lumineux, tandis que, du côté de la banque de convection le mur reçoit un flux de chaleur convectif et radiatif non-lumineux uniquement car il ne voit pas la flamme. Il s'agit donc de passer une information de surface à une information en un point et réciproquement.

2. Cette étape consiste au traitement des banques de tubes qui reçoivent un flux de chaleur convectif et radiatif non-lumineux. Il s'agit ici aussi de passer d'une information de surface à une information ponctuelle et réciproquement. Puisqu'il s'agit de passer un flux de chaleur au code BOILER-II et d'imposer une température sur les parois des tubes, on a besoin de la surface des tubes. Il faut donc discrétiser les tubes. Discrétiser tous les tubes nécessiterait des maillages énormes donc des ressources informatiques beaucoup trop importantes. Pour pallier à cet inconvénient, les tubes sont discrétisés de manière carrée tout en conservant la surface d'échange. Ceci permet de diminuer énormément la quantité d'éléments de calcul comparativement à des tubes ronds. On peut voir à la figure 3.1, la géométrie simplifiée d'un tube. La figure 3.2 montre le maillage d'une partie de la banque de tubes.

De plus, une difficulté provient du fait que les maillages de part et d'autre des deux codes ne correspondent pas. En effet, pour le maillage 1-D des tubes dans BOILER-II, la taille de l'élément est constante. Les sections coudées sont représentées par une section droite avec un angle. Un facteur de perte de charge tient compte des pertes dues aux coudes. Tandis que pour le maillage 3-D dans STAR-CD, la taille des éléments varie et les parties coudées sont complètement discrétisées pour les parois du foyer et les parois externes des banques de tubes.

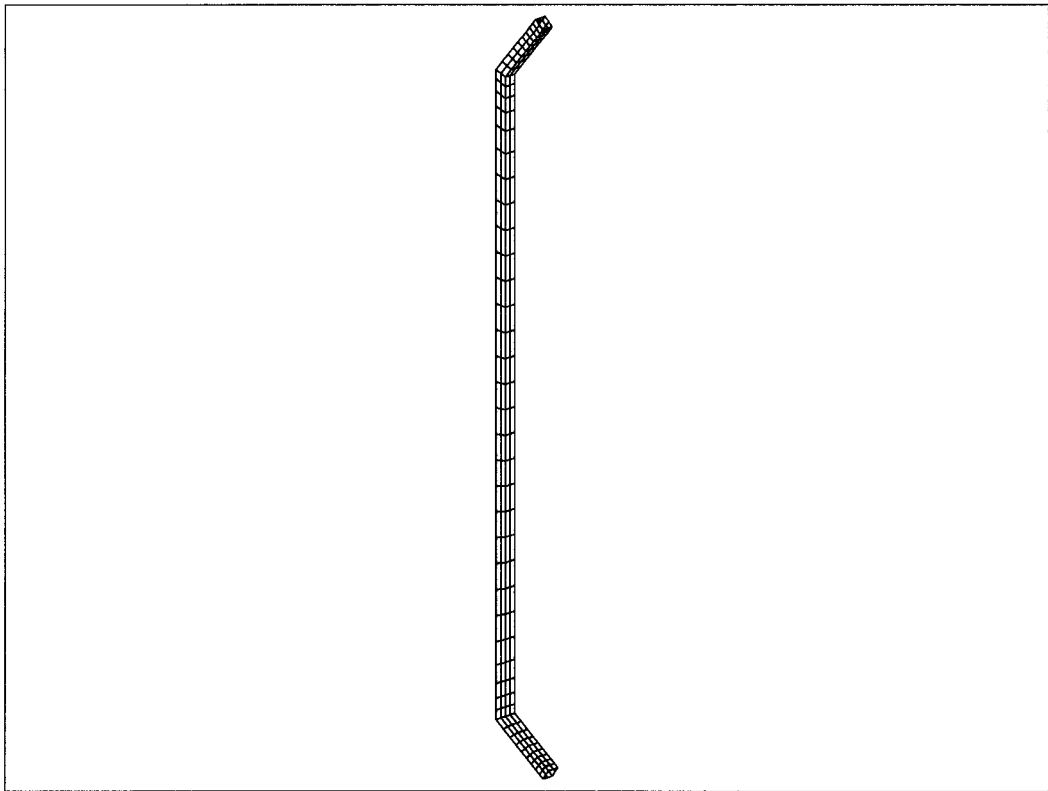


Figure 3.1: Tube carré simplifié.

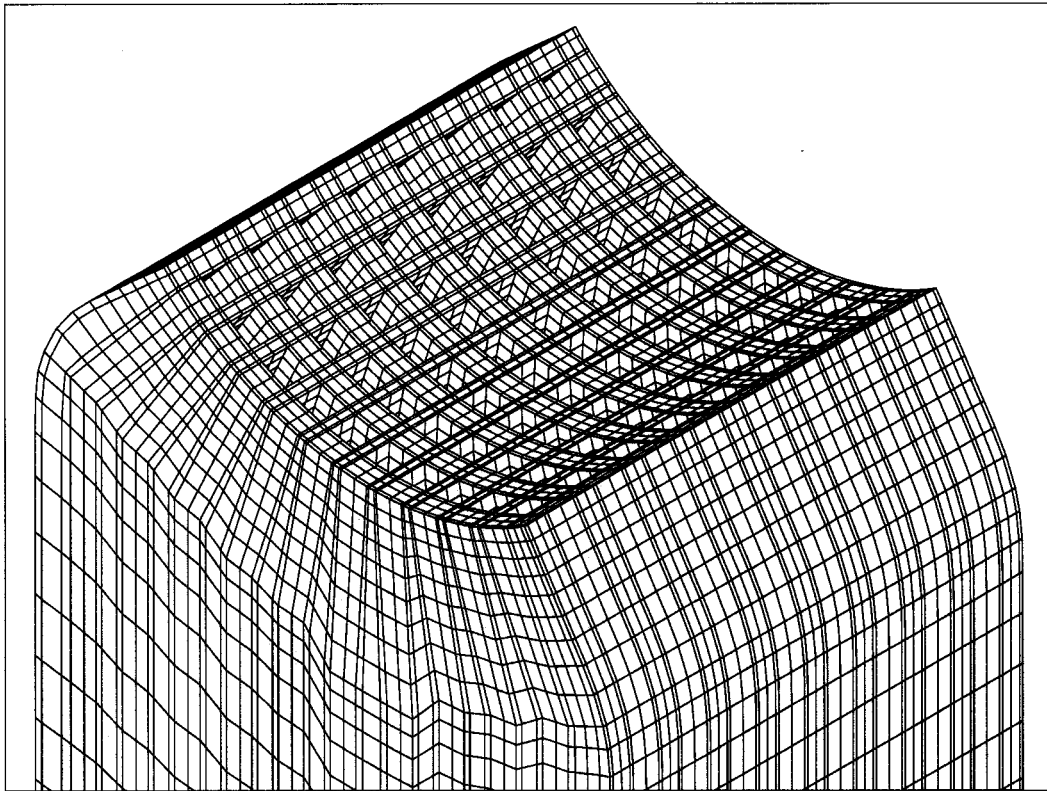


Figure 3.2: Maillage d'une section de la banque de tubes avec des tubes carrés.

Les murs dans les chaudières étant représentés par une surface plate et les tubes dans les banques de tubes étant carrés, une certaine modélisation pour le côté feu doit être faite pour ce qui est des coefficients de transfert de chaleur ainsi que de la perte de charge dans les banques de tubes. La section suivante explique comment cette modélisation a été faite.

3.2 Modélisation d'une chaudière

Une chaudière contient plusieurs composantes : brûleurs, pré-chauffeurs, surchauffeurs, économiseur, banques de tubes, etc. Il serait possible de discrétiser toutes ces composantes avec plusieurs giga-octets de mémoire (RAM Memory). Cependant, le but étant d'utiliser la simulation numérique comme outil de design industriels, les coûts et le temps de calcul sont les facteurs majeurs qui doivent être les plus bas possibles. Les simulations doivent être exécutées sur des stations de travail abordables et en moins de 2 à 3 semaines de temps de calcul. Il est donc nécessaire de faire un traitement spécial pour les murs tubés et les banques de tubes qui requièrent un très grand nombre d'éléments de discrétisation.

3.2.1 Murs tubés

Les murs du foyer d'une chaudière sont couverts avec de la brique réfractaire et/ou des tubes d'acier transportant l'eau. La surface des parois tubées est donc ondulée; le transfert de chaleur et l'écoulement à la paroi sont donc différents de celui adjacent à un mur plat. La surface ondulée crée de petites recirculations locales, dans l'espace entre les tubes, améliorant localement le transfert de chaleur convectif. Mailler entièrement la surface des murs tubés avec une résolution suffisante pour capter adéquatement ces phénomènes requiert un maillage trop fin. Les murs

du foyer doivent être discrétisés par une surface plane tout en tenant compte du transfert de chaleur convectif accru par la surface tubée. Le code STAR-CD a donc été utilisé comme banc d'essai pour développer des corrélations. À cette effet, des sections de murs tubés et plats ont été complètement discrétisés et simulés pour différentes conditions. Les résultats obtenus ont permis de trouver la corrélation numérique suivante :

$$h_{htw} = h_c \frac{S_{TW}}{S_{HC}} C_{TW} \quad (3.1)$$

où h_{htw} est le coefficient de transfert de chaleur corrigé pour des murs tubés, h_c est le coefficient de transfert de chaleur déterminé par le code pour des murs plats, S_{TW} est l'aire de la surface plane des murs tubés dans le foyer, S_{HC} est l'aire de la demi-surface tubée, en accord avec l'American Boiler Manufacturer Association Standard et C_{TW} est le facteur de correction pour les murs tubés. La valeur de C_{TW} varie selon le diamètre du tube et l'espacement entre les tubes.

3.2.2 Banques de tubes

Les banques de tubes représentent une restriction assez importante de l'écoulement à la sortie du foyer. Négliger la perte de pression dans les banques de tubes affecte sérieusement les champs de vitesse dans le foyer. La densité du maillage nécessaire pour discrétiser adéquatement chacun des tubes dans les banques étant trop élevée, il est donc nécessaire de modéliser les banques de tubes.

3.2.2.1 Chute de pression

Pour limiter la quantité d'éléments requise, les banques de tubes sont traitées comme des milieux semi-poreux. Ceci est accompli par l'introduction d'un terme

source (puits) dans l'équation de la quantité de mouvement de la forme suivante :

$$S_{u_i} = S_1 - S_2 u_i \quad (3.2)$$

où

$$\begin{aligned} S_1 &= 0.0 \\ S_2 &= \alpha |\mathbf{U}| + \beta \end{aligned}$$

Les valeurs de α et β sont déterminées en fonction de la perte de charge prévue par unité de longueur dans la banque de tubes :

$$\frac{\partial p}{\partial x_i} = -(\alpha |\mathbf{U}| + \beta) u_i \quad (3.3)$$

La perte de charge par unité de longueur $\partial p / \partial x_i$ pour une configuration de banque de tubes donnée est obtenue à partir de corrélations empiriques (Holman (1990), Kreith et Black (1980)). Ces corrélations empiriques donnent une perte de charge globale pour la banque de tubes entière. Cette approximation grossière est suffisante si on ne s'intéresse pas aux détails de l'écoulement dans la banque de tubes.

Si une solution plus précise de l'écoulement à l'intérieur des banques de tubes est nécessaire, une meilleure estimation de la perte de charge est requise. Des corrélations pour la perte de charge par unité de longueur en fonction de la vitesse locale ont été conçues en discrétisant une partie représentative de la banque de tubes.

Pour une chaudière de type D, on a discrétisé une section de la banque de 10 par 10 tubes et une section de 5 par 20 tubes. Le diamètre extérieur du tube est de 2.5 pouces, la distance parallèle Sp et la distance normale Sn entre les tubes sont de 3.75 pouces et 4 pouces respectivement. La figure 3.3 montre la configuration

des tubes.

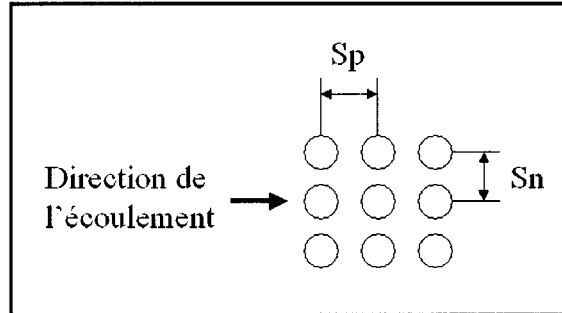


Figure 3.3: Configuration des tubes pour une banque de tubes de chaudière de type D.

Les maillages utilisés pour ces deux simulations sont montrés aux figures 3.4, 3.5 et 3.6 respectivement.

Des simulations ont été effectuées pour différentes conditions de vitesses d'entrées qui correspondent aux vitesses de l'écoulement moyen lorsque la chaudière fonctionne à différentes capacités. Des données ont été extraites de ces simulations comme celles des figures 3.7 et 3.8 pour établir les nouvelles corrélations. Les figures 3.7 et 3.8 montrent respectivement la distribution de pression et de vitesse le long de la ligne de centre de la banque de tubes.

Ces données ont été traitées pour exprimer la perte de charge par unité de longueur en fonction de la vitesse et de la température du fluide. L'équation 3.4 est la nouvelle corrélation de la perte de charge pour une banque de tubes de chaudière de type D.

$$\frac{dp}{dz} = (C_1 + C_2|\mathbf{U}|)^2 \left(\frac{Pa}{m} \right) \quad (3.4)$$

où $|\mathbf{U}|$ est le module du vecteur vitesse local pour un débit massique donné, une densité et une section de passage entre les tubes fixes.

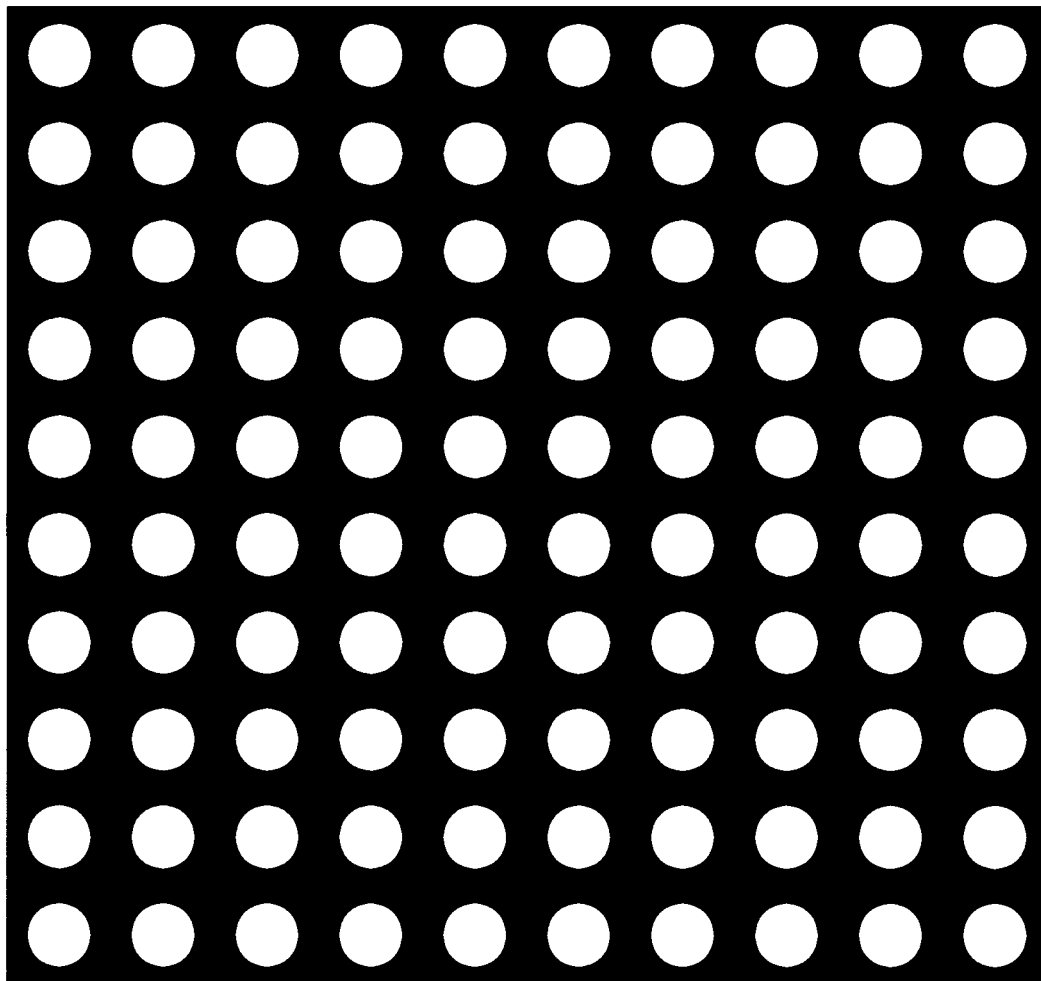


Figure 3.4: Vue de plan du maillage de 10 par 10 tubes.

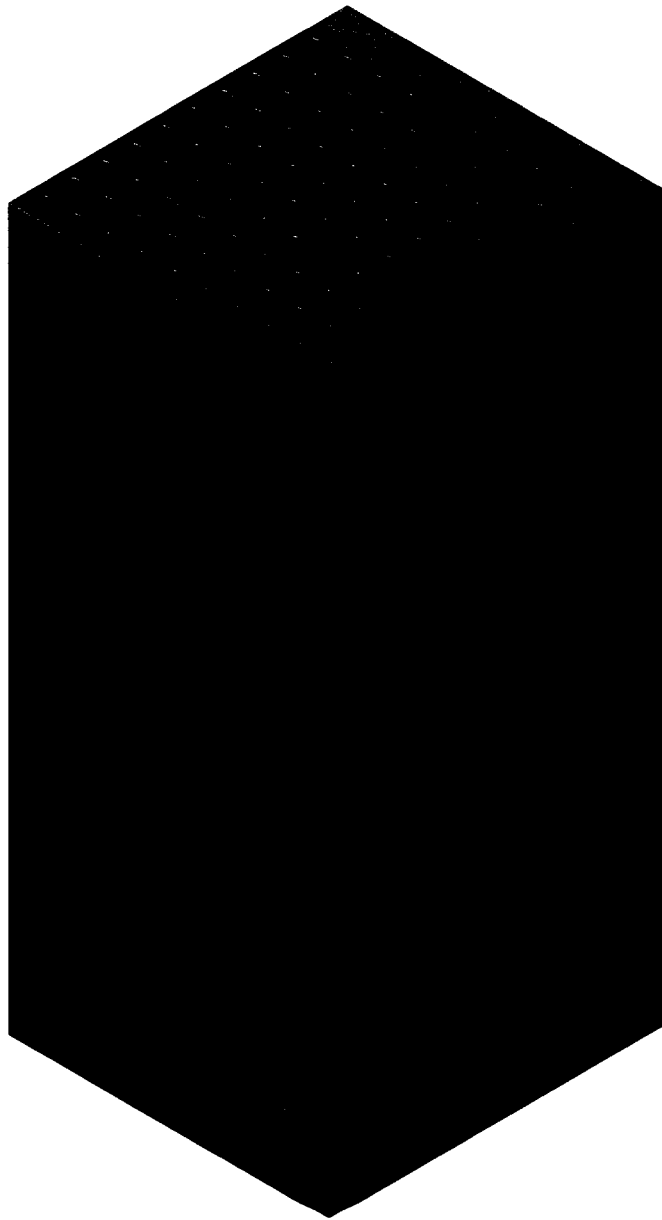


Figure 3.5: Vue isométrique de la banque de 10 par 10 tubes.



Figure 3.6: Vue isométrique de la banque de 5 par 20 tubes.

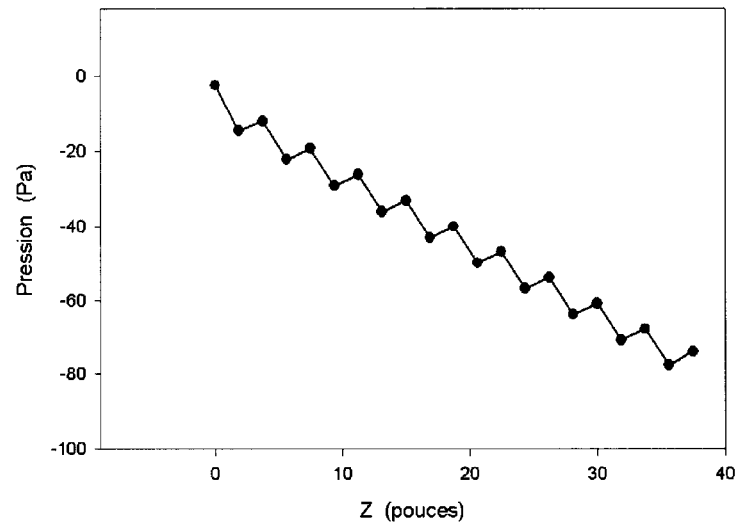


Figure 3.7: Distribution de pression le long de la ligne du centre de la banque de tubes.

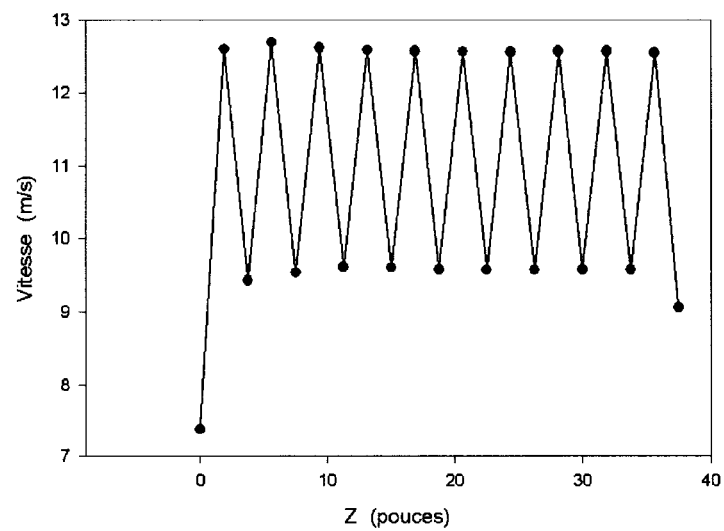


Figure 3.8: Distribution de vitesse le long de la ligne du centre de la banque de tubes.

La valeur de $|U|$ est déduite des calculs de la banque de tubes en corrigeant la vitesse prédite pour une section de passage effective. L'influence de la température sur dp/dz est prise en compte en utilisant la vitesse prédite qui est fonction de la variation de la densité et de la température.

Pour vérifier les nouvelles corrélations et montrer l'amélioration comparativement aux anciennes corrélations de Kreith et Black (1980), on a effectué une série de simulations de la banque de tubes d'une chaudière de type D. Les résultats de ces simulations sont comparés à ceux du manufacturier, qui utilise ses propres corrélations empiriques corrigées par 50 ans d'expérience, et à ceux de Kreith et Black (1980). La perte de charge et la température sont montrées aux figures 3.9 et 3.10 respectivement.

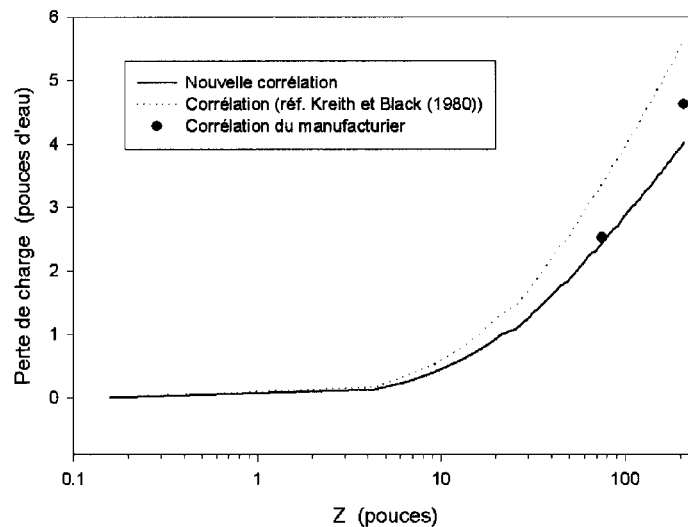


Figure 3.9: Perte de charge le long de la banque de tubes de la chaudière de type D.

On remarque que les nouvelles corrélations donnent des résultats plus près des corrélations du manufacturier que celles de Kreith et Black (1980) que ce soit pour la perte de charge ou pour la température des gaz.

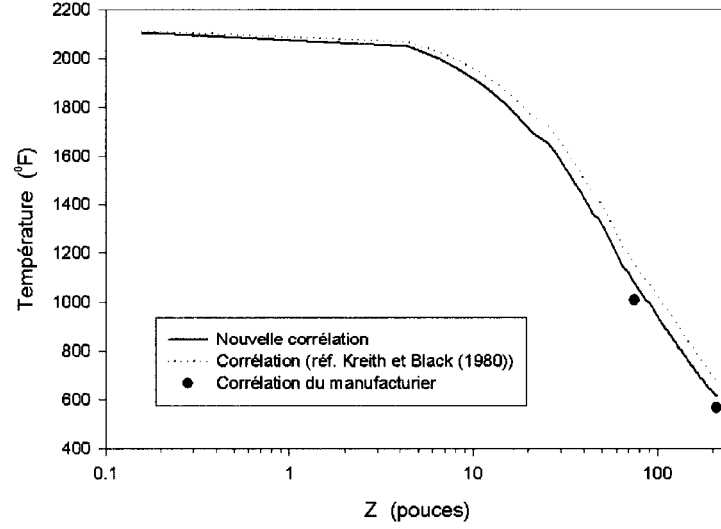


Figure 3.10: Température le long de la banque de tubes de la chaudière de type D.

Ces corrélations sont plus précises puisque α et β varient localement. Les nouvelles corrélations ont été établies pour différentes configurations de banques de tubes et de diamètres de tubes. Chaque corrélation est spécifique à une géométrie de banque de tubes. Les coefficients de perméabilité étant fonction de la perte de charge, on obtient :

$$\alpha = \frac{\left[C_1 + C_2 \left(|\mathbf{U}| \frac{A_{total}}{A_{libre}} \right) \right]^2}{|\mathbf{U}|^2} ; \quad \beta = 0.01\alpha \quad (3.5)$$

où C_1 et C_2 sont des constantes, A_{total} est l'aire normale à la direction principale de l'écoulement dans la banque de tubes, A_{libre} est l'aire de la section de passage entre les tubes de la banque de tubes et $|\mathbf{U}|$ est la grandeur du vecteur vitesse local.

3.2.2.2 Transfert de chaleur

La chaleur transférée aux tubes par convection et rayonnement doit être modélisée car les tubes sont discrétisés en les supposant carrés. Pour ce faire, on modifie de la façon suivante les coefficients de transfert de chaleur convectif (h_c) de Kreith et Black (1980) et de rayonnement non-lumineux (h_{nl}) en fonction de la vitesse et de la température locales :

$$h_c = \frac{\left(\frac{|\mathbf{U}| \rho A_{total} d}{A_{libre}} \right)^{0.06}}{(C_3 - C_4 T) d} \quad (3.6)$$

$$h_{nl} = (C_5 - C_6 T) \quad (3.7)$$

où C_3 , C_4 , C_5 et C_6 sont des constantes de corrélations établies numériquement. Le coefficient de transfert de chaleur corrigé est donné par :

$$h_{corr} = (h_c + h_{nl}) \cdot (T_{tube} - T) \quad (3.8)$$

où T_{tube} est la température des tubes dans les banques de tubes : la température de saturation de l'eau à la pression d'opération de la chaudière plus un certain ΔT qui tient compte du coefficient interne de transfert de chaleur et de la conduction à travers la paroi du tuyau. Le calcul de ΔT est donc fonction de l'épaisseur du tube et du type d'acier.

CHAPITRE 4

RÉSULTATS ET ANALYSE

On a établi au chapitre précédent une procédure de modélisation et de couplage du côté feu et du côté eau de chaudières industrielles. Le couplage a été effectué sur une chaudière de type D puisqu'il s'agit d'une géométrie simple. Deux simulations numériques sont faites sur la même géométrie, une avec le couplage du côté feu et du côté eau simultanément et l'autre sans couplage. La simulation sans couplage a été effectuée sans la discrétisation des tubes. Dans ce cas, des termes sources (puits) volumiques sont utilisés dans l'équation de conservation de l'énergie pour représenter l'absorption d'énergie des produits de combustion chauds, car les tubes ne sont pas physiquement présents dans les banques de tubes.

Les simulations numériques ont été effectuées sur un ordinateur IBM RISC 6000 POWER3-II de 375 MHz avec 4 processeurs. Après une série de raffinements successifs du maillage près des parois nécessaires au modèle de turbulence $k-\epsilon$ avec une loi de paroi, la simulation avec le couplage a été effectuée en 3 étapes. Premièrement, pendant une semaine en parallèle sur les 4 processeurs, on simule seulement le côté feu de la chaudière (sans rayonnement) avec STAR-CD (CMBLIB) pour obtenir un champ convergé de la température et des concentrations massiques des espèces. Deuxièmement, on effectue la simulation pendant un autre semaine avec le rayonnement en milieu participant, mais sur un seul processeur puisque le modèle de rayonnement en milieu participant du logiciel STAR-CD n'est pas parallélisable. Finalement, on effectue le couplage entre STAR-CD et BOILER-II pendant une journée, ce qui est suffisant pour obtenir une solution convergée avec chacun des logiciels. Dans le cas de la simulation sans couplage, seulement les 2 premières

étapes ont été effectuées.

4.1 Caractéristiques de la chaudière

La chaudière de type D que l'on a choisie pour faire les deux simulations a une puissance de 29.14 MW (99.44 MMBTU/hr). Les caractéristiques de la chaudière sont données au tableau 4.1. La géométrie de la chaudière est montrée à figure 4.1.

Tableau 4.1: Caractéristiques générales de la chaudière de type D.

Puissance	29.14 MW (99.44 MMBTU/hr)
Débit massique du gaz	0.5242 kg/s (1.1557 lb/s)
Débit massique de l'air	9.9161 kg/s (21.8613 lb/s)
Débit massique total	10.4403 kg/s (23.0170 lb/s)
Excès d'air	10 %
Température moyenne des murs du foyer	485 K (413.3 °F)
Longueur	6.81 m (22.34 pi)
Hauteur (ballon de boue à ballon de vapeur)	3.63 m (11.92 pi)
Largeur du foyer	2.14 m (7.02 pi)
Diamètre des tubes dans le foyer	76.2 mm (3 po)
Aire de la demi-surface tubée dans le foyer	118.7 m ² (1278 pi ²)

La géométrie des deux banques de tubes est montrée à la figure 4.2. Pour une meilleure visualisation de la géométrie des banques de tubes, une vue agrandie et une vue de plan sont montrées aux figures 4.3 et 4.4 respectivement. Le tableau 4.2 donne les caractéristiques de chacune des banques de tubes.

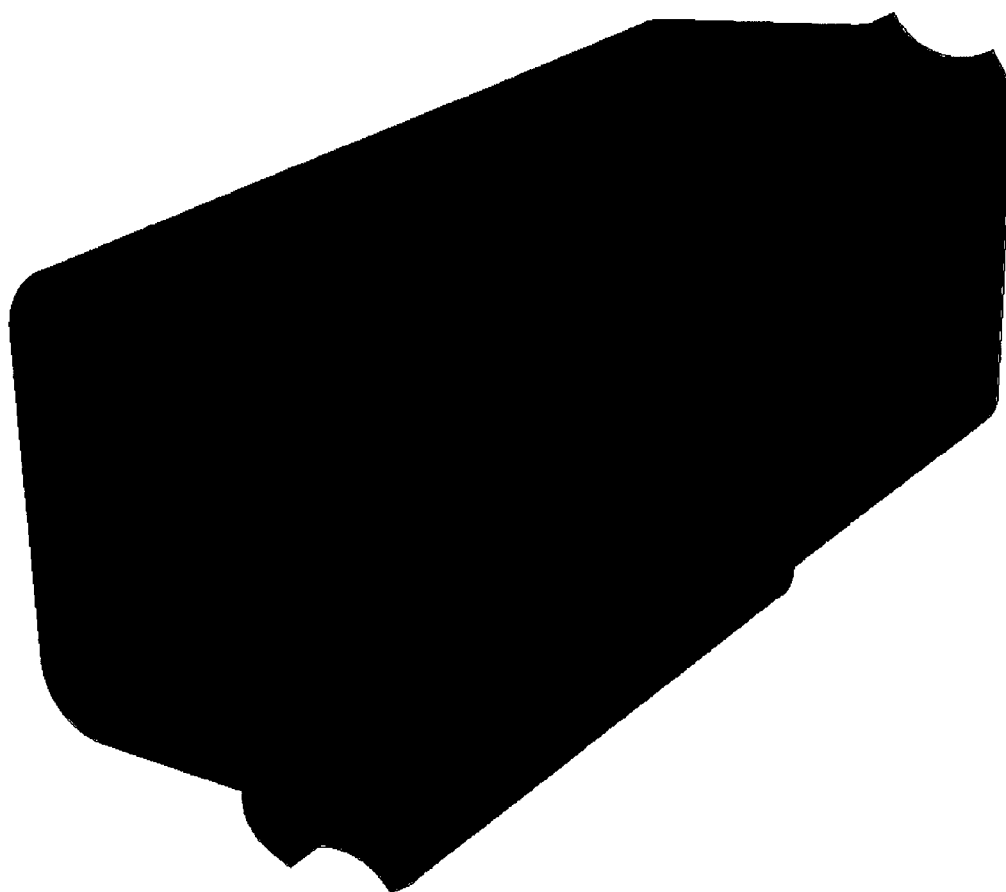


Figure 4.1: Géométrie de la chaudière de type D.

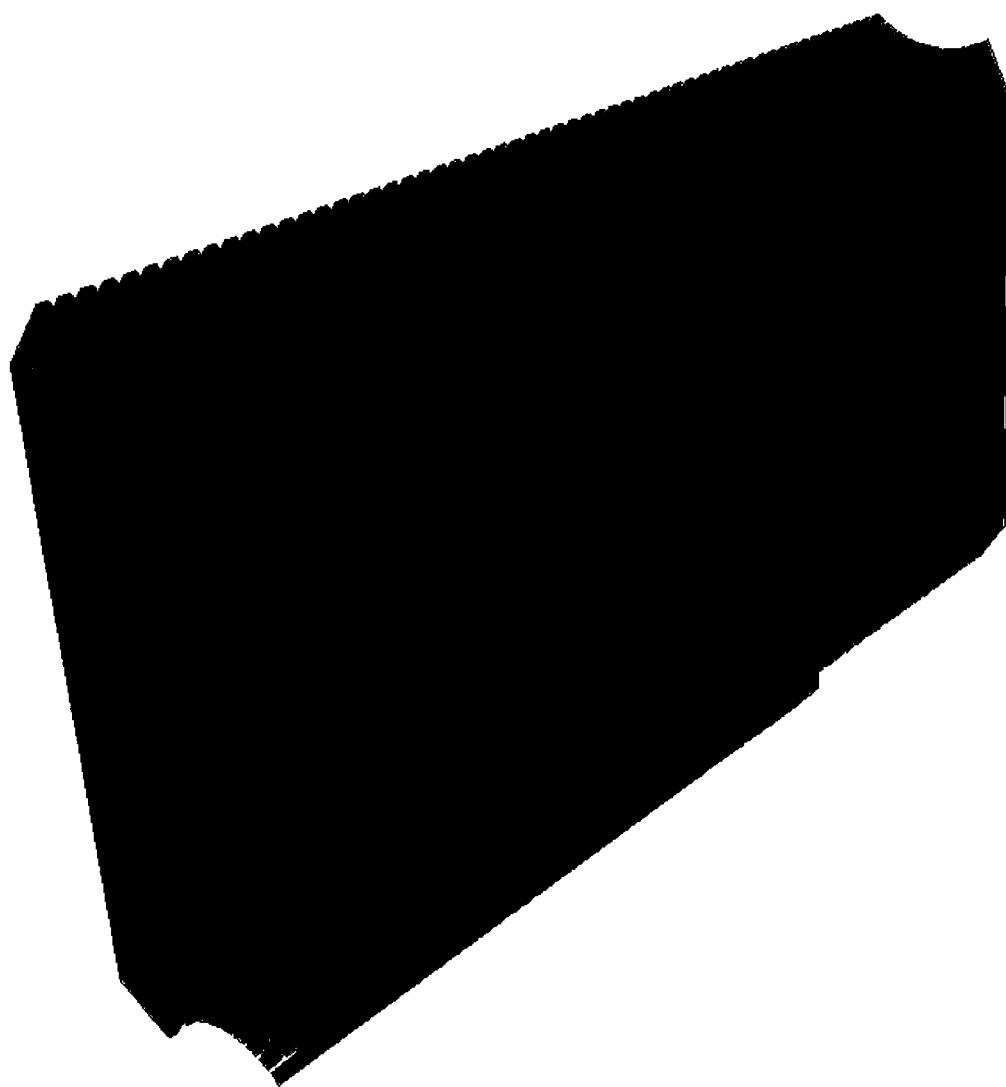


Figure 4.2: Géométrie des banques de tubes.

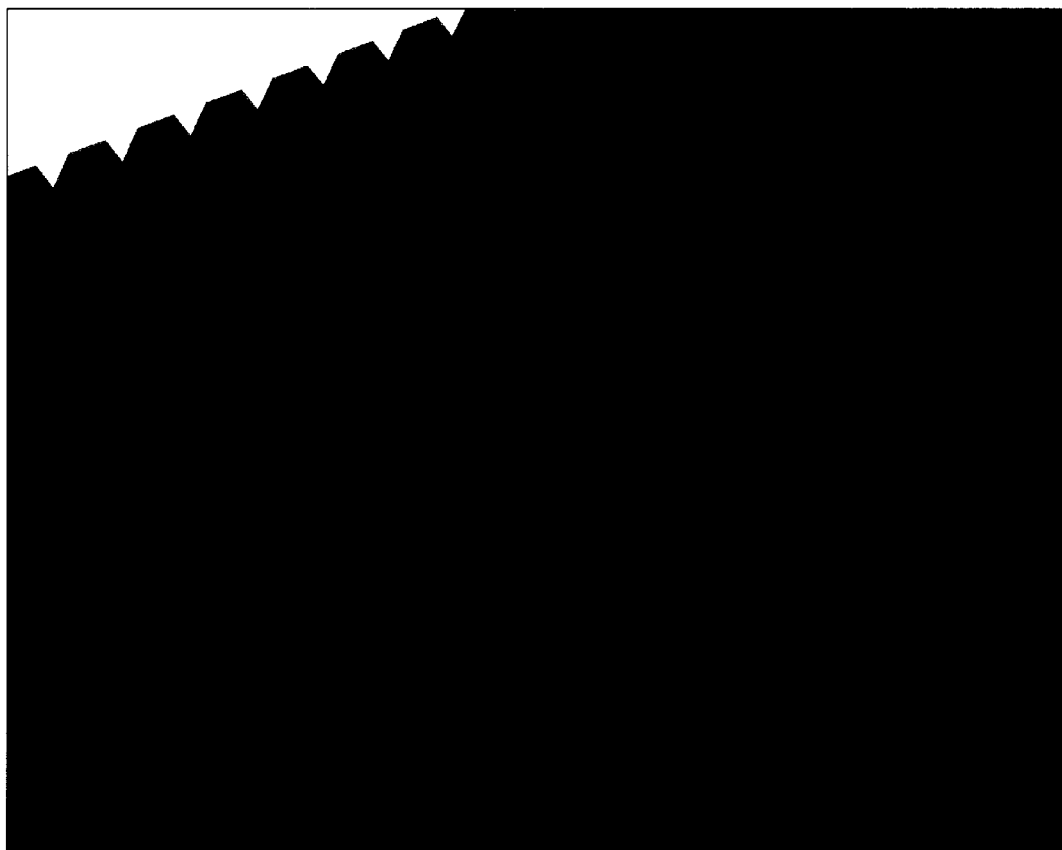


Figure 4.3: Vue agrandie de la géométrie des banques de tubes.

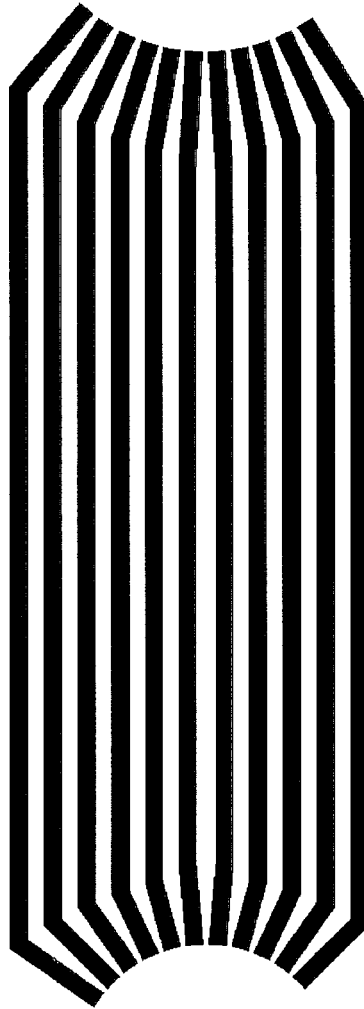


Figure 4.4: Vue de plan de la géométrie des banques de tubes.

Tableau 4.2: Caractéristiques des deux banques de tubes.

PREMIÈRE BANQUE DE TUBES	
Diamètre des tubes	63.5 mm (2.5 po)
Distance normale entre les tubes	101.6 mm (4 po)
Distance parallèle entre les tubes	95.25 mm (3.75 po)
Nombre de rangées de long de tubes	23
Nombre de rangées de large de tubes	9
Longueur de la banque de tubes	1.905 m (6.25 pi)
Aire libre de passage des gaz	1.23 m ² (13.27 pi ²)
Aire effective totale	137.64 m ² (1481.6 pi ²)
DEUXIÈME BANQUE DE TUBES	
Diamètre des tubes	63.5 mm (2.5 po)
Distance normale entre les tubes	101.6 mm (4 po)
Distance parallèle entre les tubes	95.25 mm (3.75 po)
Nombre de rangées de long de tubes	36
Nombre de rangées de large de tubes	10
Longueur de la banque de tubes	3.42 m (11.23 pi)
Aire libre de passage des gaz	1.337 m ² (14.393 pi ²)
Aire effective totale	190.52 m ² (2050.7 pi ²)

Le brûleur au gaz naturel de cette étude est un brûleur à écoulement parallèle typique de ce genre de chaudière. Afin de diminuer le nombre d'éléments de calcul et puisque ce n'est pas le brûleur qu'on caractérise, seulement la section de l'ouvrage du brûleur a été discrétisée. La géométrie du brûleur (4.5) est constituée d'un moyeu central qui supporte 4 injecteurs centraux de gaz à faible vitesse pour stabiliser la flamme, suivis d'une virole à 14 pales. Autour de la virole, il y a l'injection axiale d'air et 8 lances de gaz à haute vitesse injectant le gaz en contre-rotation par rapport à la virole. Les figures 4.5 et 4.6 montrent de façon schématique la géométrie du brûleur et une vue tridimensionnelle de la discrétisation. Les tableaux 4.3 et 4.4 donnent les dimensions et les conditions d'entrées du brûleur respectivement.

Tableau 4.3: Dimensions du brûleur.

R_{centre}	25.43 mm (1.001 po)
R_{ci}	90.75 mm (3.573 po)
R_1	181.5 mm (7.146 po)
R_2	242.3 mm (9.539 po)
R_3	266.5 mm (10.492 po)
R_4	350 mm (13.78 po)
$R_{lancesgaz}$	10.42 mm (0.41 po)
$R_{centrelances}$	28.58 mm (11.25 po)
Longueur de l'ouvreau	233.32 mm (9.186 po)
Angle des pales de la virole	47.5^0
Angle des lances de gaz	45^0

Tableau 4.4: Conditions d'entrées du brûleur.

Température (les mêmes pour chaque entrée)	303 K (86 °F)
Pression (les mêmes pour chaque entrée)	101.325 kPa (14.696 psi)
Débit massique des lances de gaz	0.498 kg/s (1.098 lb/s)
Vitesse des lances de gaz	200 m/s (656.17 pi/s)
Débit massique des injecteurs centraux de gaz	0.026 kg/s (0.057 lb/s)
Vitesse des injecteurs centraux de gaz	5 m/s (16.4 pi/s)
Débit massique d'air axial	7.378 kg/s (16.266 lb/s)
Vitesse d'air axial	40 m/s (131.23 pi/s)
Débit massique à la virole	2.538 kg/s (5.595 lb/s)
Vitesse à la virole	27.024 m/s (88.661 pi/s)
Débit massique total	10.44 kg/s (23.02 lb/s)

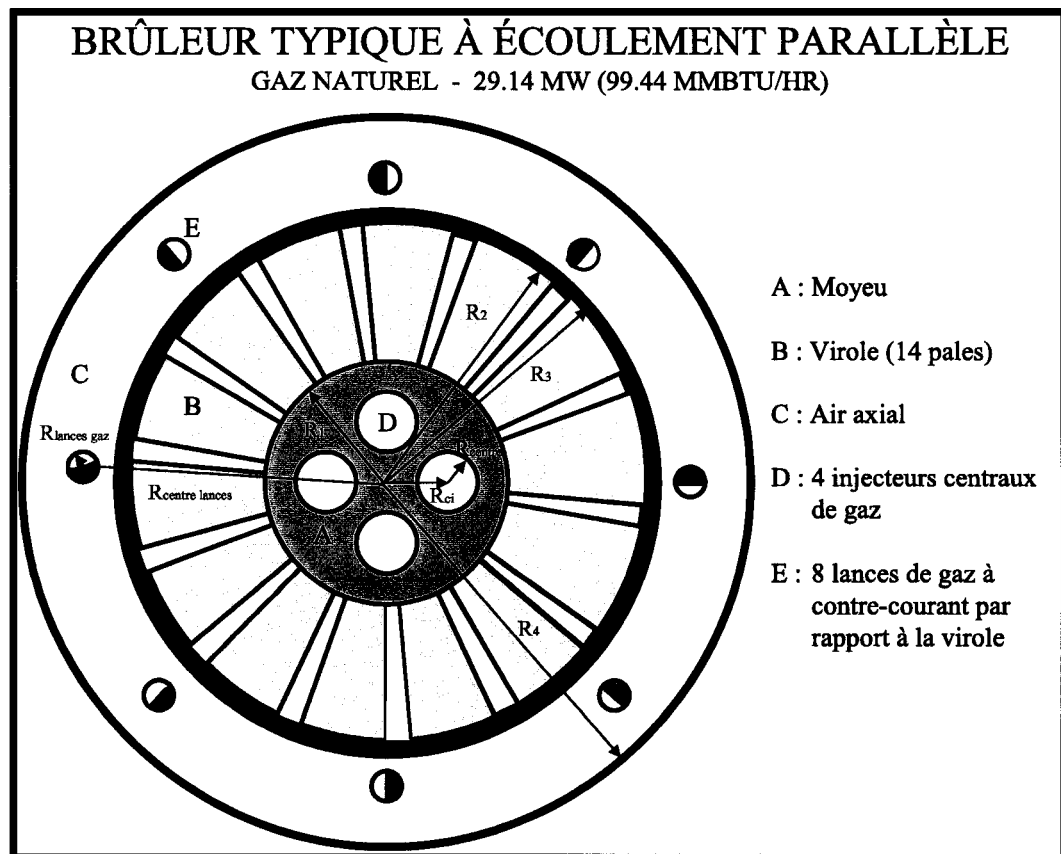


Figure 4.5: Géométrie du brûleur (la géométrie n'est pas à l'échelle).

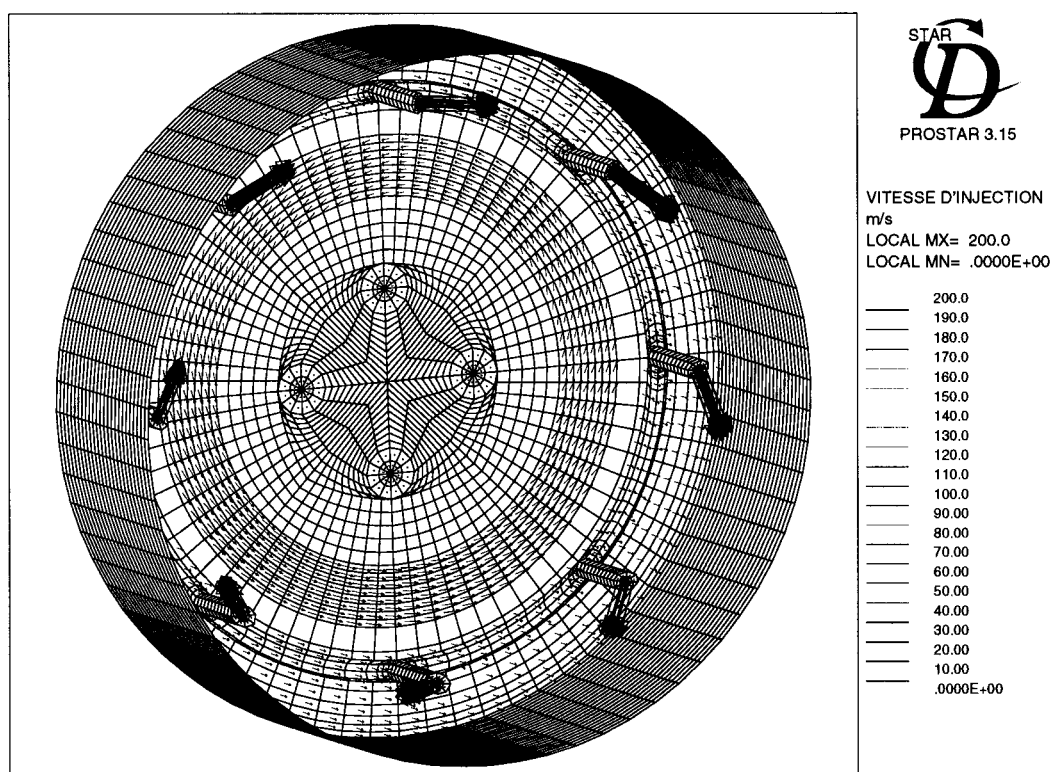


Figure 4.6: Vue en 3-D du brûleur.

Les figures 4.7 et 4.8 montrent les maillages de la chaudière et du brûleur. Le maillage total de la chaudière contient 1.3 millions d'éléments dont 60,000 pour le brûleur et 900,000 pour les deux banques de tubes. Étant donné la grande densité du maillage dans les banques de tubes, une vue agrandie du maillage d'une section de la banque de tubes est montrée à la figure 4.9 afin de donner au lecteur une meilleure perspective.

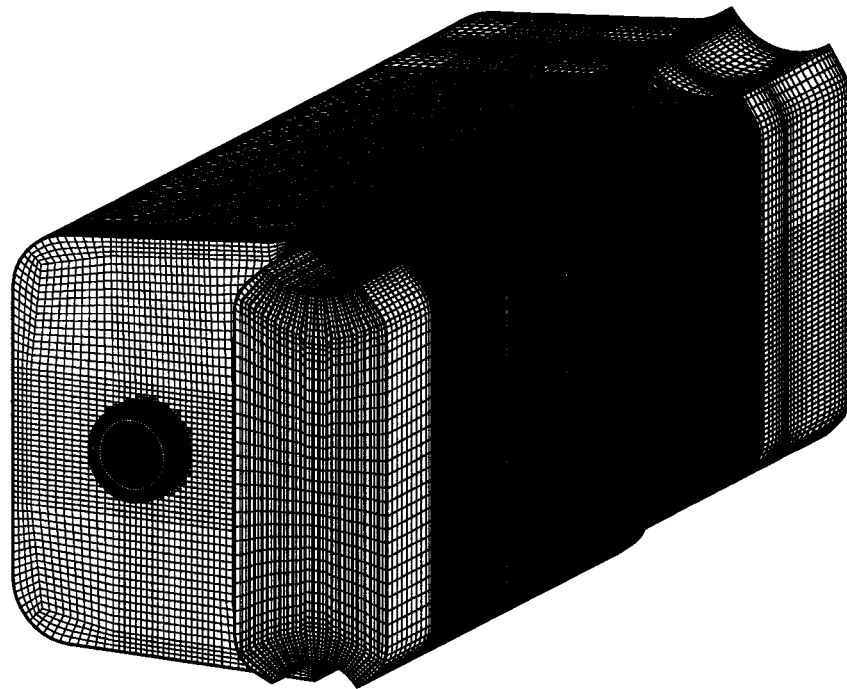


Figure 4.7: Maillage de la chaudière.

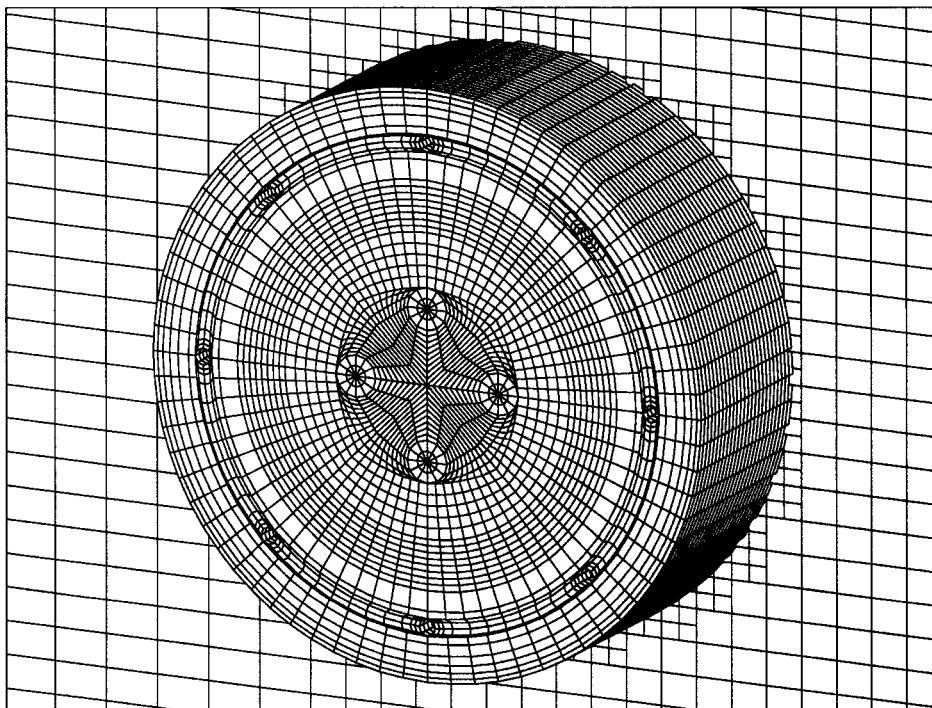


Figure 4.8: Maillage du brûleur.

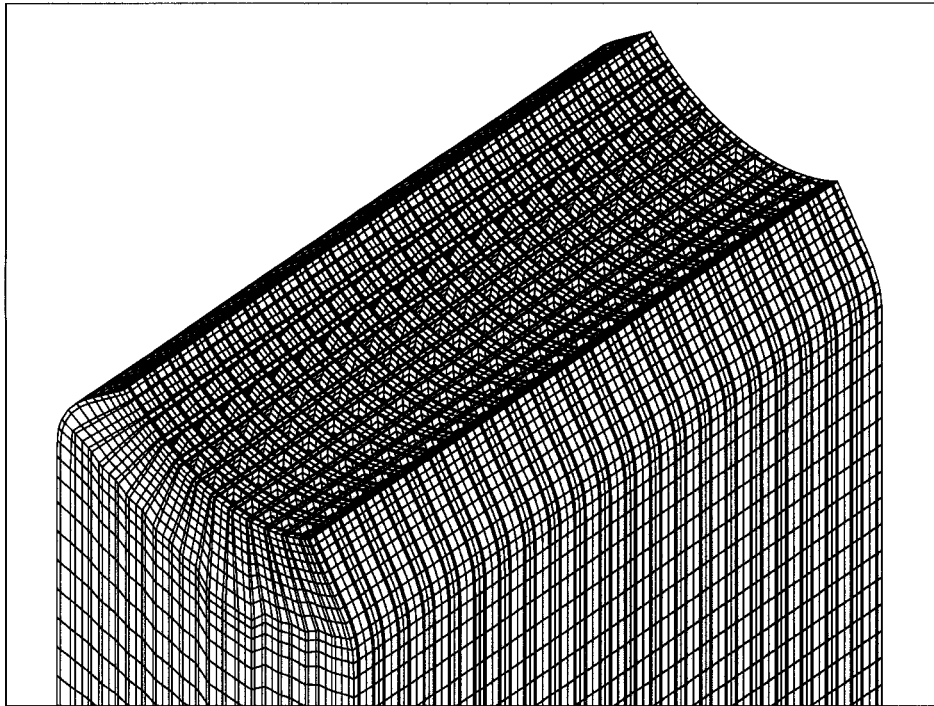


Figure 4.9: Maillage d'une section d'une banque de tubes.

4.1.1 Résultats côté feu

Dans cette section, on présente les résultats des simulations de la chaudière. On présente des coupes de distribution de la température, de pression, du champ de vitesse et du contour lumineux de la flamme. Les résultats sont comparés aux valeurs fournies par le manufacturier et les résultats des simulations antérieures sans discrétisation des tubes et sans couplage avec BOILER-II.

Les figures 4.10 et 4.11 montrent des coupes du champ de vitesse coloré selon la température passant par le centre du brûleur dans les plans vertical et horizontal de la chaudière pour le cas avec tubes carrés. On remarque à la figure 4.10, qu'il y a deux grandes recirculations près du plafond et du plancher du foyer transportant des produits de combustion chauds à la racine de la flamme permettant de maintenir la combustion. À la figure 4.11, on voit seulement de petites recirculations au bout du foyer là où les produits de combustion tournent dans la banque de tubes. Cette différence du champ de vitesse d'un plan à l'autre est causée par la non-symétrie de l'enceinte de la chaudière.

La figure 4.12 montre le contour lumineux de la flamme représentant la partie de la flamme émettant de la lumière visible à l'oeil nu. On remarque que la longueur de la flamme est environ des 2/3 de la chaudière, une valeur typique de ce genre de configuration. Cette flamme est bien confinée au centre du foyer comme le montre la figure 4.13. On remarque que la flamme présente des asymétries causées par l'écoulement non-symétrique dans l'enceinte. On peut voir les vecteurs vitesse représentant le profil de l'écoulement qui cause la non-symétrie de la flamme à la figure 4.14. Les vecteurs colorés en rouge représentent l'enveloppe de la flamme lumineuse, qui est étirée vers le coin droit et vers le plancher par des courants de recirculation secondaires. La luminosité d'une flamme est surtout causée par les particules de carbone non-brûlées chauffées jusqu'à l'incandescence. Notons que,

les flammes au gaz naturel émettent très peu dans le spectre visible (les flammes sont de couleur bleu pâle) quand la combustion s'effectue en excès d'air, ce qui est pratiquement toujours le cas pour des installations industrielles de ce type. Cependant, l'absence de contour visible n'implique pas l'absence de flamme. En effet, les hautes températures de flamme sont atteintes près de la stoechiométrie du mélange, c'est ainsi qu'il est utile d'examiner les profils de température pour s'assurer qu'il n'y a pas de points chauds sur les parois du foyer. Les contours de température de la figure 4.15 montrent que la flamme est bien centrée et ne touche à aucune paroi dans le foyer.

Les figures 4.16 et 4.17 montrent des coupes de température passant par le centre du brûleur dans le plan horizontal de la chaudière pour les cas avec et sans tubes respectivement. À première vue, les distributions de température dans les deux cas sont semblables, mais on peut remarquer que pour la simulation couplée, la température est plus basse près du mur droit en forme de D, compte tenu des températures de paroi variables du foyer. En effet, auparavant on imposait une température moyenne constante (température de saturation de l'eau à la pression d'opération de la chaudière et un ΔT à cause de l'échauffement de la paroi du tube et du coefficient de transfert de chaleur interne) sur toutes les parois tubées du foyer. Dans ce cas-ci, la température de la paroi externe est calculée par le code BOILER-II donnant une température de la paroi plus basse à cet endroit.

Les figures 4.18 et 4.19 montrent une coupe de la distribution de la température à la sortie de la banque de tubes pour les deux cas. On remarque une distribution de la température plus uniforme dans le cas sans tubes, ce qui est tout à fait normal puisqu'il n'y a pas l'interférence des tubes.

Les figures 4.20 et 4.21 montrent une coupe de la pression à travers la banque de tubes pour les cas avec tubes et sans tubes. On remarque une perte de charge

plus élevée pour le cas avec tubes carrés que celui sans tubes dont le milieu est considéré comme pseudo-poreux. Ce qui est tout à fait normal puisque dans le cas avec les tubes carrés, on a des obstacles réels. Tandis que dans l'autre cas, on a des obstacles virtuels. Les figures 4.22 et 4.23 montrent le champ de vitesse autour de quelques tubes carrés et de quelques tubes ronds respectivement. Le champ de vitesse est différent en comparant les deux figures. En effet, on peut voir de petites recirculations entre les tubes ronds dans le sens longitudinal de la banque de tubes (direction z). On remarque également de très petites recirculations pour la cas avec les tubes carrés. Cette configuration de tubes permet moins au fluide de passer entre les tubes dans la direction longitudinale que celle avec des tubes ronds. Le fluide entre les tubes carrés dans cette direction a plus de temps d'échanger de la chaleur, lorsque l'énergie des gaz chauds est totalement absorbée par le mélange diphasique dans les tubes, l'écoulement est refroidi et le flux de chaleur en est diminué (figure 4.27). La figure 4.24 montre la température entre les tubes des banques des tubes carrés. Une amélioration serait possible en utilisant des tubes réels, mais effectuer la simulation avec des tubes ronds s'avère impossible à réaliser présentement à cause des ressources informatiques disponibles aujourd'hui et surtout dans un délai raisonnable du point vue de l'industrie.

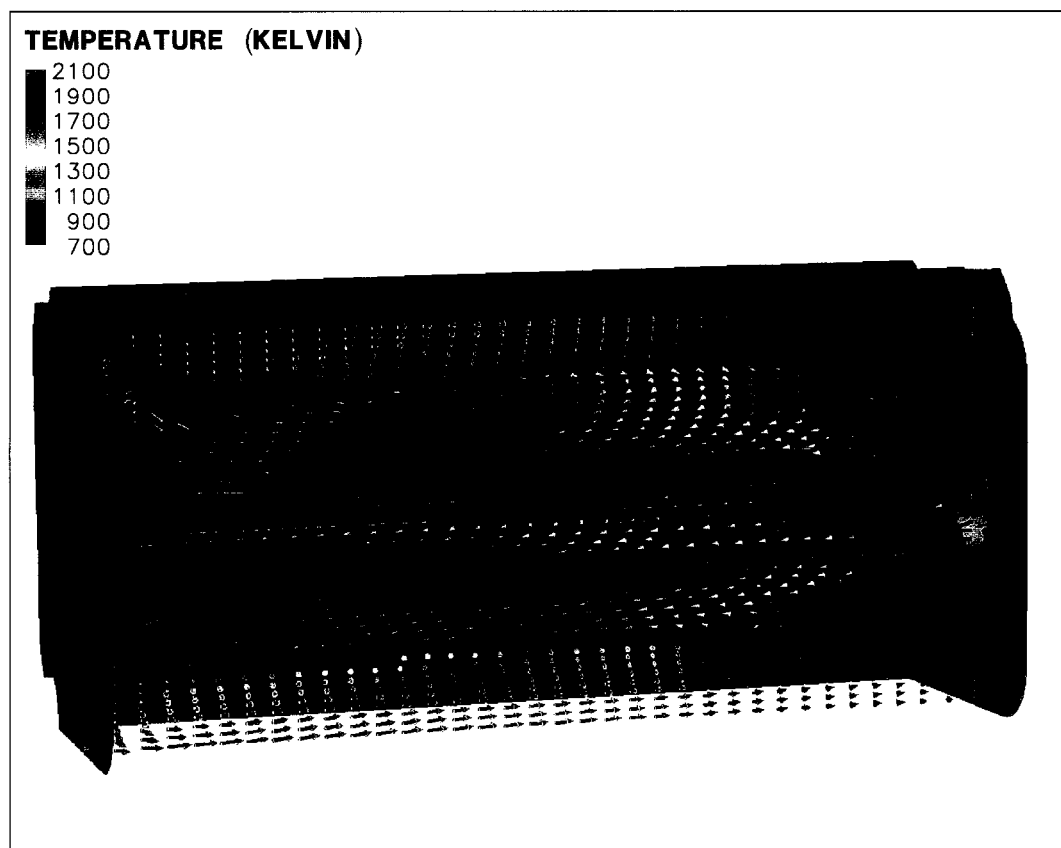


Figure 4.10: Coupe du champ de vitesse passant par le centre du brûleur dans le plan vertical - avec tubes carrés.

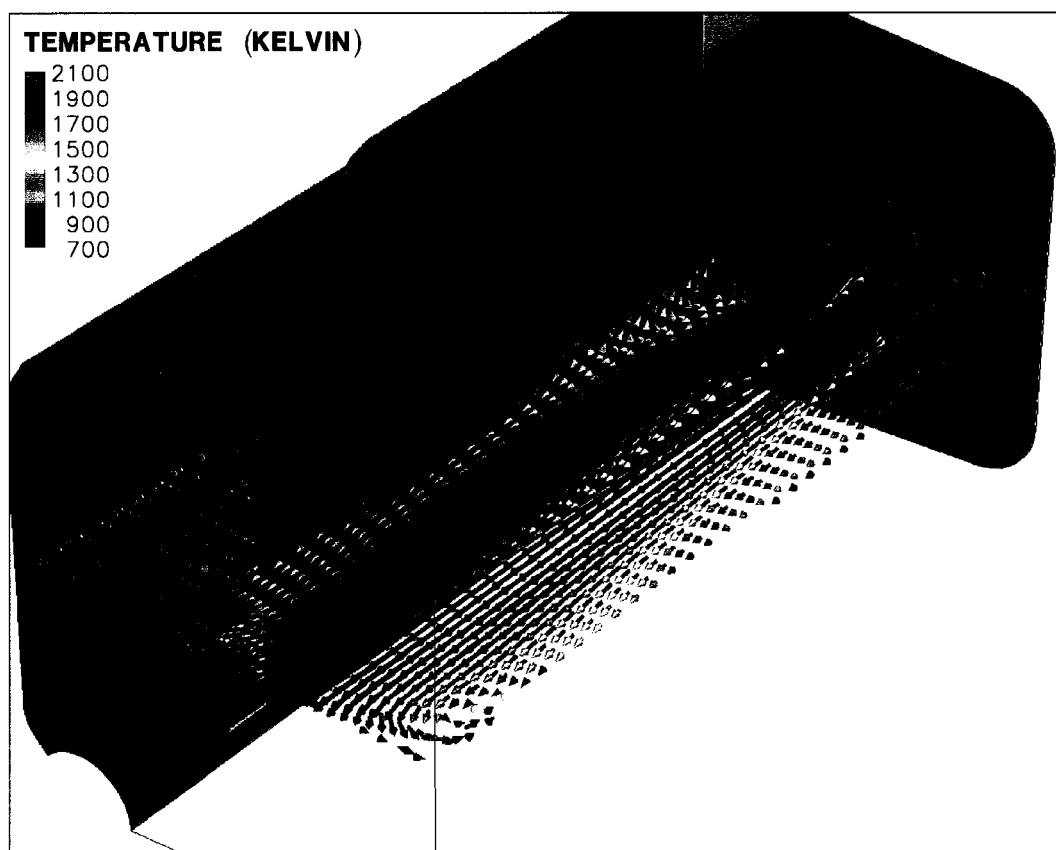


Figure 4.11: Coupe du champ de vitesse passant par le centre du brûleur dans le plan horizontal - avec tubes carrés.

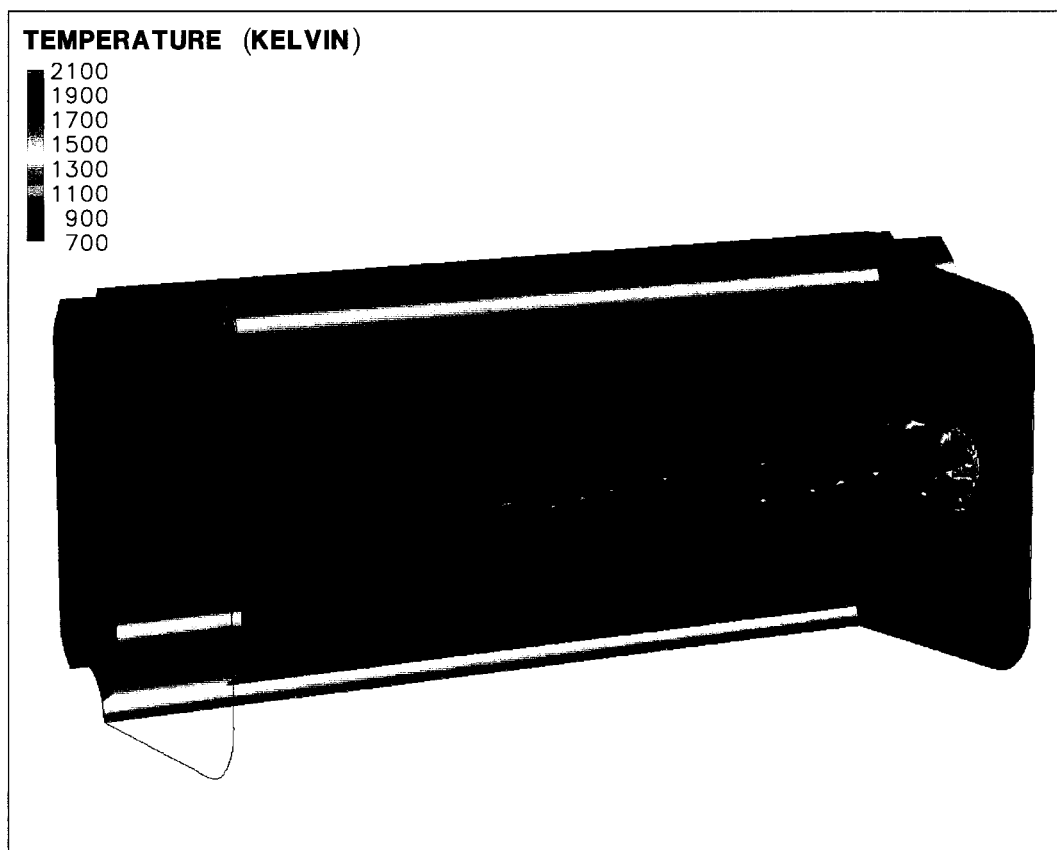


Figure 4.12: Contour lumineux de la flamme.

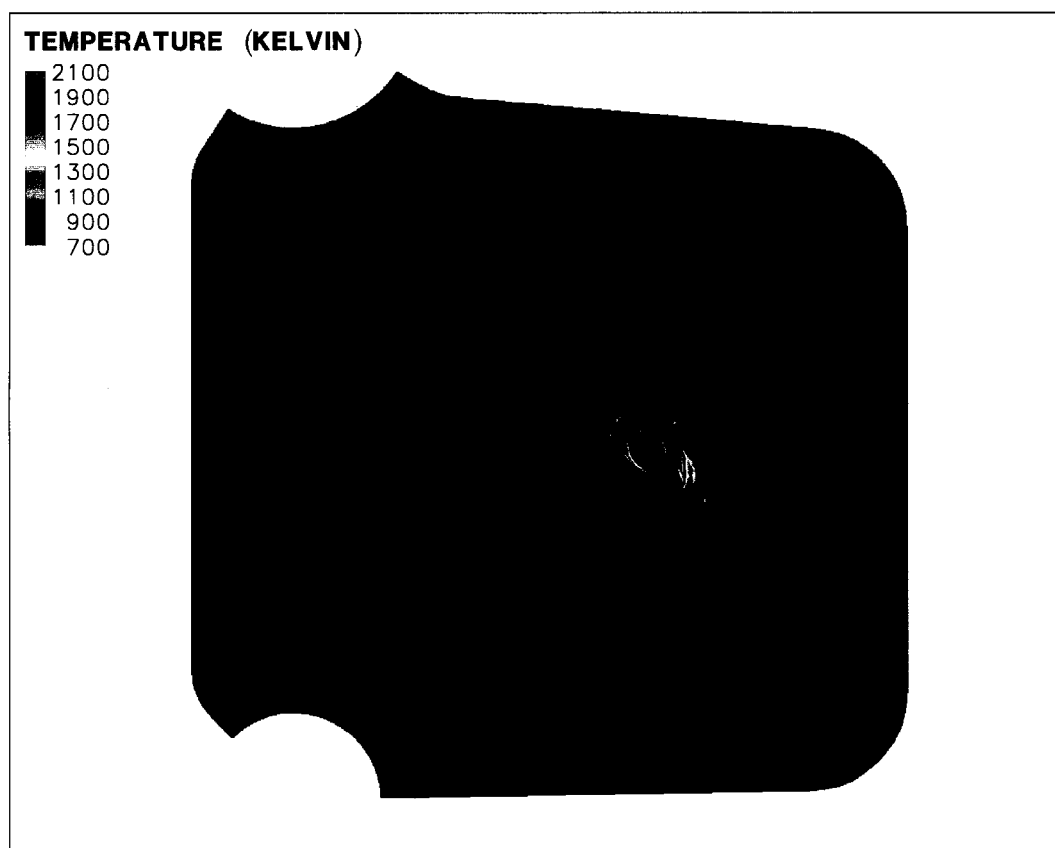


Figure 4.13: Contour lumineux de la flamme - vue de face.

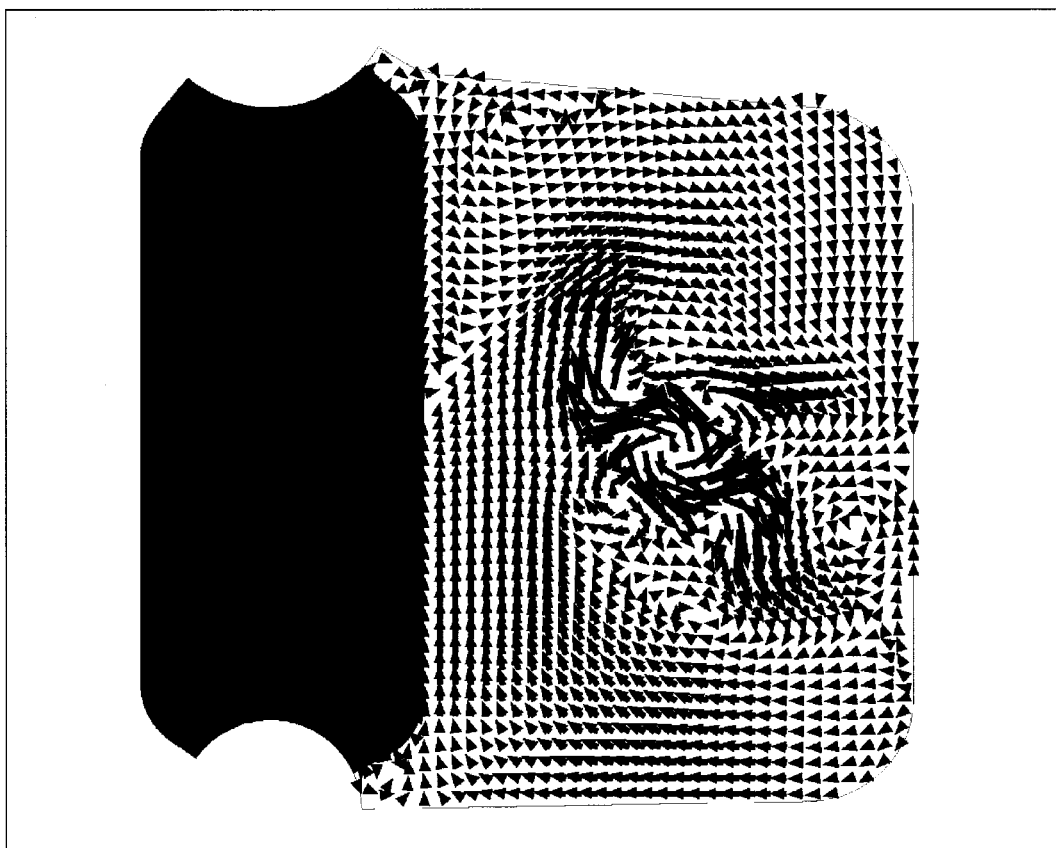


Figure 4.14: Vecteurs vitesse de la flamme.

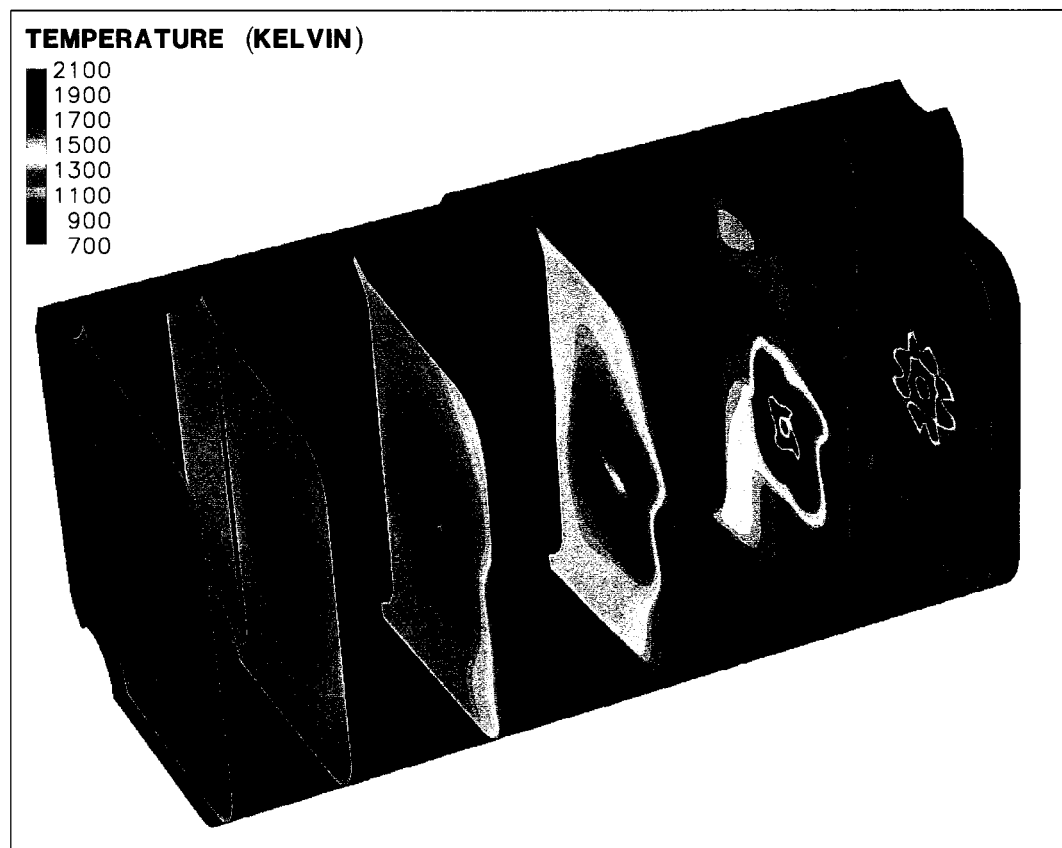


Figure 4.15: Coupes du contour de la température.

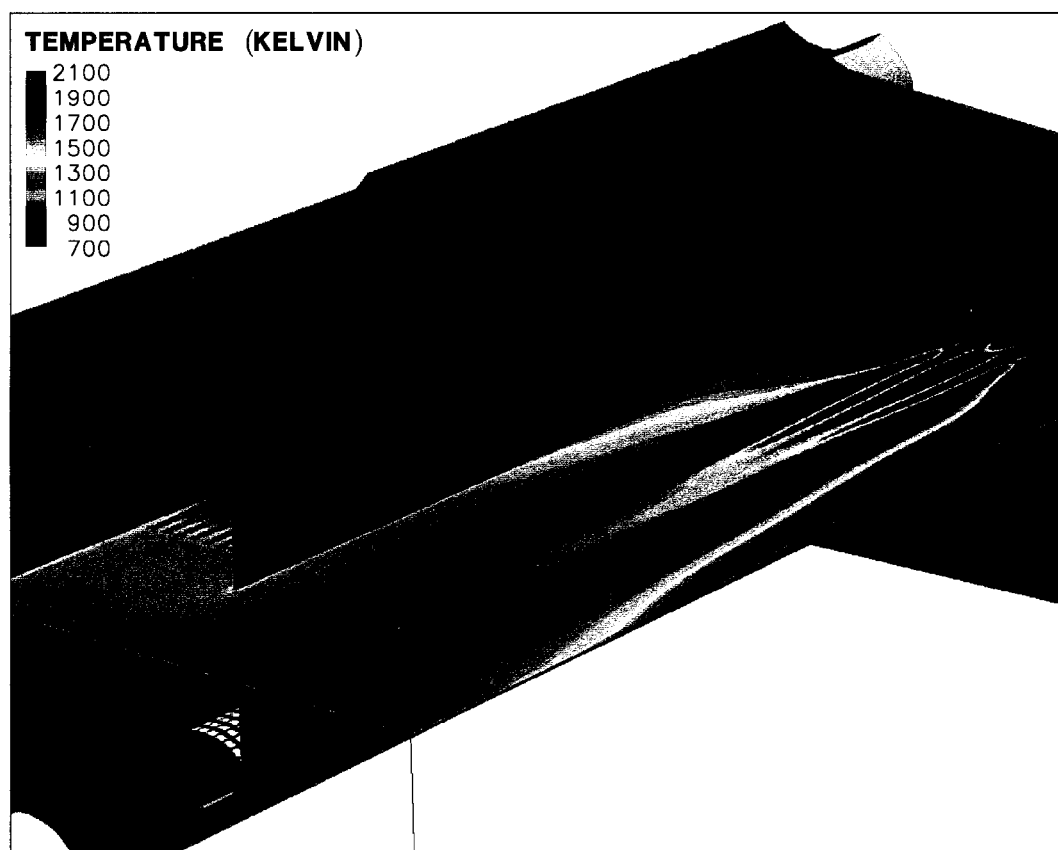


Figure 4.16: Coupe de la température passant par le centre du brûleur dans le plan horizontal - avec tubes carrés.

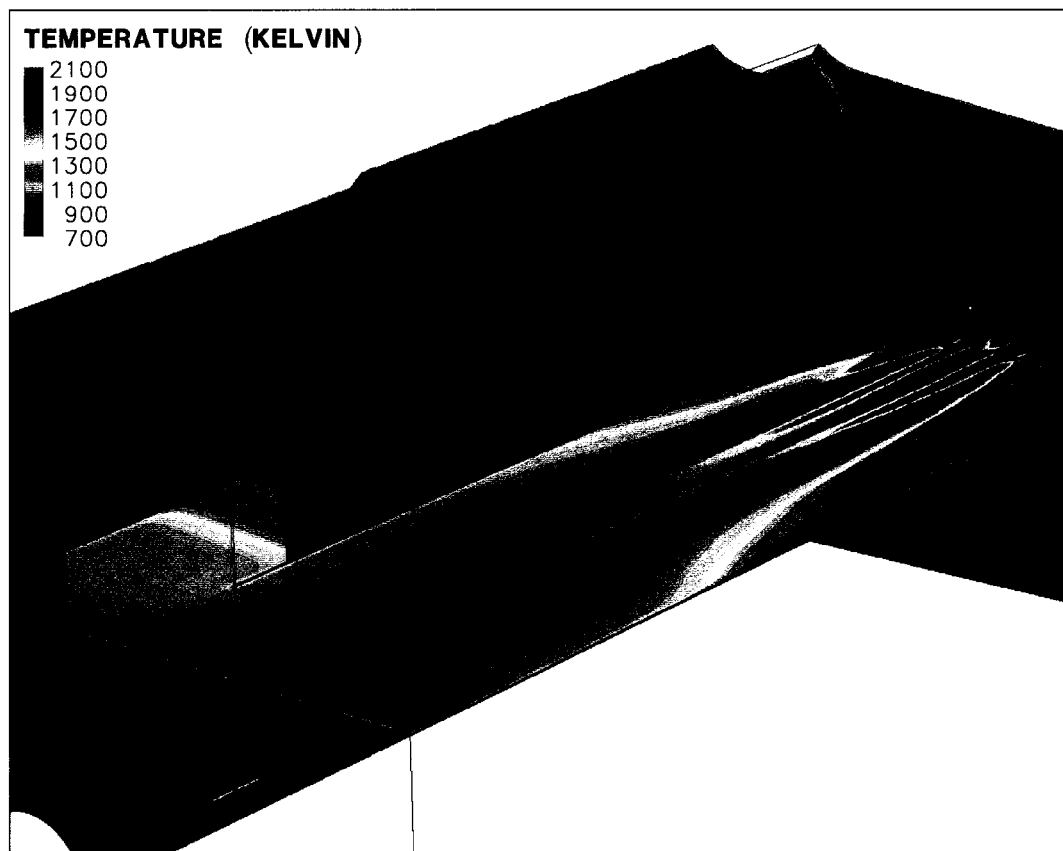


Figure 4.17: Coupe de la température passant par le centre du brûleur dans le plan horizontal - sans tubes.

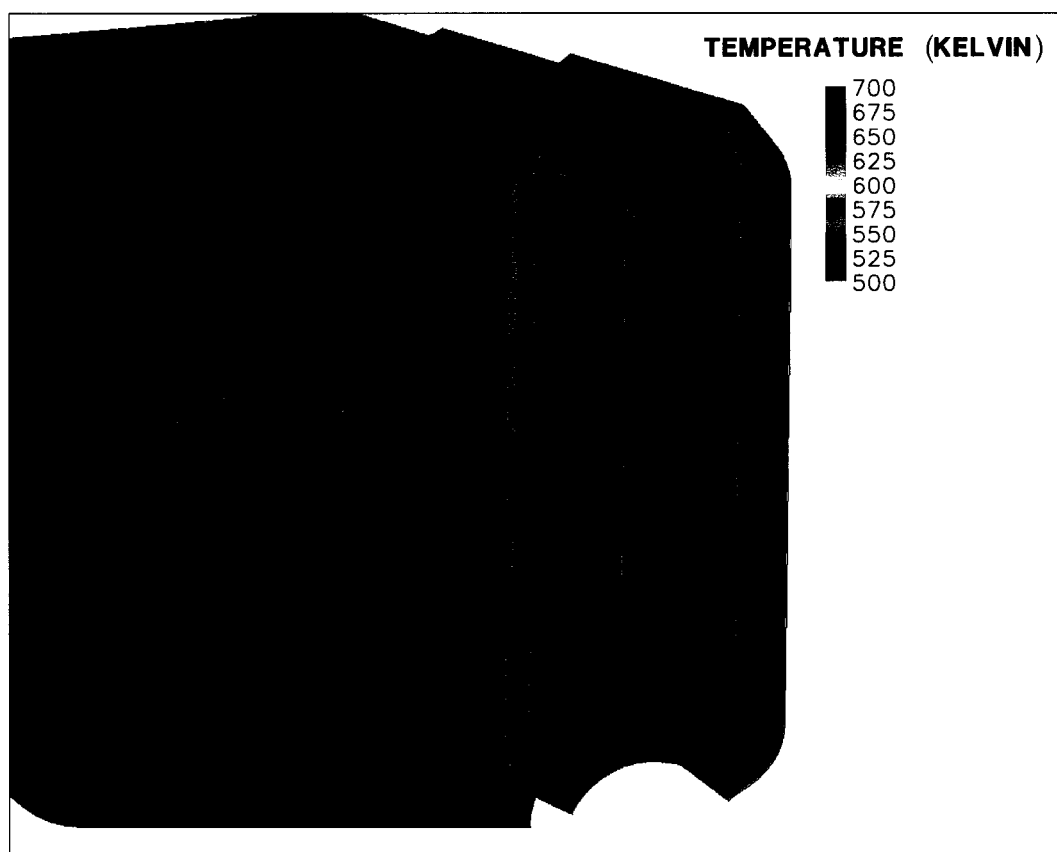


Figure 4.18: Coupe de la température à la sortie de la banque de tubes - avec tubes carrés.

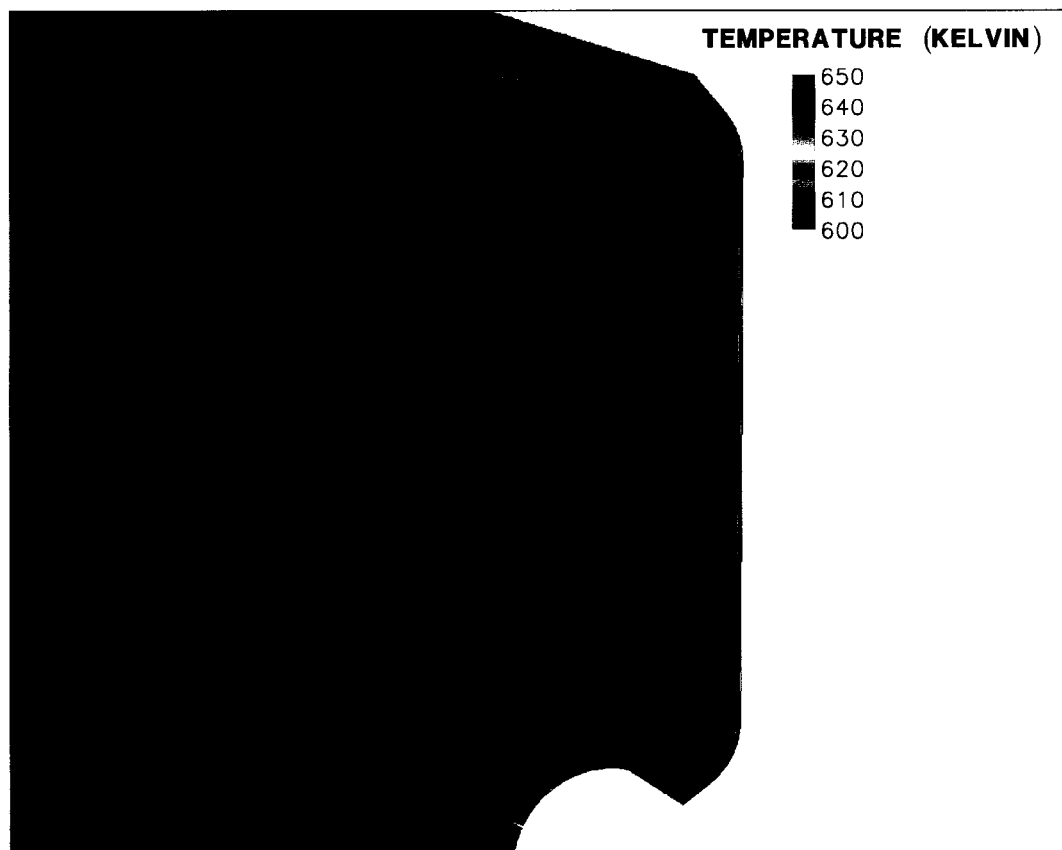


Figure 4.19: Coupe de la température à la sortie de la banque de tubes - sans tubes.

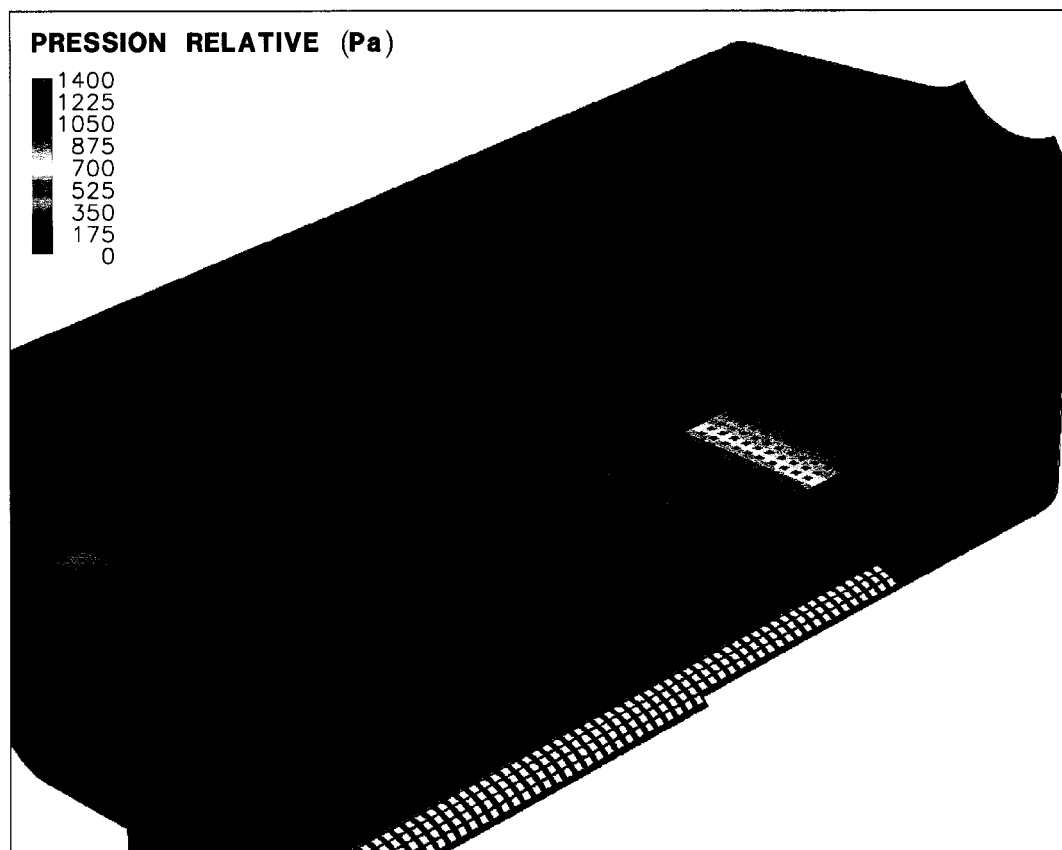


Figure 4.20: Coupe de la pression à travers les banques de tubes - avec tubes carrés.

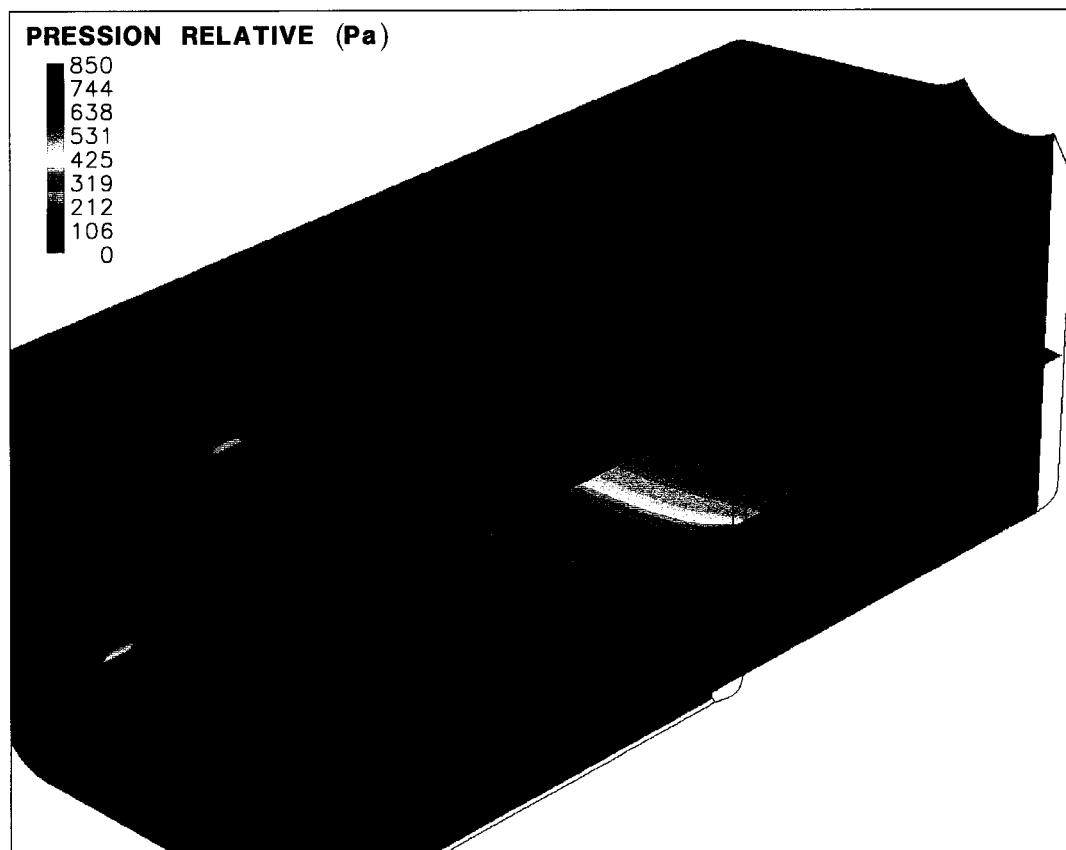


Figure 4.21: Coupe de la pression à travers les banques de tubes - sans tubes.

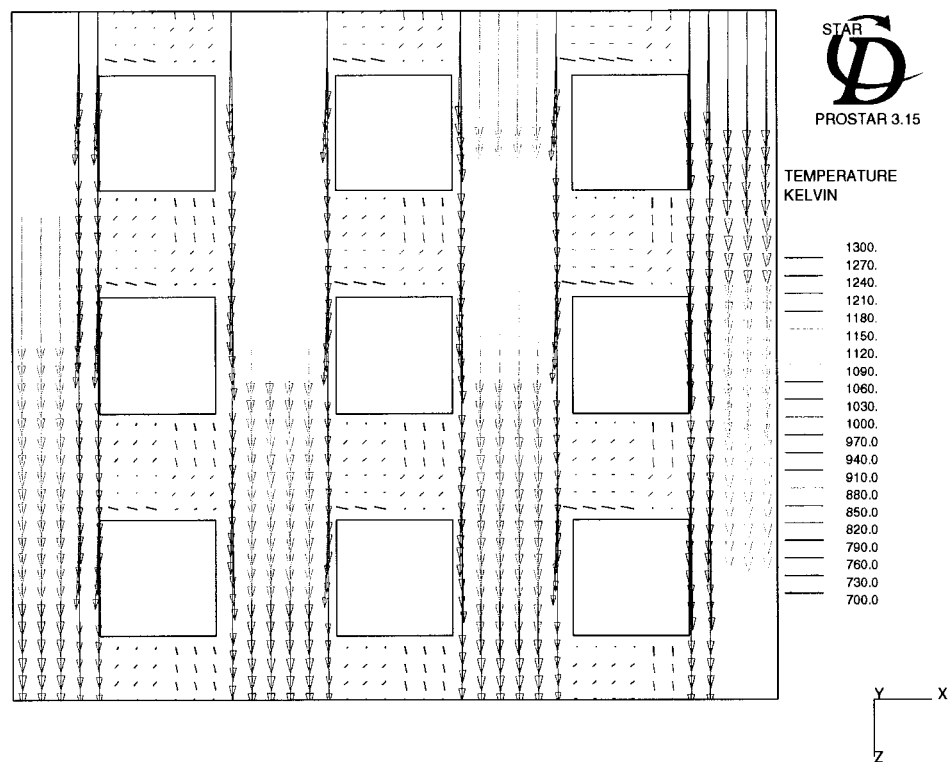


Figure 4.22: Champ de vitesse autour de quelques tubes carrés.

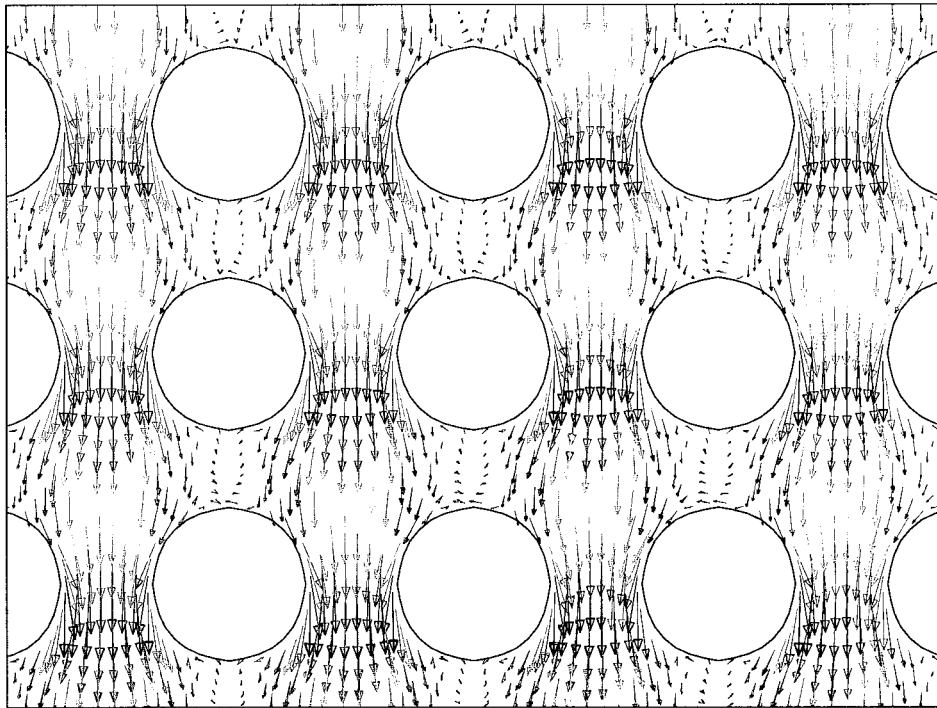


Figure 4.23: Champ de vitesse autour de quelques tubes ronds.

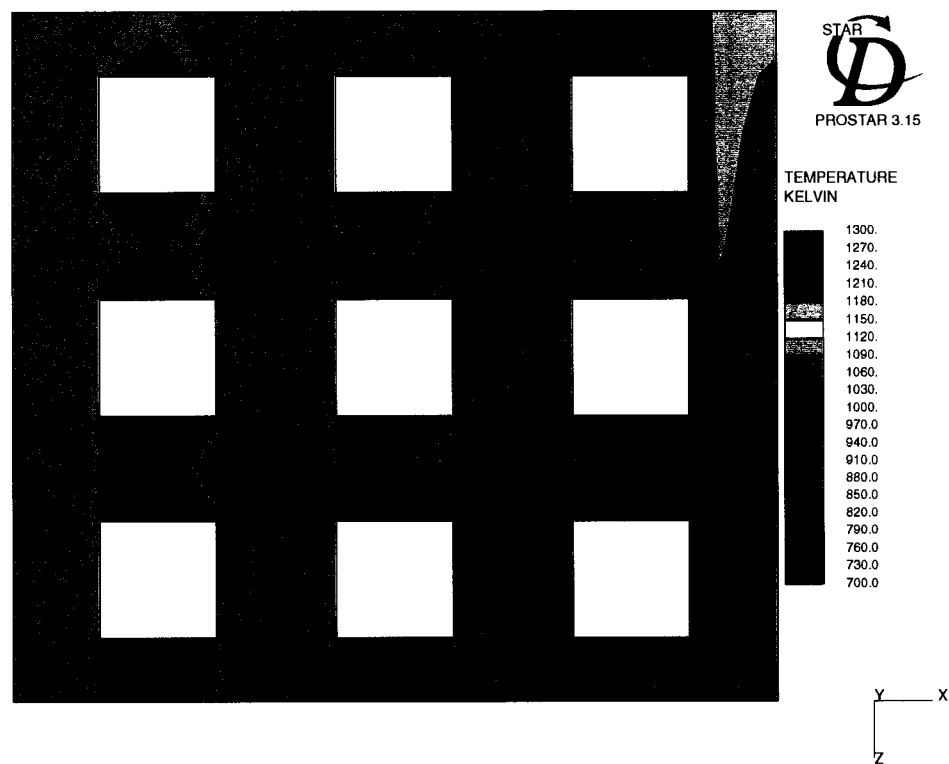


Figure 4.24: Température autour de quelques tubes carrés.

À partir de ces résultats, on a déterminé des valeurs moyennes de la température et de la pression à des endroits précis dans la chaudière. Le tableau 4.5 donne les comparaisons entre les valeurs du manufacturier et les résultats des simulations avec et sans discrétisation des tubes. On remarque une légère augmentation de la température à la sortie du foyer et à l'entrée de la première banque de tubes pour la simulation avec les tubes par rapport à celle sans tubes. On remarque également que les résultats des deux simulations sont un peu plus élevés que ceux du manufacturier. Malgré des températures plus élevées à l'entrée de la banque de tubes, on obtient de bonnes prédictions de la température de sortie de la première banque de tubes. Dans les deux cas, on a une différence de l'ordre de 6% par rapport aux valeurs du manufacturier. Pour ce qui est de la prédiction de la température moyenne à la sortie de la deuxième banque de tubes, on obtient une différence de seulement 2.45% par rapport au manufacturier comparativement à 7.71% pour le cas sans tubes. Cette différence de 2.45% est inférieure à la précision des appareils de mesures.

La prédiction de la perte de charge totale à travers les banques de tubes donne de meilleurs résultats pour le cas avec tubes soit une différence d'environ 6% par rapport aux valeurs du manufacturier. Ce qui est très bon même si les tubes sont discrétisés de manière carrée. On remarque quand même une plus grande perte de charge pour la première banque de tubes et une plus faible pour la deuxième banque. Ceci étant causé par la vitesse locale dans les banques de tubes. En effet, au fur et à mesure que l'écoulement traverse les banques de tubes, la vitesse diminue. L'effet de cette diminution de vitesse se fait ressentir sur les corrélations utilisées pour les pertes de charge dans les banques de tubes puisqu'elles sont fonction des vitesses locales de l'écoulement.

L'analyse de ces résultats permet de dire que la simulation obtenue avec le couplage du côté feu et du côté eau donne de meilleurs résultats tant pour la température

des gaz que pour la perte de charge dans les banques de tubes.

Tableau 4.5: Comparaisons des résultats entre le manufacturier et les simulations avec et sans discrétisation des tubes.

	MANUFACTURIER	AVEC TUBES	SANS TUBES	Δ_{AT} (%)	Δ_{ST} (%)
T_{sf}	1529 K	1583 K	1576 K	3.53	3.07
T_{e1bt}	1445 K	1485 K	1479 K	2.69	2.35
T_{s1bt}	814 K	866 K	862 K	6.39	5.90
T_{s2bt}	571 K	585 K	615 K	2.45	7.71
ΔP_{s1bt}	626.8 Pa	786.2 Pa	384.8 Pa	25.43	-38.61
ΔP_{s2bt}	521.6 Pa	435.1 Pa	389.5 Pa	-16.58	-25.33
ΔP_{total}	1148.4 Pa	1221.3 Pa	774.3 Pa	6.35	-32.58

où T_{sf} : Température à la sortie du foyer
 T_{e1bt} : Température à l'entrée de la première banque de tubes
 T_{s1bt} : Température à la sortie de la première banque de tubes
 T_{s2bt} : Température à la sortie de la deuxième banque de tubes
 ΔP_{s1bt} : Perte de charge à travers la première banque de tubes
 ΔP_{s2bt} : Perte de charge à travers la deuxième banque de tubes
 ΔP_{total} : Perte de charge totale à travers les banques de tubes
 Δ_{AT} : Différence entre les valeurs du manufacturier et le cas avec tubes
 Δ_{ST} : Différence entre les valeurs du manufacturier et le cas sans tubes

4.1.2 Résultats côté eau

Avant de montrer les résultats, il s'avère intéressant de regarder le maillage typique d'un tube dans BOILER-II. La figure 4.25 montre le maillage d'un tube dans STAR-CD, les points rouges correspondent au maillage 1-D de BOILER-II. On remarque que les maillages sont très différents d'un code à l'autre et que le couplage entre eux est arbitraire.

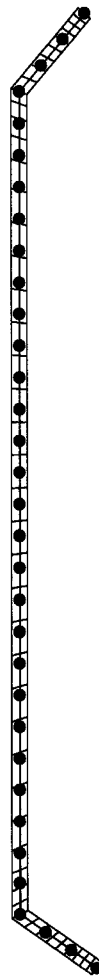


Figure 4.25: Maillage d'un tube dans STAR-CD et maillage 1-D de BOILER-II.

Les figures 4.26 et 4.27 montrent respectivement les flux de chaleur totaux (convectif et radiatif) pour le mur gauche du foyer et pour une série de tubes de la banque de tubes. Ce sont ces flux de chaleur de la simulation numérique du côté feu qui sont transférés au maillage 1-D de BOILER-II. Les températures aux parois correspondantes provenant du code BOILER-II sont montrées aux figures 4.28 et 4.29. On remarque bien la variation de la température le long de la paroi des tubes.

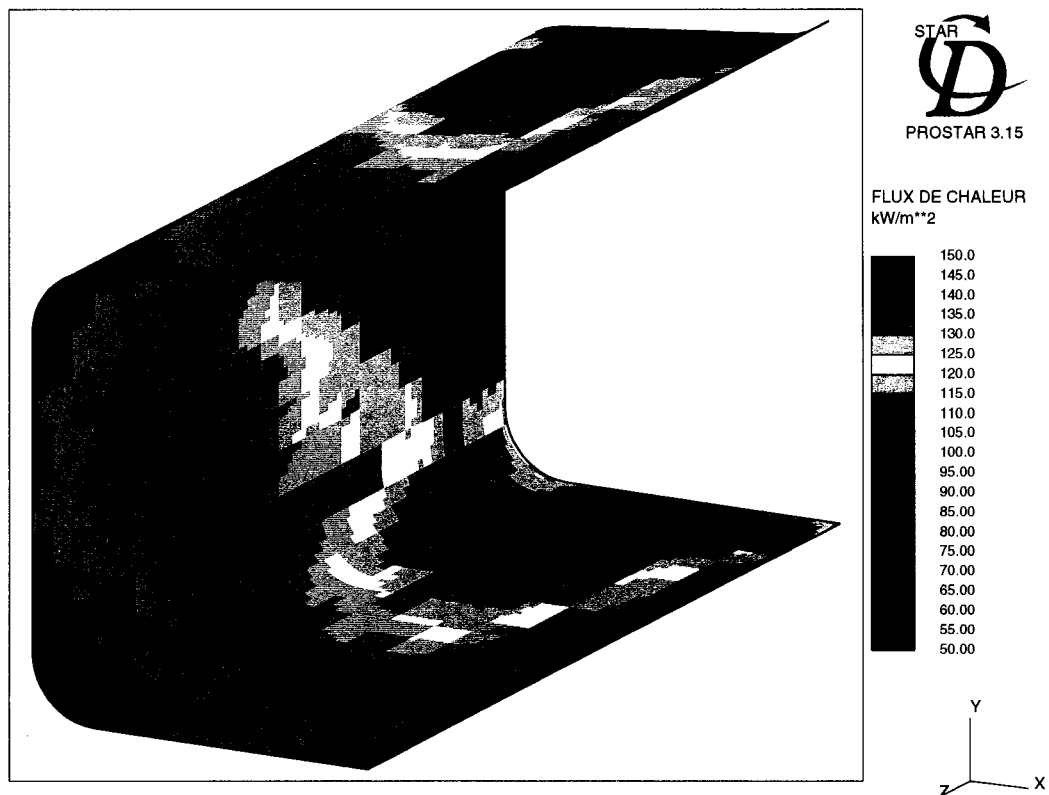


Figure 4.26: Flux de chaleur total du mur gauche du foyer.

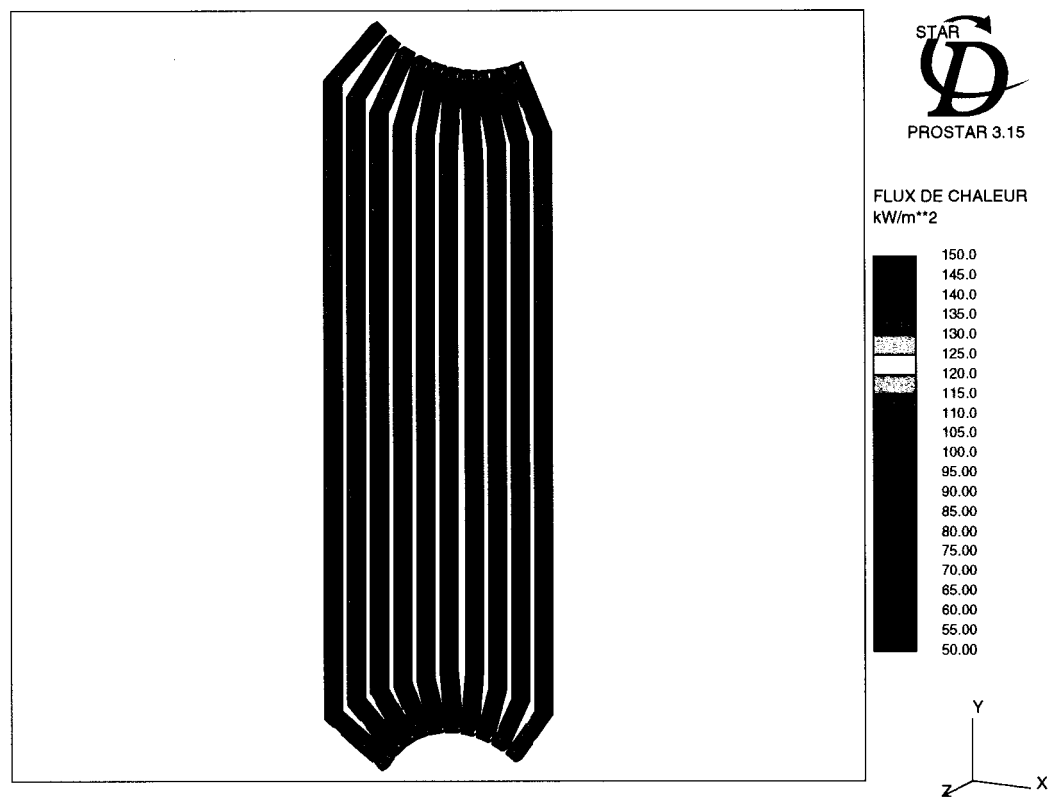


Figure 4.27: Flux de chaleur total d'une série de tubes de la banque de tubes.

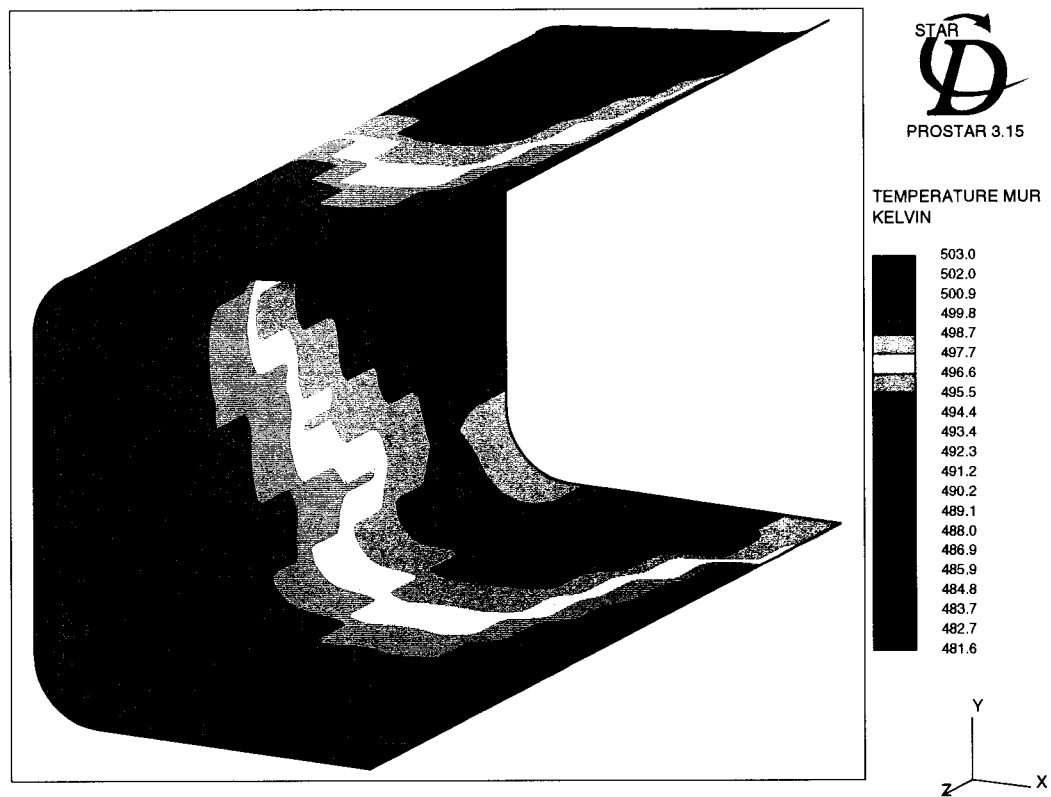


Figure 4.28: Température du mur gauche du foyer.

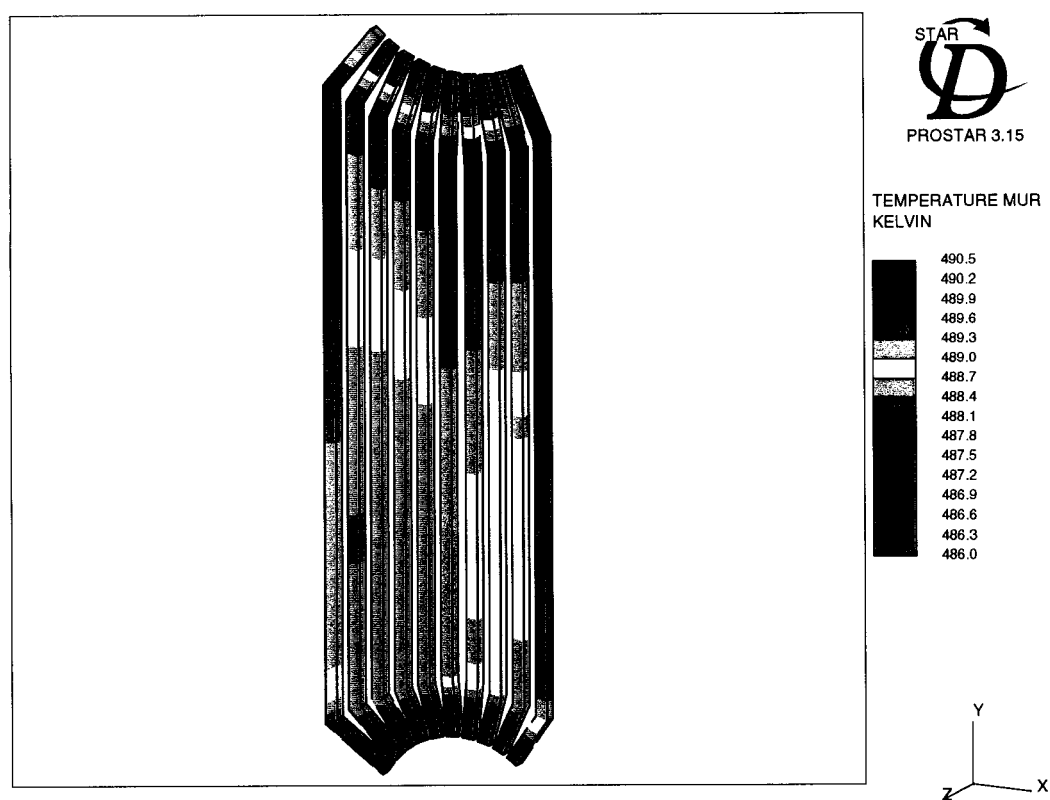


Figure 4.29: Température de la paroi des tubes de la banque de tubes.

On présente maintenant quelques résultats du côté eau par BOILER-II. On s'attarde en particulier au titre thermodynamique puisqu'il s'agit d'un paramètre des plus importants pour un ingénieur concepteur de chaudières. La figure 4.31 montre le titre thermodynamique dans les tubes du mur gauche du foyer. On compare les résultats des deux simulations : des flux de chaleur variables provenant du couplage entre STAR-CD/CMBLIB et BOILER-II et des flux de chaleur constants fournis par le manufacturier. La figure 4.32 montre le long d'un tube que le titre thermodynamique de l'écoulement diphasique est très important, car il permet de déterminer, par l'entremise de corrélations de flux de chaleur critique (FCC) si l'assèchement peut être atteint dans le tube. Deux autres paramètres sont également nécessaires pour la détermination du FCC : la pression et le flux de masse qui sont constants dans le tube. On considère la pression constante, car la différence de pression dans un tube est très petite par rapport à la pression d'opération de la chaudière. La figure 4.30 montre que le débit massique dans les tubes est plus élevé dans la partie opposée au brûleur dans le foyer, ce qui est tout à fait normal puisque le flux de chaleur est plus intense à cet endroit si on regarde la figure 4.26. L'énergie dégagée par la combustion agit comme une pompe pour la circulation naturelle de l'eau dans les tubes chauffés. Ainsi, plus l'énergie dégagée par la combustion est intense, plus le flux de chaleur aux parois sera intense et plus il y aura de vapeur générée dans le tube. Ceci rend la densité du mélange diphasique plus faible et crée ainsi un débit massique plus élevé.

Les figures 4.33 et 4.34 montrent la fraction de vide sur un tube de la banque de tubes et dans les tubes du foyer. La connaissance de la fraction de vide et l'information sur le régime d'écoulement donne au concepteur de chaudière un aperçu valable de ce qui se passe réellement à l'intérieur de la chaudière. Le tableau 4.6 donne un exemple des résultats fournis par BOILER-II pour le tube montré à la figure 4.34. Les résultats du tableau 4.6 donnent la fraction de vide en fonction de la position le long du tube. Il fournit aussi le régime d'écoulement

pour la partie inférieure (plancher du foyer) jusqu'à la partie verticale du tube. On remarque une stratification de l'écoulement à une certaine position indiquant qu'une petite surface n'est pas mouillée dans la partie supérieure du tube. Cela pourrait endommager le tube, mais ce n'est pas le cas. En effet, la fraction de vide est seulement de 0.5% à 2% à cet endroit, indiquant qu'il s'agit seulement de quelques bulles qui s'écoulent le long de la surface supérieure du tube à cet endroit.

Tableau 4.6: Fraction de vide et régimes d'écoulements pour le tube de la figure 4.34

POSITION (MÈTRES)	ORIENTATION (DEGRÉS)	RÉGIMES D'ÉCOULEMENTS	FRACTION DE VIDE
0.000	1.00	MONOPHASIQUE	0.0000
0.089	1.00	PAR BULLES	0.0029
0.268	1.00	STRATIFIÉ	0.0050
0.446	1.00	STRATIFIÉ	0.0192
0.625	1.00	INTERMITTENT	0.0346
0.804	1.00	INTERMITTENT	0.0533
0.982	1.00	INTERMITTENT	0.0735
1.161	1.00	INTERMITTENT	0.0948
1.340	1.00	INTERMITTENT	0.1156
1.519	1.00	INTERMITTENT	0.1365
1.697	1.00	INTERMITTENT	0.1583
1.876	1.00	INTERMITTENT	0.1781
2.055	1.00	INTERMITTENT	0.1970
2.231	12.12	INTERMITTENT	0.2162
2.407	34.38	PAR BOUCHONS (SLUG)	0.2581
2.584	56.62	PAR BOUCHONS (SLUG)	0.2976
2.760	78.88	PAR BOUCHONS (SLUG)	0.3314
2.936	90.00	PAR BOUCHONS (SLUG)	0.3633

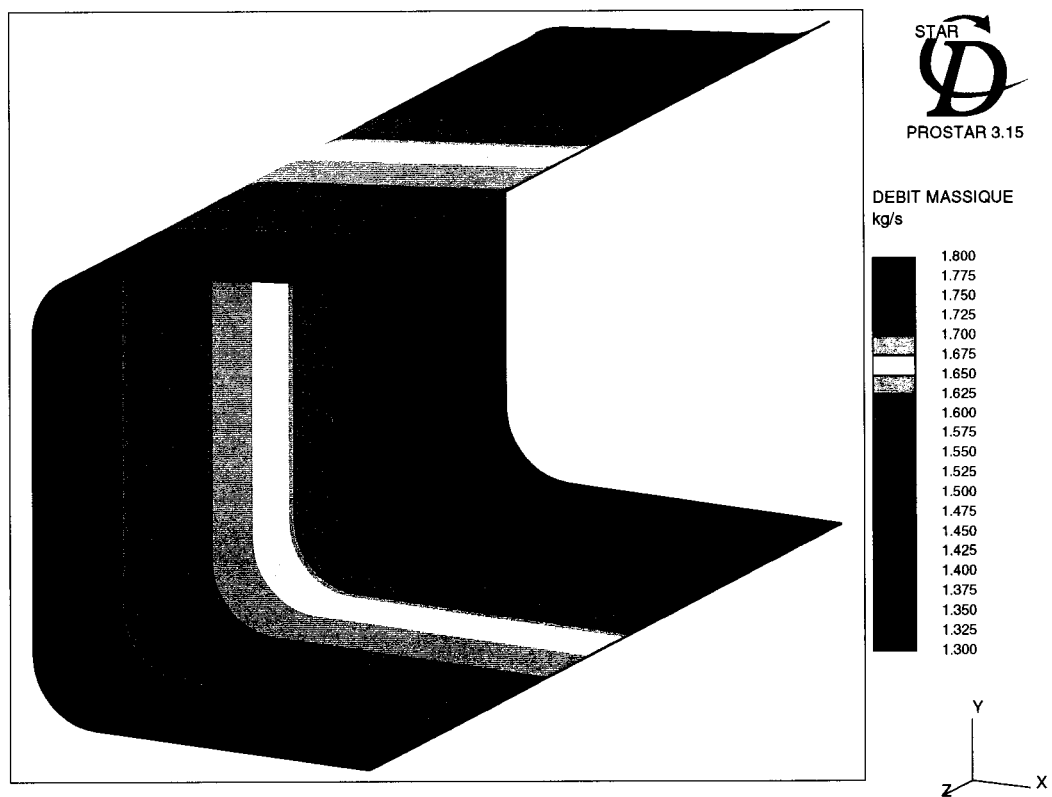


Figure 4.30: Débit massique dans les tubes du foyer.

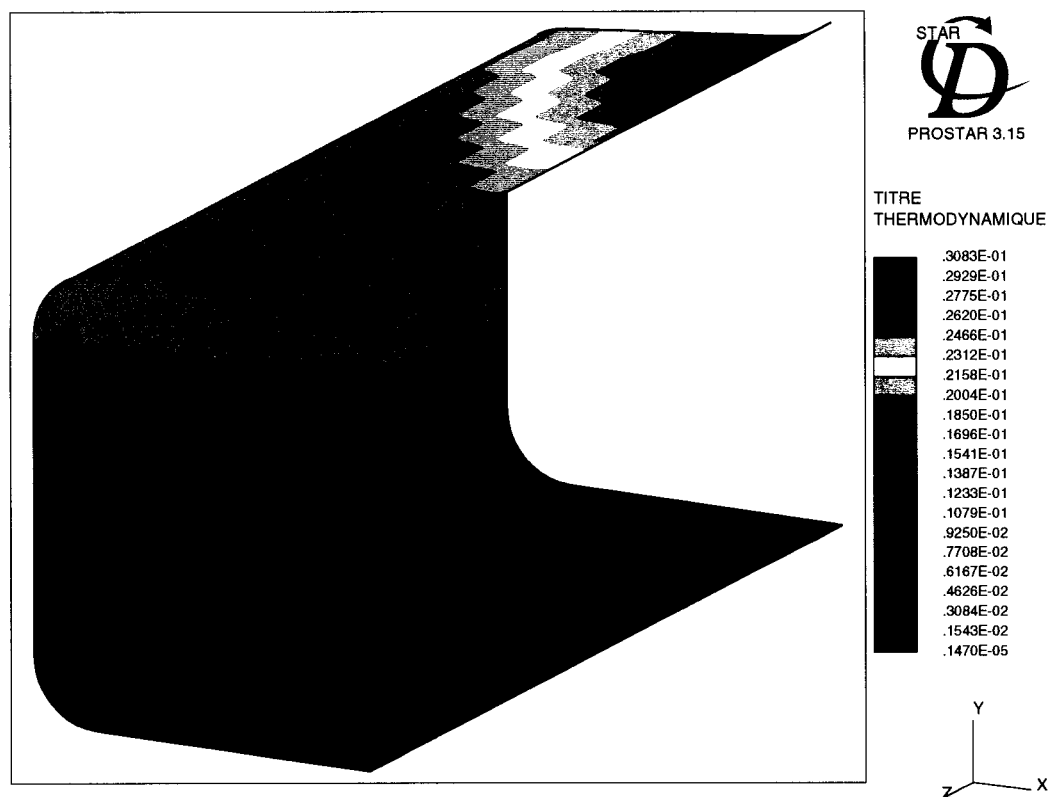


Figure 4.31: Titre thermodynamique dans les tubes du foyer.

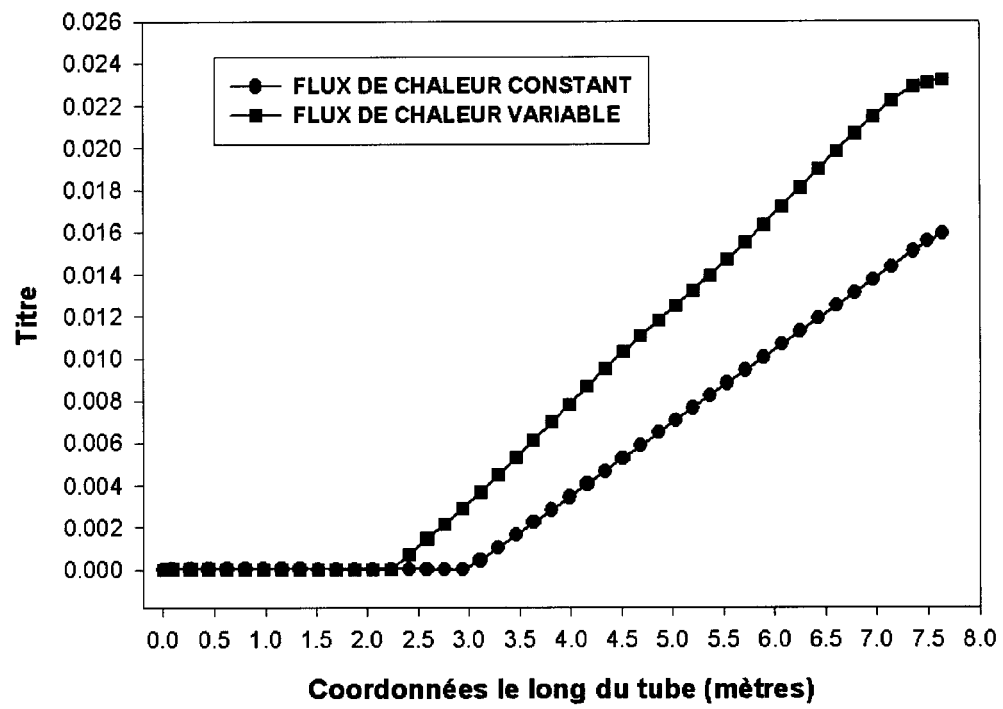


Figure 4.32: Titre le long d'un tube typique du foyer.

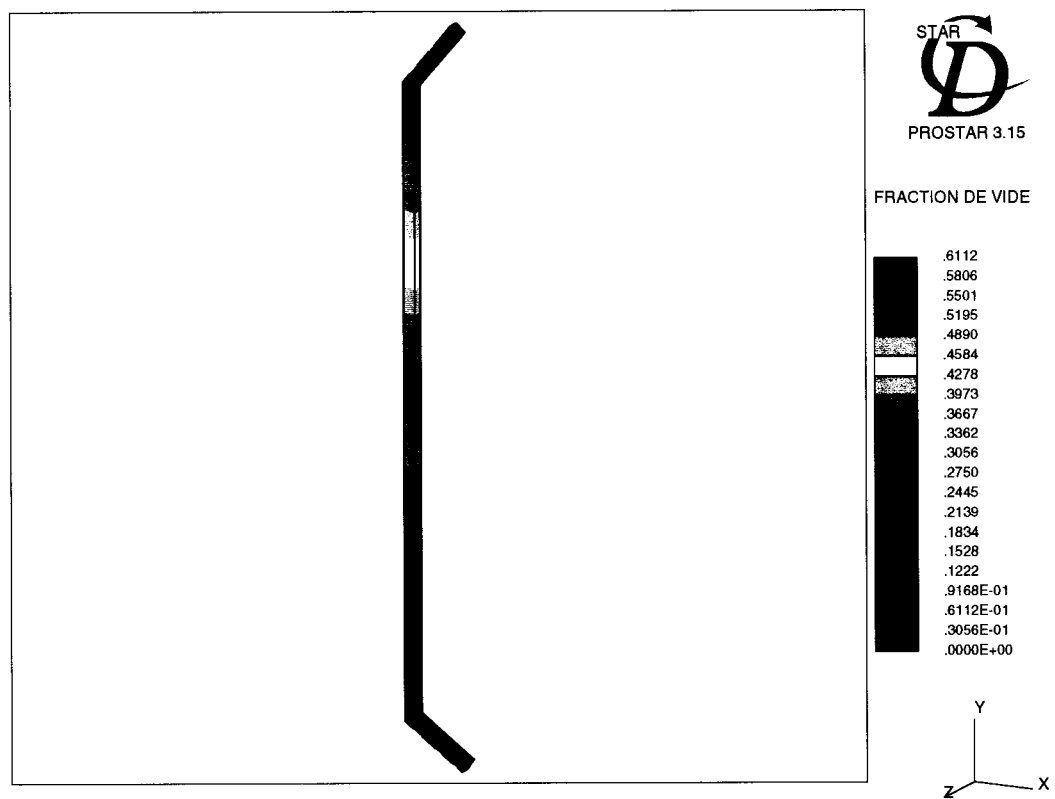


Figure 4.33: Fraction de vide dans un tube de la banque de tubes.

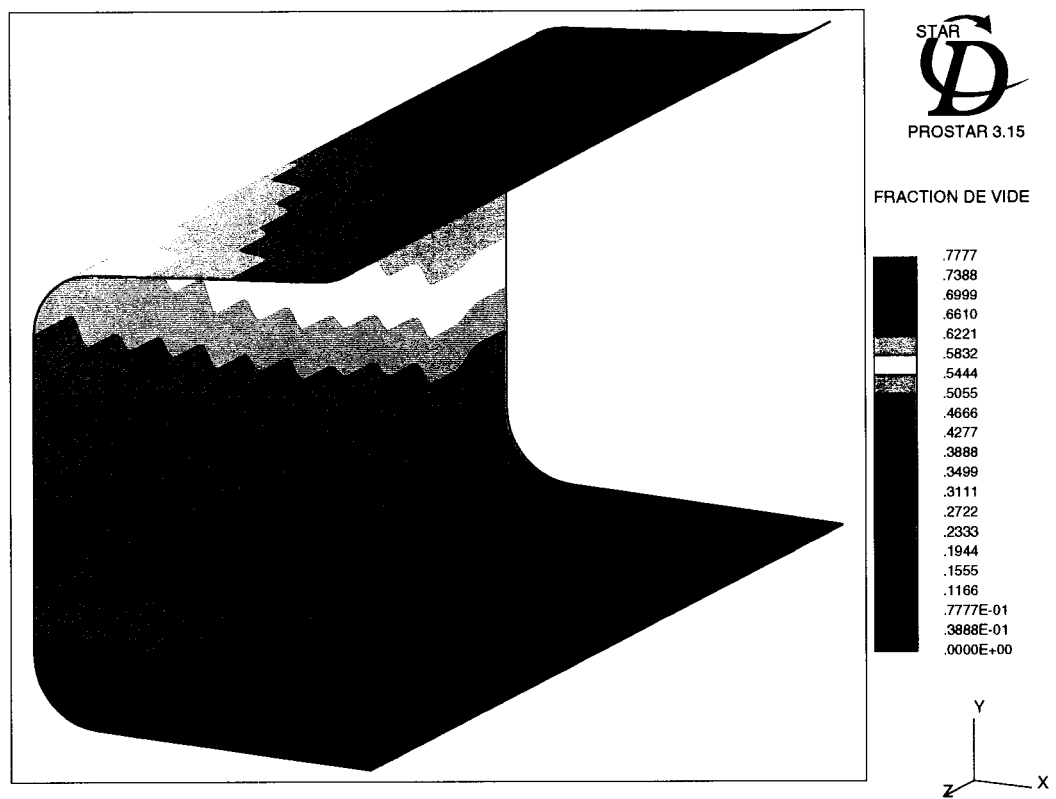


Figure 4.34: Fraction de vide dans les tubes du foyer.

CONCLUSION

L'objectif principal de cette étude consistait à développer une interface permettant de coupler des modèles de simulations des côtés feu et eau de chaudières industrielles. Ceci a permis d'obtenir un rétroaction de la part de toutes les composantes de la chaudières. Il s'agissait de coupler deux codes de simulations numériques, STAR-CD utilisant la librairie de combustion CMBLIB, et le code BOILER-II. L'ensemble STAR-CD/CMBLIB est un code tridimensionnel de simulations d'écoulements turbulents réactifs tandis que le code BOILER-II est un code unidimensionnel de la simulation d'écoulements diphasiques. L'interface créée contient des modèles physiques permettant de transférer le flux de chaleur, une quantité surfacique, (calculé dans STAR-CD) en source ponctuelle pour BOILER-II. Celui-ci calcule les propriétés de l'écoulement diphasique et la température externe des parois des tubes qui est finalement transférée comme nouvelle condition frontière à STAR-CD/CMBLIB.

La simulation de validation a été effectuée sur une chaudière de type D. Afin de diminuer le nombre de cellules de calcul, les tubes ronds des banques de tubes sont remplacés par des tubes à section carrée équivalente. Des corrélations numériques pour le transfert de chaleur et la perte de charge dans les banques de tubes ont été utilisées. L'usage de tubes carrés équivalents permet de traiter une chaudière complète à l'intérieur d'un délai raisonnable pour l'industrie (3-4 semaines). Cette approche s'avère un succès, car la simulation complète de la chaudière a pris moins de trois semaines. La simulation a été comparée avec les valeurs du manufacturier et celles issues de la simulation sans discrétisation des tubes. Les résultats démontrent une amélioration par rapport à ceux du cas sans tubes. On a surtout remarqué une amélioration de la prédiction de la température à la sortie de la

deuxième banque de tubes, et de la perte de charge totale à travers les banques de tubes.

On a aussi amélioré les prédictions du côté eau. On peut maintenant afficher le débit massique passant dans les tubes ainsi que la fraction de vide dans les tubes ce qui n'était pas possible auparavant. Ceci a permis de connaître la quantité de vapeur générée en tout point de la chaudière. On a pu également obtenir avec une plus grande facilité la proportion des phases gazeuse et liquide partout le long des tubes. Un des points importants à éviter lors de la conception d'une chaudière est la présence d'écoulements stratifiés dans les tubes. On en a observé dans le plancher de la chaudière, mais, puisque la fraction de vide était très faible à cet endroit, il s'agissait en fait seulement de petites bulles s'écoulant le long de la surface supérieure du tube, un phénomène sans danger. On a aussi remarquer que le titre thermodynamique est différent entre les cas de simulations à flux de chaleur variable et constant pour une même puissance totale fournie à la chaudière.

On peut donc conclure que le couplage des côtés feu et eau permet d'obtenir de bien meilleurs résultats que des simulations séparées de chacune des composantes d'une chaudière. L'interface est donc un outil complet capable d'intégrer les effets de toutes les composantes de la chaudière. Ce nouvel outil de calcul permet maintenant de mesurer l'impact d'un changement d'une des composantes du système sur l'opération de chaudières complètes.

RÉFÉRENCES

- ARRHENIUS, S. (1889). Über die reaktions geschwindigkeit der inversion von rohrzucken durch sauren. *Z. Phys. Chem.*, 4.
- ASKARI-SARDHAI, A., LIEW, S. K. et MOSS, J. B. (1985). Famelet modelling of propane-air chemistry in turbulent non-premixed combustion. *Combust. Sci. Tech.*, 44, 89–95.
- BASU, P., KEFA, C. et JESTIN, L. (2000). *Boilers and Burners: Design and Theory*. Springer-Verlag, New York.
- BÉER, J. M. et CHIGIER, N. A. (1972). *Combustion Aerodynamics*. John Wiley and Sons.
- BEUTHE, T. G. et HANNA, B. N. (1999). *CATHENA MOD-3.5b/Rev 0 Theoretical Manual*. COG-99-7.
- BILGER, R. W. (1975). Turbulent diffusion flames. *Prog. Ener. Combust. Sci.*, 1, 87.
- BORGHI, R. et DESTRIAU, M. (1995). *La combustion et les flammes*. Technip, Paris.
- BOUSSINESQ, J. (1877). Théorie de l'écoulement tourbillant. *Acad. Sci. Inst. Fr.*, 23, 46–50.
- BRAY, K. N. C. (1976). The interaction between turbulence and combustion. *Sixteenth Symposium (Intl.) on Combustion*. 223–233.
- CARNAHAN, B., LUTHER, H. A. et WILKES, J. O. (1969). *Applied Numerical Analysis*. John Wiley & Sons.

- CHIENG, C. C. et LAUNDER, B. E. (1980). On the calculation of turbulent heat transport downstream from an abrupt pipe expansion. *Num. Heat Transfer*, 3, 189–207.
- CHUNG, éditeur (1993). *Numerical Modeling in Combustion*. Series in Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Science. Taylor and Francis, Washington D.C.
- DELHAYE, J. M., GIOT, M. et REITHMULLER, M. (1981). *Thermohydraulics of Two-Phase Systems for Industrial Design and Nuclear Engineering*. McGraw-Hill, New York.
- DERVIEUX, A. et LARROUTUROU, B. (1989). *Numerical Combustion*. Lecture Notes in Physics. Springer Verlag.
- EATOUGH, C. N. (1991). *Controlled Profile Reactor Design and Combustion Measurement*. Thèse de doctorat, Brigham Young University.
- FAVRE, A. (1965). Équations des gaz turbulents compressibles. *J. de Méc.*, 4, 361–421.
- FERGUSON, C. R. (1986). *Internal Combustion Engine*. John Wiley and Sons, New York.
- GANAPATHY, A. (1998). Boilers circulation calculations. *Hydrocarbon Processing*, 4, 101–106.
- GARDINER, W. C., éditeur (1984). *Combustion Chemistry*. Springer-Verlag, New York.
- GLASSMAN, I. (1977). *Combustion*. Academic Press.
- GORDON, S. et MCBRIDE, B. J. (1971). Computer program for calculation of complex chemical equilibrium composition, rocket performance, incident and

- reflected shock and Chapman Jouguet detonations. Rapport technique, NASA-SP 273.
- GOSMAN, A. D., LOCKWOOD, F. C. et SALOOJA, A. P. (1976). The prediction of cylindrical furnaces gaseous fueled with premixed and diffusion burners. *Sixteenth Symposium (Intl.) on Combustion*. 747-760.
- GOSMAN, A. D., PUN, W. M., RUNCHAL, A. K. et SPALDING, D. B. (1969). *Heat and Mass Transfer in Recirculating flows*. Academic Press, London and New York.
- HEYWOOD, J. B. (1986). *Internal Combustion Engine Fundamentals*. McGraw-Hill, New York.
- HJERTAGGER, B. H. et MAGNUSSEN, B. F. (1982). Computer simulation of flow, heat transfer and combustion in three-dimensional furnaces. *Arch. Combust.*, 2(1-2), 25-48.
- HOLMAN, J. P. (1990). *Heat Transfer*. McGraw-Hill, New York.
- ISHII, M. (1975). *Thermo-Fluid Dynamic Theory of Two-Phase Flow*. Eyrolles, France.
- JANAF (1986). *Thermochemical Tables*. American Institute of Physics for the National Bureau of Standards, Washington D.C., troisième édition.
- JAYATILLEKE, C. L. V. (1969). The influence of Prandtl number on the resistance of the laminar sub-layer to momentum and heat transfer. *Prog. Heat Mass Trans.*, 1, 193-199.
- JONES, W. P. (1980). Models for turbulent flows with variable density and combustion. W. Kollmann, éditeur, *Prediction methods for turbulent flows*. Hemisphere Publishing, Washington D.C., 379-421.

- JONES, W. P. et LAUNDER, B. E. (1972). The predictions of laminarization with a two-equation model of turbulence. *Intl. J. of Heat and Mass Trans.*, 15, 301–314.
- JONES, W. P. et WHITELAW, J. H. (1982). Calculation methods for reacting turbulent flows: A review. *Combust. and Flame*, 48, 1–26.
- JONES, W. P. et WHITELAW, J. H. (1984). Modelling and measurements in turbulent combustion. *Twentieth Symposium (Intl.) on Combustion*, 233–249.
- KENT, J. H. et BILGER, R. W. (1976). The prediction of turbulent diffusion flame fields and nitric oxide formation. *Sixteenth Symposium (Intl.) on Combustion*, 1643–1656.
- KHALIL, E. E. (1982). *Modelling of Furnaces and Combustors*. Abacus Press, Turnbridge Wells, UK.
- KHALIL, E. E., SPALDING, D. B. et WHITELAW, J. H. (1975). The calculation of local flow properties in two-dimensional furnaces. *Intl. J. Heat mass Trans.*, 18, 775–791.
- KHALIL, K. E., MAHALLAWY, F. M. E., KHALIL, E. E. et SPALDING, D. B. (1977). *Flow Mixing and Heat Transfer in Furnaces*. Pergamon Press.
- KIM, Y. M. (1987). *Finite-Element Methods in Turbulent Combustion*. Thèse de doctorat, University of Alabama in Huntsville.
- KOCAMUSTAFAOGULLARI, G. (1971). *Thermo-Fluid Dynamics of Seperated Two-Phase Flow*. Thèse de doctorat, Georgia Institute of Technology.
- KONDRATIEV, V. N. (1964). *Chemical Kinetics of Gas Reactions*. Pergamon Press.

- KREITH, F. et BLACK, W. Z. (1980). *Basic Heat Transfer*. Harper and Row, New York.
- KUO, K. K. (1986). *Principles of Combustion*. John Wiley and Sons.
- LAUNDER, B. E. et SPALDING, D. B. (1974). The numerical computation of turbulent flows. *Comput. Meth. in Appl. Mech. Eng.*, 3, 269–289.
- LEWIS, B. et VON ELBE, G. (1961). *Combustion, Flames and Explosions of Gases*. Academic Press, New York.
- LEWIS, M. H. et MOSS, J. B. (1978). Time resolved scalar measurements in a confined turbulent premixed flame. *Seventeenth Symposium (Intl) on Combustion*. 267.
- LIBBY, P. A. et WILLIAMS, F., éditeurs (1980). *Turbulent Reacting Flows*, vol. 44 de *Topics in Applied Physics*. Springer-Verlag, New York.
- LIEW, S. K., BRAY, K. N. C. et MOSS, J. B. (1981). A flamelet model of turbulent non-premixed combustion. *Combust. Sci. Tech.*, 27, 69–73.
- LOCKWOOD, F. C. (1977). The modelling of turbulent premixed and diffusion flames in the computation of engineering flows. *Combust. and Flame*, 29, 111–122.
- LOCKWOOD, F. C. et NAGUIB, A. S. (1975). The prediction of the fluctuations in the properties of free, round-jet, turbulent, diffusion flames. *Combust. and Flame*, 24, 109–124.
- LOCKWOOD, F. C. et SHAH, N. G. (1981). A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures. *18th Symposium (Intl.) on Combustion*, 1405–1414.

- MAURY, F. A. et LIBBY, P. A. (1995). Nonpremixed flames in stagnating turbulence part I – The $k - \epsilon$ theory with equilibrium chemistry for the methane–air system. *Combust. and Flame*, 102, 341–356.
- MCKENTY, F. (1992). *Modèles de combustion pour la simulation numérique d'écoulements réactifs en atmosphère confinée*. Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.
- MITCHELL, R. E., SAROFIM, A. F. et CLOMBURG, L. A. (1980). Experimental and numerical investigation of confined laminar diffusion flame. *Combust. and Flame*, 37, 227–244.
- MONNOT, G., éditeur (1975). *La combustion dans les fours et chaudières*. Technip, Paris.
- NELSON, M. T. (1995). *CIRC: HRSG Evaporator Circulation Modelling Program*. Combustion Engineering Inc., Windsor, Connecticut.
- NIKJOOY, M. (1987). *On the Modelling of Non-Reactive and Reactive Turbulent Combustion Flows*. Thèse de doctorat, Arizona State University.
- PATANKAR, S. V. (1980). *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing.
- PATANKAR, S. V. et SPALDING, D. B. (1970). *Heat and Mass Transfer in Boundary Layers, a General Calculation Procedure*. Intertext Books, London.
- PATANKAR, S. V. et SPALDING, D. B. (1972). A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *Intl. J. Heat Mass Trans.*, 15, 1787–1806.
- PETERS, N. et KEE, R. J. (1987). The computation of stretched laminar methane–air diffusion flame using a reduced four-step mechanism. *Combust. and Flame*, 68, 17–29.

- POPE, S. B. (1982). Calculation methods for reacting turbulent flows: A review. *Combust. and Flame*, 48, 1–26.
- POPE, S. B. (1976). The probability approach on the modelling of turbulent reactive flows. *Combust. and Flame*, 27, 299.
- RANSOM, V. et TEAM, T. R. C. D. (1995). *RELAP5/MOD3 Code Manual Volume 1: Code Structure, System Models and Solution Methods*. NUREG/CR-5535.
- REGGIO, M., AGOUZOUL, M. et CAMARERO, R. (1987). Computation of incompressible turbulent flows by an opposed-differencing scheme. *Num. Heat Transfer*, 12, 307–320.
- REYNOLDS, O. (1895). On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*. vol. 186 de *Series A*, 123.
- RHODES, R. P. (1975). *Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows*. Plenum Press, New York.
- RICHARDSON, J. N., HOWARD, H. C. et SMITH, R. W. (1953). *Fourth Symposium (Intl.) on Combustion*.
- ROWE, D. S., CARVER, M. B., BANAS, A. et KITELEY, J. C. (1993). *ASSERT-PV Theoretical Description and Numerical Solution*. AECL Research, ARD-TD-391, COG-92-371, RC-925.
- SCHIESTEL, R. (1993). *Modélisation et simulation des écoulements turbulents*. Hermes, Paris.
- SINGER, J. (1991). *Combustion Fossil Power: A Reference Book on Fuel Burning and Steam Generation*. Combustion Engineering Inc., Windsor, Connecticut.

- SMOOKE, M. D., MITCHELL, R. E. et KEYES, D. E. (1989a). Numerical solution of a confined axisymmetric laminar diffusion flame. *Combust. Sci. and Tech.*, 67, 85–122.
- SMOOKE, M. D., MITCHELL, R. E. et KEYES, D. E. (1989b). Numerical solution of a confined axisymmetric laminar diffusion flame. *Proceedings of the Fifth International Symposium on Numerical Methods in Engineering*. vol. 1 de *Computational Mechanics Publications*, 185–194.
- SPALDING, D. B. (1971a). Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. *Thirteenth Symposium (Intl) on Combustion*. 649–657.
- SPALDING, D. B. (1971b). Concentration fluctuations in a round turbulent free jet. *Chem. Eng. Sc.*, 26, 95–107.
- SPALDING, D. B. (1979). *Combustion and Mass Transfer*. Pergamon Press, Oxford.
- STEWART, C., WHEELER, C., CENA, R., MCMONAGLE, C., CUTA, J. et TRENT, D. (1977). *COBRA-IV: The Model and The Method*. BNWL-2214, NRC-4.
- STULTZ, S. C. et KITTO, J. B. (1992). *STEAM its generation and use*. Babcock & Wilcox Inc., Baberton Ohio.
- TAHIR, A., KITELEY, J. C., CARVER, M. B., BANAS, A. et ROWE, D. S. (1988). *ASSERT-4 Theory Manual*. CRNL-4221.
- THURGOOD, M. J., CROWELL, K. R. et KELLY, J. M. (1981). *COBRA-TF: Equations and Constitutive Models*. FATE-81-106, Battelle Pacific Northwest Laboratory, Richland, Washington.
- URNS, S. R. (1996). *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGraw-Hill.

- TYE, P. (2001). *BOILER-II: The Model and The Method*. Rapport interne BMA-2001.
- VERNIER, P. et DELHAYE, J. M. (1968). Équation général des écoulements diphasiques appliquées à la thermohydrodynamique des réacteur nucléaires à eau bouillante. *Extrait de la revue EPE, IV*.
- VIOLLET, P. L. (1986). Modélisation numérique de flammes de diffusion en régime turbulent. *Bulletin de la direction des études et recherches*. vol. 2 de *Série A*, 5–21.
- WEBB, S. W. et ROWE, D. S. (1986). *Modeling Techniques For Dispersed Multiphase Flows*. Encyclopedia of Fluid Mechanics. Gulf Publishing Company.
- WENG, Z. M. et CHEN, D. Z. (1988). Numerical method of computation of turbulent flow field of two-dimensional hydrogen-air mixing stream with detailed chemical reaction mechanism. *Intl. J. Hydrogen Ener.*, 13, 355–362.
- WILCOX, D. G. (1993). *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries Inc., Cañada, CA.
- WILLIAMS, F. A. (1965). *Combustion Theory*. Addison-Wesley, Reading, MA.
- WILLIAMS, F. A. (1975). *Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows*. Plenum Press, New York.
- WILLIAMS, F. A. (1985). *Combustion Theory*. Benjamin-Cummings, Menlo Park, CA, seconde édition.
- Y. B. ZELDOVICH, P. Y. S. et FRANK-KAMENETSKII, D. A. (1974). Oxidation of nitrogen in combustion. *Academy of Sciences of USSR*.