



**HAL**  
open science

# Modélisation du couplage thermique entre la combustion et l'encrassement des tubes dans un four de raffinerie

Thomas Pedot

## ► To cite this version:

Thomas Pedot. Modélisation du couplage thermique entre la combustion et l'encrassement des tubes dans un four de raffinerie. Thermique [physics.class-ph]. Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT, 2012. Français. NNT: . tel-04281848v1

**HAL Id: tel-04281848**

**<https://theses.hal.science/tel-04281848v1>**

Submitted on 2 Sep 2012 (v1), last revised 13 Nov 2023 (v2)

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



# THÈSE

En vue de l'obtention du

## DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

---

**Présentée et soutenue par :**

**Thomas PEDOT**

Le 16/02/2012

**Titre :**

Modélisation du couplage thermique entre la combustion et l'encrassement  
des tubes dans un four de raffinerie

---

**École doctorale et discipline ou spécialité :**

ED MEGEP : Énergétique et transferts

**Unité de recherche :**

CERFACS

**Directeur(s) de Thèse :**

Bénédicte CUENOT

Eléonore RIBER

**Rapporteurs :**

Olivier COLIN

Denis LEMONNIER

**Autre(s) membre(s) du jury :**

Dany ESCUDIE

Mouna EL HAFI

Frederic SER

*Cette thèse est dédiée à la mémoire de  
Candide, Gisèle et Simone qui m'ont  
donné, par leurs origines diverses, une  
culture riche et offert à mes parents la  
possibilité de me transmettre leur goût  
pour la connaissance et m'évitant, je l'es-  
père, un certain immobilisme.*

## Remerciements

En préambule à ce mémoire, je souhaitais adresser mes remerciements les plus sincères aux personnes qui m'ont apporté leur aide et qui ont contribué à l'élaboration de ce mémoire ainsi qu'à la réussite de ces trois formidables années.

Je tiens à remercier sincèrement Bénédicte CUENOT et Eléonore RIBER, pour l'aide et le temps qu'elles ont bien voulu me consacrer et sans qui ce mémoire n'aurait jamais vu le jour.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance envers Mesdames Dany ESCUDIÉ et Mouna EL HAFI, ainsi que Messieurs Olivier COLIN, Denis LEMONNIER et Frederic SER d'avoir pris le temps de lire et corriger ce travail.

Mes remerciements s'adressent également à l'équipe CSG, qu'on ne va voir qu'en cas de problèmes, à Sévrine, Marie, Chantal, Michèle et Nicole pour leur générosité et l'animation dans les couloirs.

J'exprime ma gratitude à tous les doctorants et post-doctorants rencontrés. En particulier, je pense à Pierre avec qui nous avons tenté de refaire le monde au moins une bonne centaine de fois, à Anthony avec qui j'ai partagé non seulement le bureau mais aussi mes nombreux doutes, à Greg avec qui j'ai partagé de nombreux rhum (10h du matin, c'est tôt tout de même...), à Bénédetta, cette pile italienne canalisée par Matthias le généreux, à Basti et Marina pour leur gentillesse (les apéros Vascos vont me manquer), Jorge et Damien pour les conseils.

Je n'oublie pas mes parents, mon frère et ma sœur pour leur soutien sans failles et leur écoute. Une pensée émue est dirigée vers mes trois grands-parents, Candide, Gisèle et Simone, à qui j'aurais profondément aimé montrer le chemin parcouru.

Enfin, j'adresse mes plus sincères remerciements à tous les fanfarons (oui c'est plus simple la liste est beaucoup trop longue...), qui m'ont permis de voyager, de décompresser au cours de la réalisation de cette thèse et accepte encore mes coups de gueule.

Merci à tous et à toutes.

## Résumé :

Dans les fours de raffinerie, l'efficacité du transfert énergétique vers le pétrole brut avant sa distillation est altérée par la formation d'un composé carboné dans les tubes, appelé coke. Cela conduit à l'augmentation des coûts de production et de maintenance, et exige une compréhension accrue ainsi qu'un meilleur contrôle de ce phénomène. Cet encrassement est de type chimique et induit par les fortes températures. Dans les fours de cette dimension, le transfert de chaleur s'effectue principalement par rayonnement des produits de combustion. Le flux radiatif net sur les surfaces d'échange des tubes dépend de la température de toutes les surfaces solides et a donc besoin d'être prédit avec une précision suffisante. La température sur les tubes est le résultat d'un équilibre entre le rayonnement thermique et la conduction. Le comportement thermique de l'ensemble du système est un problème de couplage entre le rayonnement et la conduction.

Une méthodologie complète de couplage est exposée et validée de la manière suivante.

Dans ce problème, la flamme est décrite par un modèle analytique axisymétrique avec chimie complexe. Le couplage avec la conduction dans les tubes est réalisé par l'utilisation d'une méthode aux ordonnées discrètes (DOM) avec un modèle spectral de type bandes étroites pour le rayonnement des gaz de combustion. Un bilan énergétique confirme que les transferts de chaleur sont dominés par le rayonnement thermique. Un bon accord avec les mesures disponibles sur un four réel montre que l'approche proposée est capable de prédire le rayonnement thermique.

L'étape suivante consiste à coupler le calcul de la température du tube à une loi d'encrassement. Un modèle chimique simple est utilisé. Il est validé à l'aide d'une expérience de laboratoire. La comparaison entre les températures obtenues avec la simulation et celles mesurées par des sondes thermiques montre que la simulation est capable de capturer l'évolution de la température dans le tube avec précision.

Enfin, un modèle d'encrassement pour la configuration réelle est trouvé puis appliqué dans une simulation couplée complète. Cette simulation montre un bon accord entre l'évolution de la température sur site et dans la simulation. Une analyse plus poussée est réalisée sur les profils de température, de flux radiatif et de dépôt de coke et montre l'impact de ce dépôt sur l'installation.

**Mots clés :** Transferts, rayonnement, conduction, combustion, dépôt de coke, couplage, multi-physiques, modélisation numériques, Méthodes aux Ordonnées Discrètes (DOM)

**Abstract :**

In industrial refinery furnaces, the efficiency of the thermal transfer to heat crude oil before distillation is often altered by coke deposition inside the process pipes. This leads to increased production and maintenance costs, and requires better understanding and control. Crude oil fouling is a chemical reaction that is, at first order, thermally controlled. In such large furnaces, the predominant heat transfer process is thermal radiation by the hot combustion products, which directly heats the pipes. As radiation fluxes depend on temperature differences, the pipe surface temperature also plays an important role and needs to be predicted with sufficient accuracy. This temperature results from the energy balance between thermal radiation and conduction in the solid material of the pipe, meaning that the thermal behavior of the whole system is a coupled radiation-conduction problem.

A comprehensive methodology for coupling is exposed and validated as follows.

In this work, the flame is described by an analytical model axisymétrique with complex chemistry. Coupling with conduction in the pipes is achieved by using a discrete ordinate method (DOM) together with narrow band spectral model for combustion gases radiation. Energy balance confirmed that heat transfer is dominated by thermal radiation. Good agreement with available measurements on a real furnace shows that this approach is able to predict the thermal radiation.

Next step, pipe temperature calculation is coupled with a law of fouling. A simple chemical model is used. It is validated using a laboratory experiment. The comparison between the temperatures obtained with the simulation and those measured by thermal probes shows that the simulation is able to capture the evolution of the temperature in the tube accurately.

Finally, the whole system, including radiation, conduction and deposition, is coupled. Results are compared to the real furnace and show relatively good agreement in terms of external skin pipe temperature prediction.

**Keywords :** Transfer, radiation, conduction, combustion, coking, fouling, coupling, discrete ordinates method (DOM)

# Table des matières

<b>Nomenclature</b>	<b>iii</b>
<b>Préambule</b>	<b>iv</b>
I    Qu'est-ce que le pétrole? . . . . .	v
1.    Origine du pétrole . . . . .	v
2.    Composition des huiles lourdes . . . . .	vi
II   Raffinage et séparation des pétroles bruts . . . . .	viii
III  Les fours de raffinerie . . . . .	xii
IV  Phénomènes d'encrassement . . . . .	xiv
1.    Une accumulation de solide indésirable . . . . .	xiv
2.    Coûts . . . . .	xv
3.    Un problème croissant . . . . .	xviii
V   Objectifs de la thèse . . . . .	xviii
VI  Organisation du manuscrit . . . . .	xix
<b>I Mécanismes physiques à l'origine du phénomène de dépôt</b>	<b>1</b>
<b>1 Formation de dépôt dans les fours de raffinerie</b>	<b>5</b>
I    Origines du phénomène de dépôt . . . . .	5
II   Types d'encrassement . . . . .	7
III  Conséquence thermique du dépôt . . . . .	9
IV  Paramètres d'influence majeurs . . . . .	11
1.    Température de surface et température de film . . . . .	11
2.    Température du fluide . . . . .	11
3.    Vitesse d'écoulement . . . . .	12
4.    Propriétés du fluide . . . . .	12

V	Modèles d'encrassement . . . . .	12
1.	Principes de la modélisation . . . . .	13
2.	Modèle simple général . . . . .	14
3.	Modèle asymptotique . . . . .	15
4.	Modèle de <i>Ebert et Panchal</i> [1] . . . . .	15
5.	Modèles globaux . . . . .	16
VI	Mesure de l'encrassement . . . . .	17
VII	Conclusion . . . . .	18
<b>2</b>	<b>Combustion</b>	<b>19</b>
I	Définition des combustibles gazeux brûlés dans les fours . . . . .	19
II	Modélisation de la combustion dans le brûleur du four . . . . .	21
1.	Modèle analytique . . . . .	24
2.	Hypothèses principales . . . . .	24
3.	Équations de conservation . . . . .	25
4.	Résolution du problème réactif : modèles pour la structure d'une flamme de diffusion . . . . .	26
5.	Résolution de l'équation de transport pour la fraction de mélange . . . . .	30
6.	<i>CANDLE</i> . . . . .	34
III	Application au cas industriel <i>Feyzin</i> . . . . .	35
1.	Configuration géométrique et point de fonctionnement . . . . .	35
2.	Champs de fraction de mélange, température et de fractions molaires d'espèces . . . . .	36
<b>3</b>	<b>Thermique</b>	<b>39</b>
3.	Première loi de la thermodynamique : Transferts de chaleur et énergie . . . . .	39
4.	Modes de transfert de chaleur . . . . .	40
5.	Analyse dimensionnelle . . . . .	41
I	Conduction . . . . .	43
1.	Loi de Fourier . . . . .	43
2.	Propriétés de matériaux . . . . .	44
3.	Équation de conduction de la chaleur . . . . .	45
4.	Résolution numérique de l'équation de transfert conductif . . . . .	50
II	Convection . . . . .	53



1.	Notion de couche limite . . . . .	53
2.	Loi de Newton & nombre de <i>Nusselt</i> . . . . .	55
3.	Convection forcée ou naturelle dans un four . . . . .	56
4.	Convection forcée turbulente . . . . .	58
5.	Transferts convectifs forcés avec changement de phase . . . . .	58
6.	Tranferts thermiques par convection dans un four : cas du four <i>Feyzin</i> . . . . .	63
III	Rayonnement . . . . .	64
1.	Nature du rayonnement électromagnétique . . . . .	64
2.	Concepts et lois constitutives du rayonnement thermique . . . . .	65
3.	Grandeurs radiatives . . . . .	68
4.	Propriétés des matériaux et modèles . . . . .	70
5.	Équation du Transfert Radiatif (ETR) . . . . .	76
6.	Méthodes numériques pour la résolution de l'Équation de Transfert Radiatif . . . . .	78
7.	Méthodes aux ordonnées discrètes dans le logiciel <i>PRISSMA</i> . . . . .	79
8.	Rayonnement et autres transferts thermiques . . . . .	87
9.	Mesure du rayonnement incident . . . . .	89
10.	Rayonnement thermique d'un four : Application au cas industriel <i>Feyzin</i> . . . . .	90
IV	Conclusions sur les transferts thermiques dans un four . . . . .	95
<b>II Analyse des modes de transferts thermiques couplés pour la prédiction du dépôt</b>		<b>97</b>
<b>4</b>	<b>Méthode de couplage des phénomènes thermiques et physico-chimiques</b>	<b>101</b>
I	Interaction entre la conduction dans le tube et le rayonnement dans la chambre de combustion . . . . .	101
II	Interaction entre la conduction thermique et la formation du dépôt . . . . .	104
III	Interaction rayonnement, conduction et formation de dépôt . . . . .	105
<b>5</b>	<b>Couplage thermique entre rayonnement et conduction dans un four</b>	<b>107</b>
<b>6</b>	<b>Couplage entre conduction thermique et loi de dépôt</b>	<b>121</b>
I	Expérience de Marteney & Spadaccini . . . . .	121
1.	Prédiction du dépôt de coke pour un carburant liquide . . . . .	123
2.	Stratégie d'accélération du couplage entre conduction et loi de dépôt . . . . .	129
II	Extraction de données sur site . . . . .	130

1.	Bilan thermique sur un tube . . . . .	131
2.	Mesure du dépôt par bilan thermique . . . . .	133
3.	Contruction de la loi de coke dans le <i>Feyzin</i> . . . . .	134
III	Étude de sensibilité . . . . .	137
1.	Erreur sur la puissance transférée au fluide . . . . .	137
2.	Erreur sur le coefficient d'échange . . . . .	138
3.	Erreur sur la résistance thermique due au dépôt . . . . .	138
4.	Évaluation des erreurs sur les données du four du DSV <i>Feyzin</i> . . . . .	139
IV	Conclusions . . . . .	139
<b>7</b>	<b>Couplage thermique entre rayonnement, conduction et dépôt : application à la prédiction de l'encrassement dans le four <i>Feyzin</i></b>	<b>141</b>
I	Configuration . . . . .	142
II	Point de fonctionnement . . . . .	142
III	Mise en place du calcul . . . . .	142
1.	Chambre de combustion . . . . .	143
2.	Tubes solides . . . . .	143
IV	Analyse de l'évolution temporelle de la température sur les thermocouples . . . . .	144
V	Profils moyens le long des tubes . . . . .	145
1.	Température moyenne le long des tubes . . . . .	145
2.	Épaisseur moyenne du dépôt . . . . .	146
3.	Flux radiatifs nets moyens le long des tubes . . . . .	147
VI	Analyse des coupes transversales dans un tube . . . . .	149
1.	Coupe transversale de température . . . . .	149
2.	Coupe transversale de dépôt de coke . . . . .	149
3.	Coupe transversale de flux radiatifs nets . . . . .	150
VII	Conclusions . . . . .	151
<b>III</b>	<b>Conclusions générales et perspectives</b>	<b>155</b>
<b>A</b>	<b>Problème du mélange : fraction de mélange</b>	<b>161</b>
I	Résolution de l'équation de transport pour la fraction de mélange à flux imposé sur la paroi . . . . .	161
1.	Méthode de séparation des variables . . . . .	161

---

2.	Recherche d'une solution particulière . . . . .	163
3.	Évaluation de la longueur de flamme de diffusion . . . . .	164
II	Résolution de l'équation de transport pour la fraction de mélange dans un domaine infini	165
	<b>Table des figures</b>	<b>170</b>
	<b>Liste des tableaux</b>	<b>171</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>180</b>



# Préambule

## I Qu'est-ce que le pétrole ?

### 1. Origine du pétrole

Le terme pétrole vient du latin *petra oleum* qui signifie littéralement « huile de pierre ». C'est une huile inflammable variant de la couleur jaune à la couleur noire. Elle est constituée d'une grande variété d'hydrocarbures trouvés dans les strates sédimentaires de la terre.

Le pétrole provient à l'origine d'organismes microscopiques (animaux et végétaux). La matière organique résiduelle s'est enrichie en carbone et en hydrogène par un processus de décomposition. La transformation de ces matériaux en pétrole est toujours en discussion. Deux théories émergent : la première estime que le pétrole brut provient d'une accumulation de matières organiques depuis plus de 500 millions d'années sous la croûte terrestre. La seconde suppose que le pétrole prend son origine dans les mers, du fait de la présence d'iode et de bromine. La transformation à partir de dépôts marins est due en partie à une décomposition anaérobie par les bactéries.

Les pétroles sont issus d'une transformation par des réactions réductrices de la matière organique en kérogène<sup>1</sup> dans un milieu peu oxygéné et sous-pression. La transformation en hydrocarbures commence vers une température de 60°C, ce qui correspond à un enfouissement de l'ordre de 2000 mètres. La vitesse de transformation augmente avec la température jusqu'à 100°C (3000m) puis, au-delà de cette limite, diminue. Si l'enfouissement est supérieur à 4000m (soit plus de 150°C), il ne se forme plus que du méthane. En tout état de cause, ces transformations sont très lentes et nécessitent plusieurs millions d'années.

Une fois formé, le pétrole est moins dense que la roche qui l'entoure, il peut donc migrer par effet de la pression et par capillarité à travers les strates rocheuses. Des poches réservoirs, constituées de roches imperméables, permettent de stopper l'ascension du pétrole et participent à sa concentration. Ces pièges sont à l'origine de la plupart des réservoirs actuels de pétrole. Aujourd'hui, beaucoup de réserves sont d'origine non marine, comme aux États-Unis dans le bassin de l'Utah.

D'autres évolutions chimiques sont possibles pour la formation du pétrole. Ainsi, les sables bitumineux sont des pétroles ayant perdu en grande partie leurs éléments les plus volatils au cours du processus de transformation. Aucune roche mère imperméable n'a pu stopper la migration de ces hydrocarbures vers la surface. À la fin de leur migration, l'action des bactéries les transforme en bitumes. Les deux plus importants gisements au monde de ce type se situent en Alberta (Canada) et dans le bassin du fleuve d'Orénoque (Venezuela). De plus petits gisements de sables bitumineux existent

---

1. Du grec signifiant « qui engendre la cire ». C'est une substance intermédiaire entre la matière organique et les combustibles fossiles.

dans d'autres régions du monde.

Les pétroles sont par nature de composition très différente selon leur histoire géologique. Ils sont désignés du nom des champs dont ils ont été extraits.

La Figure 1 illustre les réserves prouvées de pétrole dans le monde en 2005. Les réserves les plus importantes se situent dans la péninsule arabique avec 743 milliards de barils (31,0% de la production totale). Le Vénézuéla et la Russie possèdent également de grosses réserves avec 80 milliards de barils chacun.

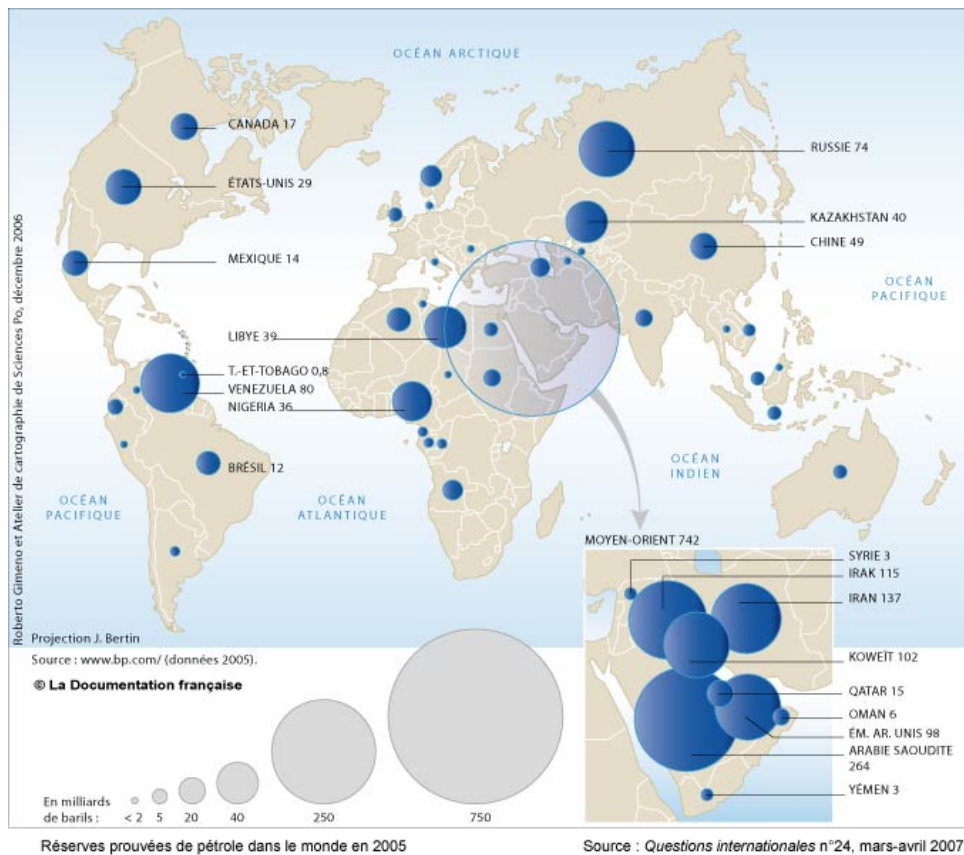


FIGURE 1: Réserves prouvées de pétrole dans le monde en 2005 - Sources : BP Statistics; Questions internationales : La bataille de l'énergie (n°24 mars-avril 2007)

## 2. Composition des huiles lourdes

Les composés principaux du pétrole sont les hydrocarbures, molécules plus ou moins lourdes composées d'atomes d'hydrogène et de carbone (on retrouve l'origine organique du pétrole). Les hydrocarbures sont dits saturés, lorsque la proportion d'hydrogène est suffisamment élevée pour que des liaisons simples soient possibles entre chaque atome de carbone. Les hydrocarbures non saturés possèdent des liaisons multiples entre les atomes de carbone.

Ces composés hydrocarbonés sont classés en plusieurs familles selon leurs propriétés. Le plus simple des hydrocarbures est le méthane  $CH_4$ , le seul à n'avoir qu'un seul atome de carbone.

Les grandes familles sont :

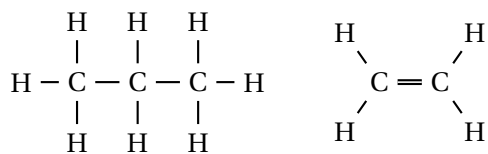
- les alcanes Fig. 2-(a),
- les alcènes (ou oléfines) Fig. 2-(b),
- les aromatiques Fig. 2-(c),
- les alcynes Fig. 2-(d).

La famille des alcanes est une famille d'hydrocarbures saturés. Les alcanes non cycliques possèdent une formule brute de la forme  $C_nH_{2n+2}$ , où  $n$  est un entier naturel non nul. Les plus couramment rencontrés sont le méthane  $CH_4$ , le propane  $C_3H_8$  et le butane  $C_4H_{10}$ . Dans cette famille, les sous-familles sont les alcanes linéaires qui ne contiennent qu'une seule chaîne de carbone, les alcanes ramifiés où des atomes de carbone viennent s'ajouter à une chaîne principale, les alcanes dits cycliques qui forment un cycle fermé de carbones et enfin les paraffines qui sont des alcanes linéaires possédant plus de 8 carbones (liquides de  $n = 8$  à 19 et cires solides de  $n = 20$  à 40).

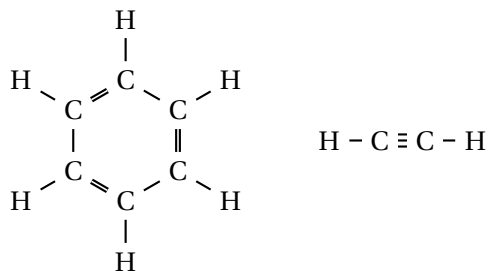
À l'inverse, les alcènes, les alcynes, et les composés aromatiques sont des hydrocarbures insaturés. Les alcènes possèdent une double liaison covalente entre deux atomes de carbone et une formule brute de la forme  $C_nH_{2n}$  pour les chaînes carbonées linéaires. L'alcène le plus simple est l'éthylène ou éthène  $C_2H_2$ . Le terme « oléfine » est également employé pour qualifier ces molécules. Ils peuvent également être cycliques, linéaires ou ramifiés.

Les alcynes sont des hydrocarbures possédant une insaturation due à leur triple liaison carbone-carbone. Quatre atomes d'hydrogène manquent aux alcynes comparés à leur alcane homologue et possèdent la formule brute  $C_nH_{n-2}$  comme formule brute. Ils sont présents, en faible quantité, dans les pétroles et les gaz naturels.

Enfin, le pétrole contient de nombreuses molécules aromatiques. Ces molécules tirent leur nom du fait qu'elles composent généralement les arômes. Ce sont des composés chimiques qui contiennent un système cyclique respectant la règle d'aromaticité de Hückel [2], c'est-à-dire qu'ils possèdent  $4n+2$  électrons délocalisables. En plus de ces composés carbonés, le pétrole contient de nombreux autres éléments chimiques tels que les métaux (aluminium, fer, vanadium...), des produits soufrés ou acides.



(a) Alcane : Propane      (b) Alcène : Ethylène



(c) Aromatique : Benzène      (d) Alcyne : Acétylène

FIGURE 2: Classification des hydrocarbures

## II Raffinage et séparation des pétroles bruts

Avant la commercialisation des hydrocarbures, le procédé de raffinage permet de transformer le brut en une palette de produits pétroliers répondant aux besoins des consommateurs et des industriels. Il consiste en une série d'opérations qui visent à améliorer les caractéristiques et la qualité du pétrole brut.

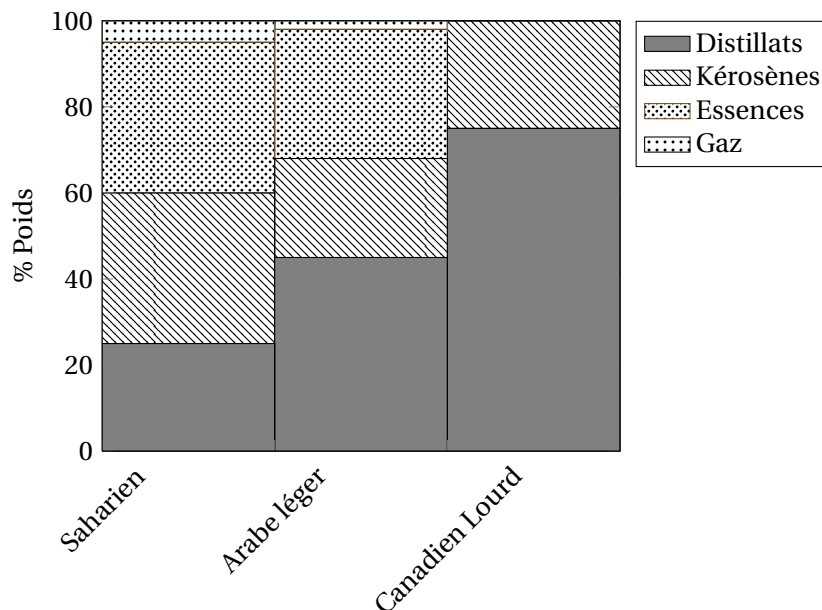


FIGURE 3: Rendement en coupes pétrolières de trois familles de pétrole brut [3]

Le pétrole nécessite d'être raffiné pour le transformer en produits finis adaptés à divers usages. Il n'est pas possible de construire une chaudière ou un moteur universel qui fonctionnerait avec tous les types de brut et qui résisterait à la corrosion. Les différents composés contenus dans un pétrole ne possèdent pas nécessairement la même température d'ébullition. Une famille de produits avec des points d'ébullition comparables est appelée coupe pétrolière, définie alors par la gamme de température d'ébullition ou par le nombre d'atomes de carbone de ses composants. Certaines coupes peuvent être directement utilisées, tandis que d'autres nécessitent plus d'étapes de transformation pour être valorisées.

La Figure 3 montre le rendement de coupes pétrolières gaz et essences (150-180°C), kérosènes (220–240°C) et distillats de trois pétroles. Le pétrole brut saharien peut potentiellement produire plus de kérosène qu'un brut « arabe léger » et qu'un brut « canadien lourd ».

La séparation des coupes pétrolières se fait par distillation. Celle-ci est un processus dans lequel les substances contenues dans un mélange sont séparées en fonction de leur volatilité. Cette séparation peut être effectuée soit par vaporisation d'un mélange liquide, soit par condensation d'un mélange de vapeur. Dans la pratique, le liquide constitué de substances volatiles génère par chauffage de la vapeur qui se sépare du mélange. Cette vapeur est ensuite condensée pour être récupérée.

Une expérience de laboratoire simple illustre ce mécanisme en (Fig. 4). Un mélange de composants à séparer est versé dans un ballon chauffé. Une colonne à fractionnement est surmontée d'un ther-



momètre. La tête de cette colonne débouche sur un tube réfrigéré. Un contenant vient récupérer les produits condensés à leur sortie.

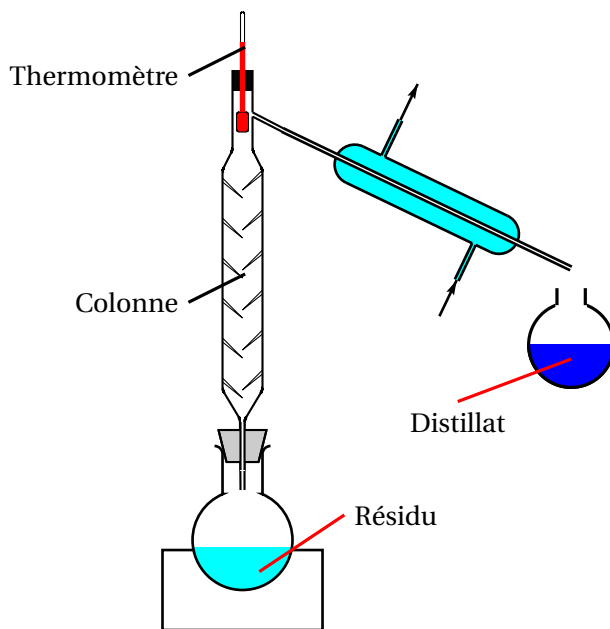


FIGURE 4: Schéma de principe du processus de distillation

Lorsque le liquide atteint l'ébullition, le composé le plus volatil se vaporise et la température indique la température d'ébullition du produit. La vapeur condensée constitue un premier produit pur appelé distillat. Le liquide restant continue à être chauffé jusqu'à observer un changement de température en tête de colonne, un second distillat est produit indiquant qu'un autre composé est vaporisé. Plusieurs paliers de température sont ainsi observés. Chacun correspond à une gamme de produits. Le produit restant dans le ballon en fin de distillation est appelé le résidu.

Ce principe de distillation est adapté dans le procédé de raffinerie de manière à traiter le pétrole brut de façon continue. Avant d'entrer dans la colonne de distillation, le brut est chauffé dans un four atmosphérique à une température d'environ 400°C qui vaporise les composés les plus légers. Ce pétrole partiellement vaporisé est ensuite introduit en bas de la tour de distillation, également appelée colonne de fractionnement (Fig. 5).

Dans ce cylindre d'environ 40m de haut, divers plateaux récupèrent les substrats selon leur température d'ébullition. L'intervalle de température d'ébullition est indiqué sur le schéma de la Fig. 5 pour chaque coupe.

La tour de distillation sépare le brut en cinq coupes principales allant du plus léger « en tête » (température la plus faible) au plus lourd « en fond » de colonne (température la plus élevée) :

- gaz et essences,
- kérosènes,
- gazoles légers,
- gazoles moyens,

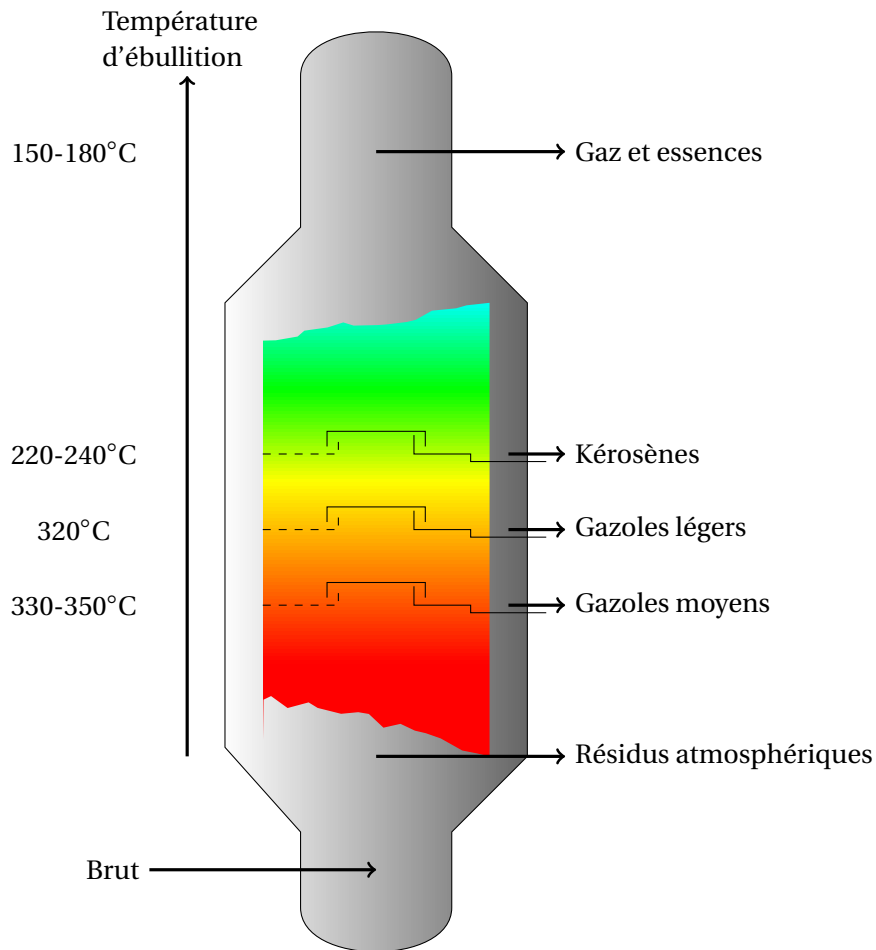
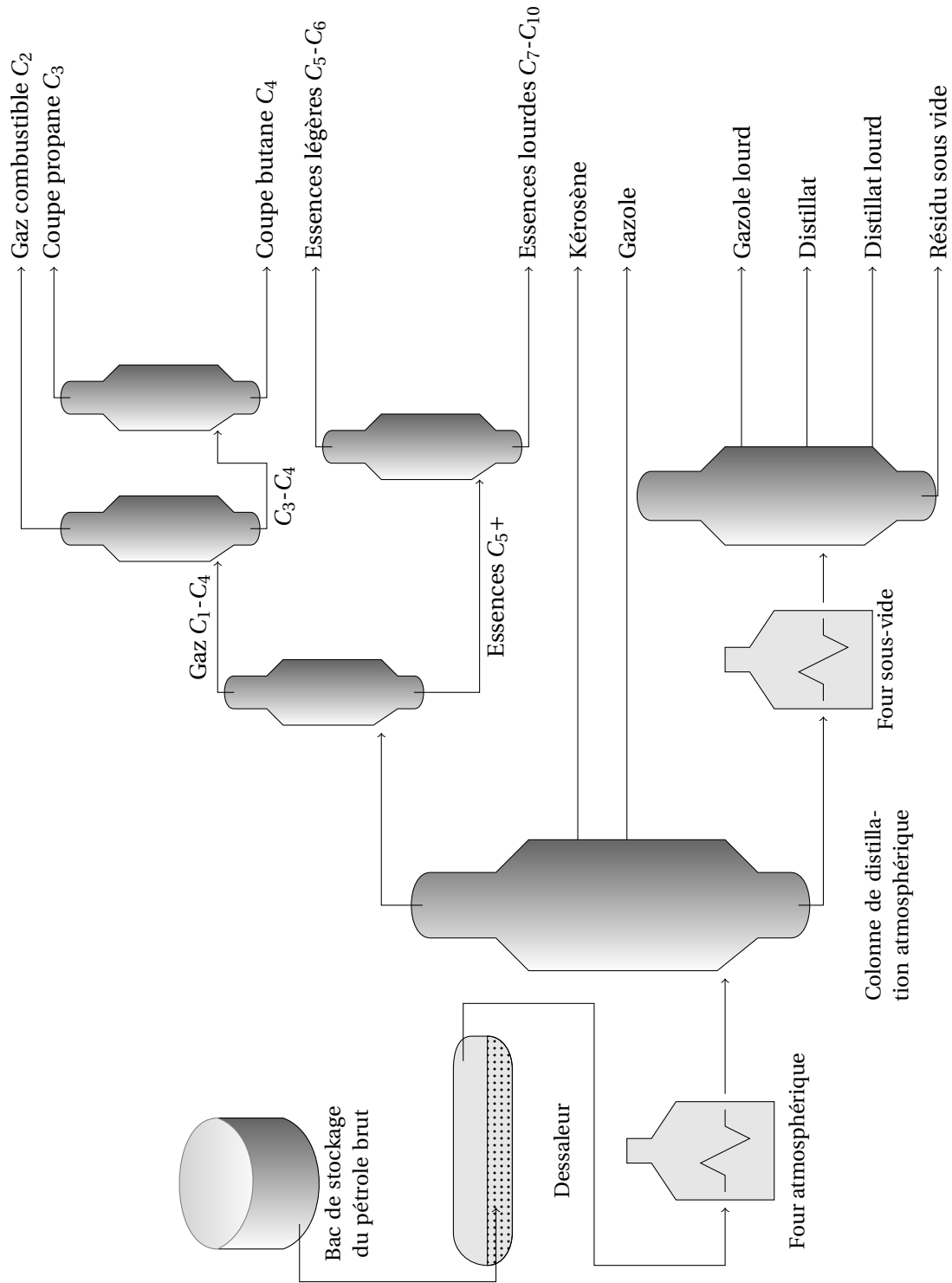


FIGURE 5: Schéma d'une colonne de fractionnement atmosphérique

– **Résidu ATmosphérique (R.AT).**

Les premières raffineries n'étaient formées que d'une unité de distillation atmosphérique. Diverses unités viennent s'ajouter pour traiter le R.AT.. Un schéma d'ensemble d'une raffinerie actuelle est représenté en Fig. 6. Le pétrole passe tout d'abord dans un dessaleur. Le dessalage élimine les sels minéraux et l'eau pour réduire la corrosion des installations. Il atteint ensuite un four atmosphérique et est séparé en coupes par distillation dans une colonne de distillation atmosphérique selon la méthode décrite précédemment.



Colonne de distillation sous vide

FIGURE 6: Schéma simplifié d'une raffinerie

En fond de tour de distillation atmosphérique, le résidu atmosphérique est envoyé dans un second four de distillation sous vide (D.S.V.). L'opération de fractionnement dans une colonne de distillation sous vide permet d'abaisser les températures de distillation. Le risque de dégradation thermique de ces hydrocarbures, avec une température proche 400°C, est plus faible. Cette unité traite les R.AT. et sépare (du plus léger au plus lourd) le gazole lourd, le distillat et le résidu sous vide (R.S.V.). La mise sous vide facilite la séparation des résidus atmosphériques.

Du côté de la tête de la colonne atmosphérique, les différents gaz et essences sont séparés en deux selon la taille de leur chaîne carbonée. Les composés les plus légers possédant de 1 à 10 carbones ( $C_1 - C_{10}$ ) sont de nouveaux séparés par distillation dite à deux produits. Le « débutaniseur » sépare en deux les composés de moins de quatre carbones  $C_4$  du reste. Le « dééthaniseur » sépare les gaz de moins de deux carbones  $C_2$  du reste. Le « dépropaniseur » traite la séparation du propane  $C_3$  du butane  $C_4$ . La colonne de séparation des essences traite l'essence légère  $C_5 - C_6$  de l'essence lourde  $C_7 - C_{10}$ . Et enfin, le « déisopentaniseur » ségrègue l'isopentane de l'essence légère.

Vient ensuite la conversion des excédents de produits intermédiaires en produits à fortes valeurs ajoutées. Selon la nature du produit à raffiner, d'autres opérations, telles que le procédé de vapo-craquage, fournissent des alcènes (éthylène, propylène), à partir d'alcane légers. Ces alcènes sont utilisés dans l'industrie des matières plastiques (polyéthylène, polypropylène, etc.).

Ces étapes successives de fours et de tours de distillation, qui fractionnent le pétrole brut en divers sous-produits de distillation, requièrent un apport d'énergie thermique important. Cette énergie est fournie par combustion dans les fours, puis transmise au fluide circulant à l'intérieur d'un réseau de tubes généralement situés autour de la flamme et à la sortie du four (échangeurs). C'est cette partie concernant l'apport d'énergie qui nous intéresse dans ce travail et la Section III détaille un four de distillation sous vide D.S.V. qui traite des résidus issus de la distillation atmosphérique.

### III Les fours de raffinerie

Les fours à tubes sont largement utilisés dans les installations pétrolières et pétrochimiques pour la distillation du pétrole brut (atmosphérique et sous vide) et le préchauffage des stocks de pétrole, où le chauffage est effectué à des fins de vaporisation uniquement. Ces fours sont également utilisés comme réacteurs, « visbreaker » (afin d'abaisser par chauffage la viscosité des résidus lourds), producteurs d'oléfines, « réformeurs » pour l'hydrogène... Ces fours fonctionnent à basse température comparé aux fours utilisés dans la métallurgie, usines de céramique ou de ciment où les gaz atteignent 1300-1500°C [4]. La production de chaleur d'un brûleur varie de 0,5 à 10<sup>6</sup> MJ/hr et la température des gaz varie de 700 à 1200°C. Ces fours sont communément de géométrie cylindrique ou rectangulaire.

Ces fours sont constitués d'un réseau de tuyaux ou de tubes, d'un réfractaire, de brûleurs, et des éléments de structure. Du combustible gazeux ou liquide est brûlé dans le four à l'aide de brûleurs. La chaleur générée par la combustion est transférée à une charge liquide ou vaporisée d'hydrocarbures dans les tubes. Les fractions les plus légères en haut de colonne servent généralement de combustible.

Les transferts d'énergie se font principalement par rayonnement et par convection des gaz chauds dans l'enceinte. La chaleur totale transférée à la charge d'hydrocarbures étant bien inférieure à la chaleur générée par la combustion, l'excès d'énergie est collecté en sortie du four par un échangeur convectif.

Dans cette thèse, on étudie un four cylindrique implanté à l'usine de raffinage de *Feyzin* pour le chauffage du pétrole brut issu de la colonne de distillation atmosphérique (Fig. 7). Quatre brûleurs centraux permettent d'ajuster la puissance thermique souhaitée. Le réseau de tubes à charges, appelé « passe », est placé verticalement et à égale distance de ces brûleurs. Le matériau de construction des tubes est choisi en fonction de la composition du fluide environnant (air, hydrocarbures et gaz brûlés), ainsi que de la température et de la pression du point de fonctionnement. Les alliages d'acier à base de chrome et de nickel sont principalement utilisés [4]. En effet, le chrome résiste à la corrosion par les sulfures d'hydrogène et le nickel permet d'augmenter la résistance des matériaux soumis à de fortes températures.

Ces tubes sont entourés d'une charpente métallique, appelée « casing », qui constitue l'enceinte du four. La surface des parois intérieures du four est recouverte d'un revêtement réfractaire afin de rayonner la chaleur produite par combustion et de protéger la charpente.

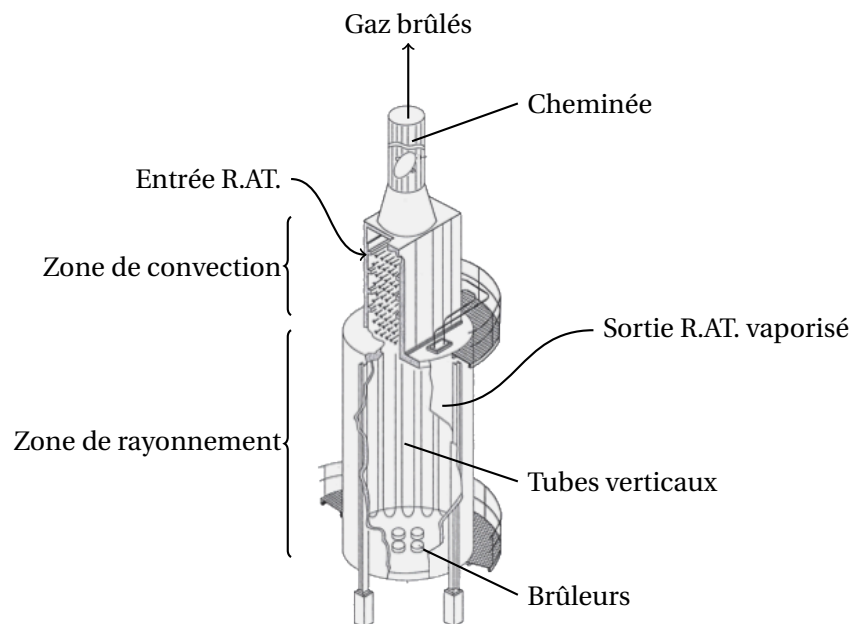


FIGURE 7: Schéma d'un four cylindrique

La récupération de chaleur des fumées se poursuit dans la zone de convection en aval de la zone de rayonnement, à l'aide d'un faisceau de tubes. Dans cette section, le pétrole brut est chauffé par les gaz chauds issus de la section rayonnante. Le pétrole brut circule dans un réseau de tubes placé soit en co-courant soit en contre-courant par rapport aux gaz. Les tubes sont généralement de diamètre plus petit que dans la zone de rayonnement. Les surfaces extérieures des tubes sont étendues pour promouvoir le transfert de chaleur par convection. Cette zone est conçue comme un échangeur de chaleur classique.

Les fumées, après refroidissement, sont rejetées dans l'atmosphère par l'intermédiaire de la cheminée. Les gaz de combustion contiennent du dioxyde de carbone, du monoxyde de carbone, monoxyde de soufre, vapeur d'eau, hydrocarbures imbrûlés, azote, oxygène...

Les gaz et le pétrole brut circulent à contre-courant : le pétrole traverse d'abord le faisceau de tubes de la zone de convection avant d'être introduit dans la zone de rayonnement où il circule dans un

serpentin de 80 tubes périphériques (4 passes) pour y être partiellement vaporisé. Des tubes en acier sont utilisés pour les opérations de chauffage nominal normal avec des diamètres d'alésage variant de 50,8 à 254mm (2 à 10 pouces).

Les brûleurs placés dans ce four sont des brûleurs à gaz et fonctionnent en régime non prémélangé. L'air utilisé est en excès (régime pauvre), préchauffé et aspiré de l'extérieur sous l'effet du mouvement ascendant des gaz.

## IV Phénomènes d'encrassement

L'encrassement est un phénomène qui se produit avec ou sans gradient de température dans un grand nombre de processus naturels, domestiques et industriels. Quelques exemples sont l'obstruction des vaisseaux sanguins par le cholestérol, la catalyse de l'hydrogène, les fluides dans les conduites des échangeurs de chaleur.

### 1. Une accumulation de solide indésirable

L'encrassement se définit comme l'accumulation de solide indésirable sur une surface. Divers encrassements existent. Ils peuvent être cristallins, à base de matière biologique, la conséquence de réactions chimiques, des produits de corrosion, ou des particules de matières. Le caractère du dépôt dépend de la composition du fluide, de son état (liquide ou gazeux) et du type de surface de transfert (métallique, plastique...).

Dans les échangeurs de chaleur, tels que les fours des raffineries, un certain nombre de réactions chimiques produisent sous l'effet de la chaleur des composés carbonés solides qui viennent se déposer sur la surface interne des tubes. Ils représentent une résistance au transfert de chaleur qui altère l'efficacité des transferts dans les fours.

La Figure 8 montre une photographie de la couche de carbone solide déposé par le pétrole chauffé dans les tubes d'un four de raffinerie. Une couche noire et épaisse de coke<sup>2</sup> se forme sur la paroi intérieure des tubes.

Il en résulte un problème de fonctionnement chronique grave dont les sanctions sont économiques et environnementales. Les aspects économiques sont dus à une sous-utilisation des installations en raison de chutes de pression accrues, de la diminution du transfert de chaleur et d'augmentation des coûts de maintenance avec des temps d'arrêt significatifs. L'aspect environnemental est lui directement lié à la consommation d'énergie supplémentaire nécessaire pour compenser la perte d'efficacité. Toute réduction de ces coûts est une contribution bienvenue à la rentabilité et à une gestion plus efficace de l'énergie.

Ce phénomène prédomine dans de nombreuses applications de l'industrie du procédé où une quantité importante de chaleur dégagée par combustion doit être transférée à travers les échangeurs et où les fluides sont donc soumis à de fortes températures. De manière non exhaustive, l'encrassement est très présent dans :

- la pétrochimie,

---

2. Solide composé majoritairement de matière carbonée



FIGURE 8: Dépôt de coke dans un tube de four de raffinerie

- le raffinage du pétrole,
- la pyrolyse (craquage thermique) en phase vapeur,
- le refroidissement des gaz et des huiles,
- la polymérisation de monomères.

Le pétrole est un composé complexe qui sous l'effet de la chaleur se décompose via un certain nombre de réactions chimiques. Ces réactions conduisent à la production de matières carbonées solides encrassant les surfaces de transfert de l'énergie. Cet encrassement induit une résistance aux transferts d'énergie qui réduit la performance du four et oblige à un nettoyage systématique de l'équipement pour restaurer ses performances. Ce processus est très cher et il convient de réduire la fréquence de nettoyage pour minimiser son coût.

## 2. Coûts

La conséquence de l'encrassement est une pénalité économique majeure due à une hausse de la consommation d'énergie et à une augmentation des coûts de maintenance [5].

Dans de nombreux cas, le dépôt est épais et rugueux, et en plus d'opposer une résistance thermique, il augmente la chute de pression dans le système. Cette chute de pression peut dans certains cas devenir la cause majeure de la perte d'efficacité de l'installation.

Plusieurs études tentent d'estimer le coût lié directement et indirectement à l'encrassement. Le tableau 1 résume les ordres de grandeur observés en France, au Royaume-Uni, aux États-Unis, dans la Communauté Économique Européenne (C.E.E.) et en Chine à diverses périodes.

L'ordre de grandeur pour chacune de ces zones est considérable. Le coût annuel global de l'encrassement dans cette industrie correspond à environ 0,3% du produit brut en 1979 au Royaume-Uni[7]. L'étude conclut sur une estimation de 4,68 milliards de dollars en 2006 pour la Chine (0,169% du PIB). L'ordre de grandeur peut être comparé aux dizaines de milliards de dollars liés à l'encrassement aux États-Unis en 1981. Pour l'ensemble de la C.E.E., la part de l'encrassement des échangeurs de chaleur

France (1991) [6]	$10 \times 10^9$ FRF	$1,5 \times 10^9$ €
Royaume Unis (1985) [7]	$300 - 500 \times 10^6$ £	
États-Unis (1981) [8]	$8 - 10 \times 10^9$ \$	$4,8 - 6 \times 10^9$ €
C.E.E. <sup>1</sup> (1993) [9]	$10 \times 10^9$ E.C.U. <sup>2</sup>	$10 \times 10^9$ €
Chine (2006) [10]	$4,68 \times 10^9$ \$	$3,34 \times 10^9$ €

<sup>1</sup> Communauté Économique Européenne

<sup>2</sup> European Currency Unit

TABLE 1: Coûts estimés liés au problème d'encrassement évalués sur une année pour divers pays

correspond de 20 à 30% du coût de l'énergie [9].

Une étude poussée a été réalisée pour les États-Unis [11]. Un ordre de grandeur typique a été donné proche de  $10^7$  \$ par an pour une raffinerie traitant autour de  $10^5$  barils US (N.D.T. *barrels*) de pétrole brut par jour. Si le prix du baril coûte 100\$, l'équivalent d'une journée de production est perdu chaque année dans cette raffinerie.

Au vu de ces données brutes, toute réduction de ces coûts est une contribution bienvenue à la rentabilité et à une gestion plus efficace de l'énergie.

Les pertes d'énergie dues à la diminution de l'efficacité thermique et aux chutes de pression sont évaluées dès la conception d'un nouveau four de raffinerie. L'installation doit être surdimensionnée pour éviter ces pénalités de fonctionnement [12] qui implique des dépenses supplémentaires (maintenance, nettoyage, et utilisation de produits anti-encrassements). Dans les cas les plus sévères, un arrêt de production est nécessaire pour procéder au nettoyage afin de revenir à une efficacité plus importante des installations.

Les facteurs contribuant à l'augmentation des coûts d'exploitation par les dépôts indésirables sur les surfaces des échangeurs de chaleur sont regroupés en quatre classes [13] :

- augmentation des coûts d'investissement initial,
- coûts additionnels liés à la gestion de l'encrassement,
- perte sèche de production,
- coûts d'amélioration des installations.

## 2.1 Augmentation des coûts à l'investissement

L'achat de four ou d'échangeurs de chaleur doit prendre en compte *a priori* l'encrassement, en surdimensionnant les surfaces d'échanges, ce qui augmente évidemment l'investissement. Il convient également de prévoir des dispositifs techniques pour le nettoyage « hors ligne » des installations susceptibles de souffrir d'encrassement plus sévère. Des travaux pour faciliter l'accès peuvent être nécessaires pour un éventuel nettoyage. Un surdimensionnement des pompes peut être également envisagé.

Une mauvaise évaluation de l'encrassement peut engendrer rapidement un surdimensionnement de l'installation et induire un investissement élevé, ou un sous investissement qui entraîne un mauvais fonctionnement de l'installation.



## 2.2 Augmentation des coûts d'exploitation

Toute réduction de l'efficacité d'un four de raffinerie doit être compensée. Si la chaleur de combustion n'est pas récupérée, le déficit devra être compensé par une augmentation de la chaleur disponible, c'est-à-dire de la consommation de combustibles. Dans d'autres procédés, il est nécessaire d'élever la température du fluide pour faciliter une réaction chimique ciblée, par exemple dans les opérations d'hydrocraquage dont le but est l'obtention de produits à faible poids moléculaire à partir de produits plus lourds.

D'autres problèmes peuvent diminuer l'efficacité du système. Par exemple, si la température d'alimentation d'un réacteur chimique est trop faible, le rendement du réacteur peut être réduit. La qualité du produit est altérée et des traitements supplémentaires sont nécessaires pour récupérer un niveau de qualité satisfaisant.

La présence de dépôts sur la surface des échangeurs de chaleur augmente les pertes de charge. En conséquence pour un débit donné la vitesse débitante augmente. De manière approximative, la perte de charge  $\Delta P$  est liée à la vitesse débitante  $u$  par :

$$\Delta P \propto u^2 \quad (1)$$

L'encrassement habituellement rugueux en comparaison avec les surfaces propres des tubes de l'échangeur, augmente le frottement et donc la perte de charge. Pour compenser ces pertes de charge, la puissance délivrée par les pompes doit être augmentée. De plus, la pression d'entrée plus élevée peut provoquer une défaillance des structures et impose une charge plus lourde sur la pompe associée. La fatigue imposée aux tubes peut entraîner, sinon des coûts de fonctionnement supplémentaires, des conditions dangereuses, comme des fuites de matières inflammables ou toxiques.

## 2.3 Pertes de production

L'augmentation des coûts de production est également liée au nettoyage régulier de l'échangeur. Les interruptions de production peuvent être planifiées pour être réduites au minimum. Cela constitue inévitablement une perte de production, car l'arrêt du four impacte fortement la marche globale du site.

La bonne connaissance des problèmes d'encrassement potentiels d'un dispositif dès le stade de la conception permet d'obtenir un cycle de nettoyage optimal. Un compromis doit être trouvé entre le temps de production perdu et la perte due à la chute du rendement.

## 2.4 Coût des mesures correctives

L'utilisation d'additifs pour éliminer ou réduire les effets de l'encrassement a déjà été mentionnée. Un exemple de l'efficacité d'un agent antisalissure sur le préchauffage d'une unité de distillation de pétrole brut a été décrit dans [11]. L'atténuation est considérable, mais exige de grandes quantités de produits chimiques de nettoyage et des mesures de sécurité liées à l'utilisation de ces produits toxiques.

Si le problème d'encrassement ne peut être soulagé par l'utilisation d'additifs, il peut être nécessaire d'apporter des modifications à l'usine. Les modifications doivent par exemple permettre un

nettoyage plus efficace des lignes de production. L'investissement est considérable, il convient d'évaluer le gain obtenu après ces modifications.

### 3. Un problème croissant

Les coûts d'approvisionnement en pétrole ont longtemps varié au cours des dernières décennies. À la fin des années 80 et au début des années 90, les entreprises pétrolières se sont vues contraintes à rationaliser leurs processus de production pour répondre à la hausse globale des prix mondiaux du pétrole du début des années 1980.

En particulier, les industries pétrolières ont dû diversifier leurs sources d'approvisionnement et s'obliger à adopter des méthodes de production plus viables et plus économiques. Parmi ces nouvelles sources d'approvisionnement, les sables bitumineux, forme semi-solide de pétrole brut, de sable, d'argile minérale et de l'eau. Ils sont devenus compétitifs comparés à d'autres sources d'approvisionnement tel que les pétroles « offshore ».

L'exemple de la politique énergétique du Canada reflète cette tendance à chercher des sources d'approvisionnement non conventionnelles. Selon le rapport annuel du ministère de l'Énergie du Canada, 1,61 millions de barils US provenant des sables bitumineux ont été extraits chaque jour en 2010. La production actuelle du Canada a quadruplé par rapport à 1990 [14] et devrait doubler jusqu'à 2015 atteignant 2,7 millions de barils par jour [15]. A titre de comparaison, les producteurs de l'OPEP<sup>3</sup> produisent 35 millions de barils.

Ces réserves placent ainsi le Canada au deuxième rang derrière l'Arabie Saoudite dans le classement mondial des réserves de pétrole brut par pays [15]. Ces deux constats montrent l'intérêt croissant que l'industrie pétrolière accorde à ces « nouvelles » ressources naturelles.

La production de produit raffiné va donc utiliser des produits bruts de plus en plus lourds, présentant une propension à produire un dépôt solide plus important [14].

Ainsi, l'amélioration de l'efficacité des fours actuels se conjugue à la nécessité d'anticiper les nouveaux besoins. Améliorer les connaissances en matière de dépôt sur les surfaces de transfert dans les fours de raffineries est une étape importante pour mieux contrôler ce processus et fait partie de la stratégie d'adaptation aux ressources futures.

## V Objectifs de la thèse

L'encrassement des tubes des fours de raffineries est un problème complexe. La combustion produit des gaz rayonnants à haute température. L'inhomogénéité de température créée dans l'enceinte est à l'origine des transferts thermiques par rayonnement, convection et conduction. Une fois transférée aux tubes, cette chaleur dégagée par la combustion, vient chauffer une charge de pétrole brut et provoque sa décomposition thermique. Des particules de carbones solides viennent se déposer à la surface et bloquent le transfert de chaleur. Un couplage entre la production de dépôt et le chauffage par combustion s'établit.

---

3. Organisation des pays exportateurs de pétrole : Arabie saoudite, Iran, Irak, Koweït, Venezuela, Qatar, Libye, Émirats arabes unis, Algérie, Nigeria, Équateur et Angola.

L'objectif du travail présenté ici est de comprendre les mécanismes qui contrôlent la température du fluide, et le dépôt de coke qui en résulte, et d'élaborer une stratégie de couplage pour les prédire. Cet objectif passe par la compréhension des transferts d'énergie de la flamme vers les tubes dans un four de raffinerie. La discussion porte sur la manière de modéliser ces transferts et leur interaction. L'originalité de ce travail est de proposer une démarche pratique pour la prédiction de ces trois phénomènes.

Cette démarche se fait en trois étapes. En prévision du couplage, il convient d'abord d'évaluer la contribution de chaque mode de transfert d'énergie entre la flamme et les tubes. Un premier objectif est d'accéder à la température de surface des tubes et à la répartition des flux dans le four. Ces deux informations sont essentielles pour l'optimisation des transferts et la compréhension du phénomène de dépôt.

Le deuxième objectif est d'accéder à la connaissance des paramètres d'influence de l'encrassement. Les lois de description du phénomène physico-chimique s'affranchiront de la complexité chimique des mélanges encrassant en se basant sur des données aisément accessibles dans les systèmes pratiques (débit, températures de parois, température de la charge...). Le couplage thermique entre la température de paroi des tubes et l'encrassement doit également être étudié.

La troisième étape, objectif final, est de prédire l'encrassement dans un four de raffinerie, en combinant les outils de calcul couplés et de cokage et en les appliquant à l'ensemble de l'installation. L'accession à des informations telles que les points chauds provoqués par un amas de coke ou la répartition des flux sur les surfaces permet de comprendre et d'évaluer le couplage thermique et l'encrassement dans un four de raffinerie.

## VI Organisation du manuscrit

Ce manuscrit de Thèse s'articule autour de deux parties organisées de la façon suivante :

Une première partie (Part. I) s'intéresse aux mécanismes fondamentaux intervenant dans les phénomènes de dépôt. Elle présente les concepts et définitions touchant les trois grands domaines d'études abordés : formation de dépôt, combustion et transferts thermiques (conduction, convection et rayonnement).

Le chapitre 1 expose une synthèse de la littérature sur les phénomènes de dépôt rencontrés dans l'industrie des procédés. Une description plus détaillée du phénomène d'encrassement dans les fours et de sa dépendance à la température et à la vitesse du fluide traité est ensuite proposée. Cette analyse amène à l'exposition des principaux modèles développés dans la littérature. Enfin, une section est dédiée aux techniques utilisées pour mesurer ce dépôt dans des conditions de laboratoire ou sur site.

Dans le chapitre 2, les concepts utilisés pour décrire la combustion dans un four sont passés en revue. Une approche originale pour la modélisation de la flamme par un modèle analytique est présentée.

Le chapitre 3 décrit les transferts de chaleur dans le four. L'analyse des trois modes de transfert de chaleur (conduction, convection, rayonnement) est exposée. Les différents modèles utilisés sont exposés.

Le couplage thermique-dépôt fait l'objet de la seconde partie (Part. II). Ce couplage est scindé en deux problèmes :

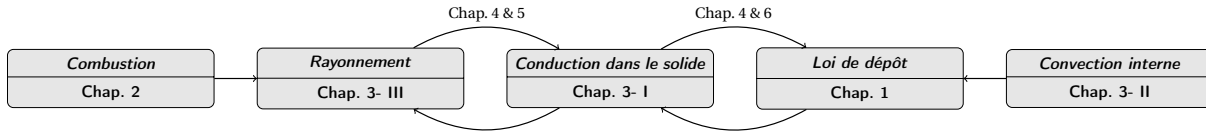


FIGURE 9: Méthodologie globale pour la résolution du problème de dépôt dans les fours (Chap. 7)

- Comment coupler la thermique des tubes au rayonnement de la flamme (Chap. 5) ?,
- Comment lier la production de dépôt à la température interne des tubes (Chap. 6) ?.

Le chapitre 5 valide la méthode de couplage thermique, sans dépôt, dans le four *Feyzin*. Le code radiatif et le code conductif sont couplés et comparent les résultats obtenus avec des données du four en marche. Dans le chapitre 6, deux stratégies d'extraction des données brutes pour construire un modèle chimique de dépôt sont présentées.

Enfin, l'étude complète du dépôt dans un four en marche est réalisée par le couplage des trois phénomènes (rayonnement, conduction et dépôt). Cette étude correspond à l'objectif de la thèse (Chap. 7). Une comparaison, entre la simulation couplée et les données, conduit à valider la méthode et permet de dresser des perspectives pour le développement de modèles physiques et numériques plus précis et rapides.

La figure 9 synthétise la méthodologie employée et les chapitres dans lesquels chaque phénomène est décrit.

## **Première partie**

# **Mécanismes physiques à l'origine du phénomène de dépôt**



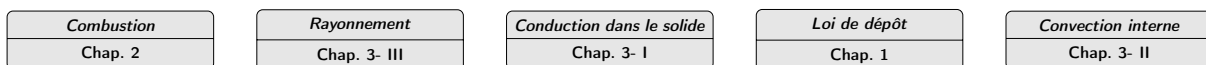


FIGURE 10: *Phénomènes intervenant dans le problème de dépôt*

Le problème d'encrassement est complexe et nécessite la description des phénomènes interagissants dans le four. Avant d'aborder leur éventuel couplage, cette partie décrit chaque phénomène indépendamment. Le schéma suivant (Fig. 10) fait le bilan de ces phénomènes.

Le premier chapitre (Chap. 1) dresse une bibliographie sur la formation de dépôt dans les fours de raffineries. L'origine de ce dépôt et son impact sur les installations industrielles permettent d'identifier les paramètres majeurs d'influence. Les différents types d'encrassement ont amené le développement de nombreux modèles et il ressort de cette étude bibliographique que le phénomène de dépôt est piloté en premier lieu par la thermique dans le tube.

Les transferts d'énergie thermique sont à l'origine d'une inhomogénéité de température induite par la production de gaz chauds par la combustion. La taille de l'installation conduit à élaborer un modèle de combustion permettant de capter les transferts d'énergie induits de manière efficace. L'approche utilisée est présentée au Chapitre 2. La discussion suivante, dans le Chap. 3, porte sur les transferts de chaleur induits par la flamme : la conduction, la convection et le rayonnement.

Nous disposerons donc, à la fin de cette partie, de toutes les descriptions nécessaires à la modélisation du couplage thermique entre la flamme et le dépôt de coke.





# 1

## Formation de dépôt dans les fours de raffinerie

L'accumulation de dépôt sur les surfaces de transfert de chaleur conduit à une réduction de l'efficacité du transfert d'énergie. La résolution de ce problème passe par la prévention des conditions de dépôt ou par nettoyage régulier des installations. Ces mesures imposent des pénalités financières importantes. La combinaison des coûts des opérations aux coûts de maintenance oblige les industriels à une meilleure compréhension de ce phénomène.

Il existe une grande variété de problèmes de dépôt et de type d'installations sujettes à l'encrassement. Dans ce chapitre est proposée une description du phénomène de dépôt en vue de sa modélisation. La formation de dépôts carbonés solides dans les fours de raffinerie a été moins étudiée que dans les lignes d'injection de carburant des moteurs aéronautiques. Une priorité doit lui être accordée. Des outils pour comprendre l'encrassement doivent être développés pour fournir des données quantitatives pour la validation des modèles d'encrassement.

Ce chapitre reprend les différentes sources à l'origine de ce dépôt et identifie le mécanisme intervenant dans les fours de raffinerie. Il est également montré comment cet encrassement réduit l'efficacité du four. Nous nous intéresserons dans la suite aux facteurs favorables à l'accroissement du phénomène. La température et la vitesse du fluide dans les tubes sont des paramètres importants pour la modélisation des réactions chimiques. Des modèles globaux ont été développés pour prendre en compte ces paramètres. Enfin, une section est consacrée à la mesure, pour contrôler la bonne marche des installations et éventuellement fournir les données nécessaires à l'établissement de loi de dépôt.

### I Origines du phénomène de dépôt

Le terme d'encrassement se réfère en général à tout type de dépôt de matières à la surface d'échange de chaleur. La nature du dépôt dépend fortement de la composition du fluide traité par l'échangeur. Le fluide peut être lui-même à l'origine du dépôt, par décomposition organique sous des conditions

de température et de pression favorables. Mais l'encrassement peut aussi provenir de matériaux solides ou semi-solides en suspension dans le fluide. Les matériaux les plus couramment rencontrés sont listés Tab. 1.1.

Matériaux inorganiques	Matériaux organiques
Poussières	Biologiques : bactéries, algues
Boue	Gras : huiles, cires et graisses
Oxydes de fer	Lourds : polymères, goudrons
Sels de calcium et de magnésium	Carbonés

TABLE 1.1: Exemples de matériaux rencontrés dans les fluides utilisés dans les procédés industriels

La diversité des mécanismes associés à ces matériaux implique des conditions opératoires très différentes. Cependant, tous ces mécanismes peuvent être décrits en trois étapes :

1. le transport diffusif du matériau et de ses précurseurs à travers la couche limite en proche paroi
2. l'adhérence et l'arrachement du matériau à la surface (propre ou encrassée)
3. le transport convectif de celui-ci loin de la surface

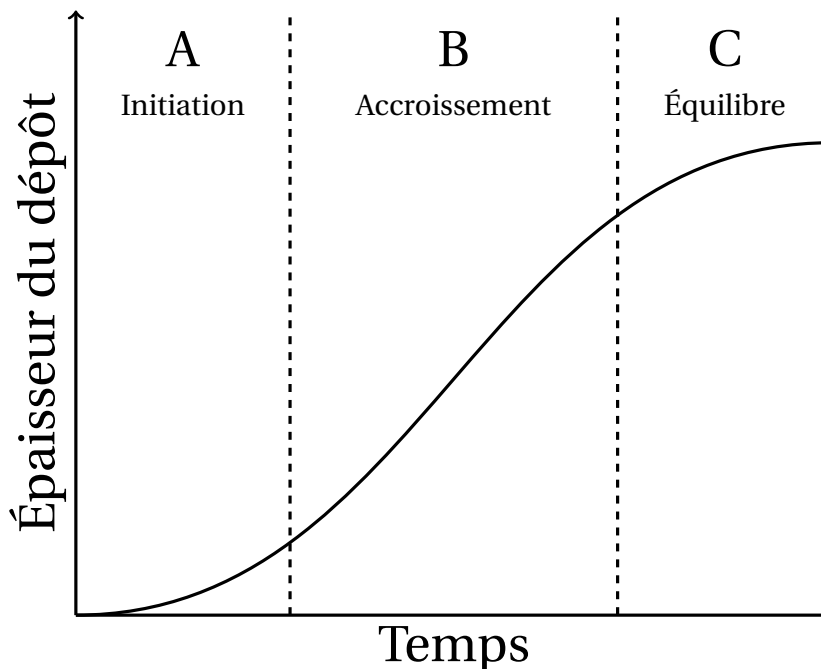


FIGURE 1.1: Les trois phases d'un mécanisme de dépôt : épaisseur du dépôt en fonction du temps

De manière idéalisée, la Fig. 1.1 permet de visualiser ces trois étapes majeures d'un mécanisme d'encrassement. La première partie (A) correspond à la phase d'initiation. Cette période dépend largement du type de dépôt et varie de quelques minutes à quelques semaines, par exemple dans les systèmes de climatisation [13]. La deuxième partie (B) correspond à l'accroissement de ce dépôt résultant d'une compétition entre le mécanisme de dépôt et l'arrachement. Le taux d'encrassement diminue graduellement tandis que l'arrachement augmente, pour finalement aboutir à un équilibre en (C) et une hauteur d'encrassement constante.

## II Types d'encrassement

Les différents types d'encrassement ont été classés par *Epstein* [12] en fonction des mécanismes suivants :

- formation d'agrégats de particules,
- cristallisation du dépôt,
- réaction chimique,
- corrosion,
- biologique.

### Encrassement particulaire

Ce type d'encrassement implique le dépôt de particules en suspension dans l'écoulement sur les surfaces de transfert. Si cet encrassement se produit par gravité, il est appelé encrassement par *sédimentation*. Il peut être défini comme une accumulation de particules dans l'échangeur de chaleur sur la surface d'échange thermique. Le plus souvent, ce type d'encrassement implique le dépôt de produits de corrosion disséminés dans les liquides, l'argile et les particules minérales dans l'eau du fleuve, les solides en suspension dans l'eau de refroidissement, les dépôts de sels dans les systèmes de dessalement, la poussière dans les conduites d'aération. De même, une combustion incomplète peut produire des particules de suie qui se déposent sur les parois extérieures des tubes des fours de raffineries.

L'encrassement particulaire est influencé par les facteurs suivants :

- la concentration de particules en suspension,
- la vitesse de l'écoulement fluide,
- les conditions de température sur la surface encrassée,
- le flux de chaleur à la surface d'échange (thermophorèse).

### Cristallisation ou précipitation

La cristallisation est un processus de formation de cristaux solides obtenus par précipitation de sels dissous dans une solution.

La solution salée peut, en raison des changements de solubilité avec la température, devenir saturée en sels et conduire à une cristallisation. Cet encrassement se produit généralement avec des solutions aqueuses et d'autres liquides contenant des sels. Les huiles brutes traitées dans les raffineries nécessitent donc d'être purifiées. Ce dessalement est nécessaire pour l'obtention des produits raffinés et évite l'encrassement sévère par précipitation.

### Encrassement par réactions chimiques

Ce type d'encrassement est important pour les fluides organiques tels que les huiles brutes [14].

Un encrassement d'origine chimique implique que la formation de dépôts sur la surface se fait par réactions chimiques non hétérogènes. Ces réactions se distinguent alors des mécanismes de corrosion où la réaction est hétérogène et implique le matériau solide pour produire du dépôt.

Toutefois, la surface d'échange de chaleur peut agir comme un catalyseur. C'est le cas pour la cokéfaction, la polymérisation et l'autooxydation.

L'instabilité thermique de certaines espèces chimiques, telles que les asphaltènes et les protéines, peut aussi induire des précurseurs à l'encrassement. Les réactions chimiques d'encrassement résultent de réactions du fluide adjacent à la paroi du tube chauffé dont les produits peuvent se déposer. Pour de nombreux fluides, le processus chimique d'encrassement de réaction est affecté par la température de surface du tube et la vitesse du fluide et se produit sur une large plage de température. Les conditions les plus sévères correspondent néanmoins à des températures élevées.

Fréquemment, des salissures ou des précurseurs sont générés dans l'équipement en amont de l'échangeur de chaleur [16] et viennent ensuite former le dépôt par réaction sur les parois. Du fait de la diversité des hydrocarbures et des plages de température rencontrées dans les industries des procédés, il est difficile de détailler tous les mécanismes chimiques par lesquels les dépôts sont formés. Cependant, un mécanisme général peut être identifié (Fig. 1.2).

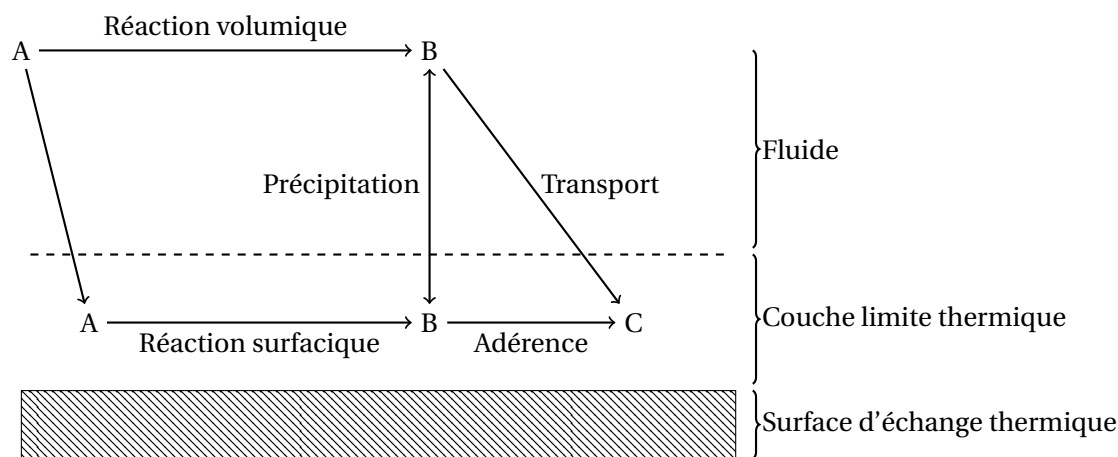


FIGURE 1.2: Mécanisme général de l'encrassement chimique [13] - A : Réactif, B : Précurseur soluble, C : Dépôt insoluble

Deux mécanismes chimiques y sont présentés. Des réactions volumiques transforment un réactif (A) en un réactif (B) dans l'écoulement le fluide. Des réactions surfaciques peuvent avoir lieu entre (A) et la surface. Deux phénomènes physiques amènent les différentes espèces (A) et (B) à la surface par leur transport et par précipitation. Enfin, l'adhésion permet le développement d'une couche de coke sur la surface.

## Corrosion

L'encrassement par corrosion implique une réaction chimique ou électrochimique entre la surface d'échange et l'écoulement fluide pour former des produits de corrosion qui, à leur tour, modifient les caractéristiques thermiques de surface et viennent l'encrasser. La corrosion peut provoquer deux types d'encrassement : soit, les produits de corrosion peuvent adhérer à la surface et s'accumuler dès leur formation, soit ils sont transportés sous forme de particules et se déposent sur la surface lors de ce transport.

### Mécanisme biologique

L'encrassement biologique résulte de la fixation et de la croissance de macroorganismes et de microorganismes sur la surface d'échange thermique formant un biofilm souvent inégal, filamenteux, et déformable, mais difficile à enlever [13]. Ce type d'encrassement est plus répandu dans les écoulements d'eau, mais les nouvelles techniques de production de pétrole à partir d'algues sont également concernées.

### Solidification ou congélation

Certains fluides composés essentiellement de paraffines peuvent par contact avec des surfaces froides former une épaisse couche de cire. Les principaux facteurs d'encrassement par solidification sont le débit du fluide à des conditions de température et de pression permettant la solidification du mélange.

## III Conséquence thermique du dépôt

L'accumulation de dépôts sur les surfaces d'un échangeur de chaleur augmente la résistance au flux de chaleur. Le profil de température dans une condition « propre » sans dépôt (indice  $p$ ) est montré- Fig. 1.3-(a) et dans une condition « encrassée » (indice  $e$ ) Fig. 1.3-(b). Dans une raffinerie, la température de sortie du brut ( $T_5$ ) est imposée.

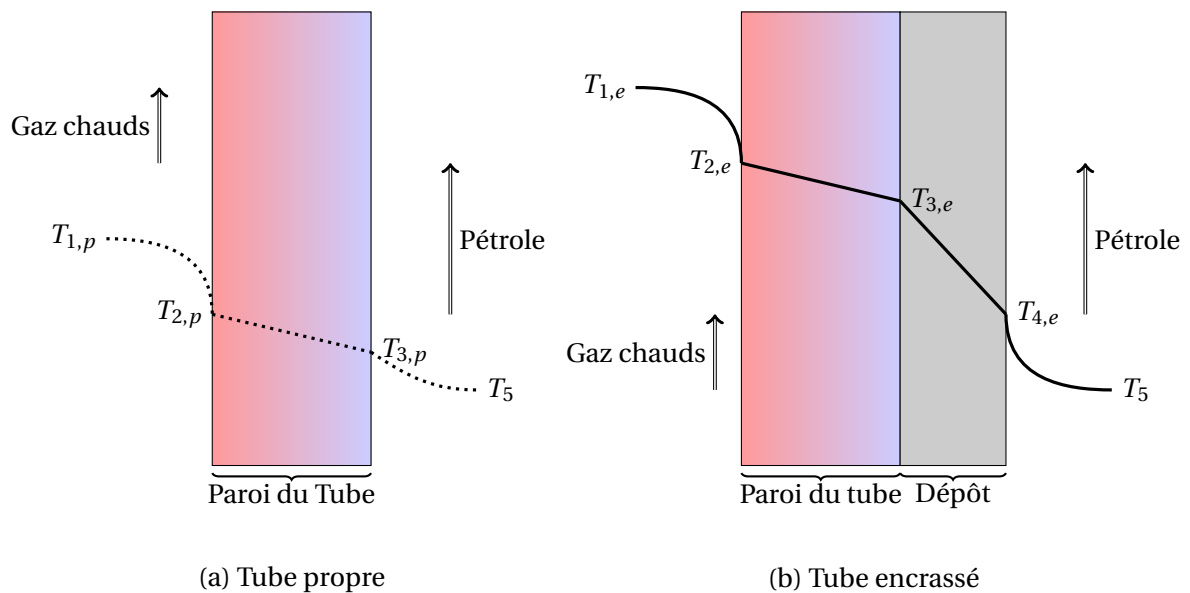


FIGURE 1.3: Profil de température à travers la paroi d'un tube propre (a) et d'un tube encrassé (b) dans un four

$T_1$  et  $T_5$  représentent les températures de gaz chauds (issue de la combustion) et du pétrole brut loin de la couche limite thermique. Dans les zones proche paroi, le fluide est ralenti et donc l'échange de chaleur est réduit. D'autre part, la conductivité thermique du dépôt est faible par rapport à celle des métaux. Pour ces raisons, l'échange de chaleur à travers le dépôt nécessite d'importantes différences

de température entre  $T_1$  et  $T_5$ . La résistance thermique du dépôt est directement liée à son épaisseur. La relation entre la variation d'épaisseur de coke  $de_{\text{coke}}$ , la masse de coke déposé  $dm$  ainsi que la variation de résistance thermique induite par ce dépôt  $dR_{\text{coke}}$  en ( $K \cdot m^2/W$ ) est :

$$dR_{\text{coke}} = \frac{dm}{\lambda_{\text{coke}} \rho_{\text{coke}}} = \frac{de_{\text{coke}}}{\lambda_{\text{coke}}} \quad (1.1)$$

avec  $\lambda_{\text{coke}}$  la conductivité du dépôt exprimée en ( $W/m \cdot K$ ) et  $\rho_{\text{coke}}$  sa masse volumique exprimée en ( $kg/m^3$ ).

Pour une épaisseur  $e$  fixée et pour une conductivité thermique  $\lambda$  constante, la résistance thermique  $R$  est définie pour le tube et le coke :

$$R_{\text{tube}} = \frac{e_{\text{tube}}}{\lambda_{\text{tube}}}, R_{\text{coke}} = \frac{e_{\text{coke}}}{\lambda_{\text{coke}}} \quad (1.2)$$

Le rapport de ces deux résistances donne :

$$r = \frac{R_{\text{coke}}}{R_{\text{tube}}} = \frac{e_{\text{coke}} \lambda_{\text{tube}}}{e_{\text{tube}} \lambda_{\text{coke}}} \quad (1.3)$$

La résistance totale est égale à la somme de ces deux résistances  $R = R_{\text{tube}} + R_{\text{coke}}$  et quantifie l'échauffement associés à un flux surfacique de chaleur  $\Phi$  ( $W/m^2$ ) :

$$\Phi = \frac{\Delta T}{R} = \frac{T_5 - T_1}{R} \quad (1.4)$$

Si la puissance thermique transmise au tube est constante, le rapport  $\Delta T/R$  l'est également et on a :

$$\Phi = \frac{\Delta T_p}{R_p} = \frac{\Delta T_e}{R_e} \quad (1.5)$$

où  $R_p = R_{\text{tube}}$ ,  $R_e = R_{\text{tube}} + R_{\text{coke}}$ ,  $\Delta T_p = (T_5 - T_{1,p})$  et  $\Delta T_e = (T_5 - T_{1,e})$ .

Le rapport des différences de température s'obtient par association des relations Eq. (1.5) et Eq. (1.3) :

$$\frac{\Delta T_e}{\Delta T_p} = \frac{R_e}{R_p} = \frac{R_p + R_{\text{coke}}}{R_p} = 1 + \frac{R_{\text{coke}}}{R_p} = 1 + r \quad (1.6)$$

Pour estimer l'impact de la résistance du coke sur la température du tube, on estime  $\Delta T$  dans le cas où l'épaisseur de la paroi du tube est égale à celle du coke. Le rapport des résistances se réduit à :

$$r = \frac{e_{\text{tube}}}{e_{\text{coke}}} \cdot \frac{\lambda_{\text{tube}}}{\lambda_{\text{coke}}} \quad (1.7)$$

ce qui conduit à :

$$\frac{\Delta T_e}{\Delta T_p} \approx 1 + \frac{\lambda_{\text{tube}}}{\lambda_{\text{coke}}} \quad (1.8)$$

La valeur typique de la conductivité thermique pour un tube en acier est de  $\lambda_{\text{tube}} \sim 25 W/m \cdot K$  et pour le dépôt de  $\lambda_{\text{coke}} \sim 0,5 W/m \cdot K$  ce qui donne un rapport de température égale à 51. L'écart de température est donc plus important en présence de coke pour une même puissance imposée, ce qui veut dire que pour une même température  $T_5$  du brut, la température  $T_1$  doit augmenter en présence de coke.

## IV Paramètres d'influence majeurs

Le dépôt est un encrassement par réaction chimique. Nous nous intéressons en particulier ici à ces quatre paramètres d'influence : la température de la surface du tube, la vitesse d'écoulement fluide dans le tube, la température et les propriétés physico-chimiques du fluide encrassant.

### 1. Température de surface et température de film

Le taux de dépôt augmente exponentiellement avec l'augmentation de la température de surface pour les mécanismes chimiques d'encrassement [16, 17]. L'effet de la température de surface agit sur le taux d'encrassement selon une loi de type *Arrhénius* :

$$\frac{de_{\text{coke}}}{dt} = A \exp\left(-\frac{Ea}{RT}\right) \quad (1.9)$$

L'énergie d'activation  $Ea$  (kJ/mol) et le facteur de pré-exponentiel  $A$  ( $\text{K}\cdot\text{m}^2/\text{W}\cdot\text{s}$ ) sont déterminés à partir des données expérimentales. Selon les modèles, la température peut être la température de surface, la température du fluide ou une température de film qui est une combinaison linéaire des deux précédentes [1, 16]. Si la réaction chimique se produit dans la couche limite thermique, on utilisera la température de film, alors que la température de surface sera utilisée pour une réaction chimique localisée à la surface d'échange.

### 2. Température du fluide

L'effet de la température du fluide sur la formation de dépôt a donné lieu à plusieurs études qui ont abouti à des conclusions contradictoires [16, 18, 19].

Certains ont observé que le taux d'encrassement s'accroît avec une diminution de la température du fluide [18], et l'expliquent par le fait qu'à vitesse et température de surface constantes, l'augmentation du transfert thermique conduit à une augmentation de l'encrassement. D'autres observent, au contraire, une augmentation du taux d'encrassement avec la température du fluide [16, 19].

En réalité, l'effet de la température du fluide est fortement corrélé au nombre de *Reynolds*. Une élévation de température diminue la viscosité du fluide, augmente le nombre de *Reynolds* [18], diminuant l'épaisseur de la couche limite dynamique et thermique. Si la réaction de dépôt se produit dans cette couche limite, la diminution du volume dans laquelle se déroule la réaction conduit à réduire la quantité de produits encrassant.

Une seconde explication avancée concerne les asphaltènes très présents dans les bruts. Ce sont de grandes structures complexes qui sont à l'origine de certaines réactions d'encrassement et peuvent, au-dessus d'une certaine concentration, devenir insolubles. Une compétition entre deux mécanismes se déroule alors : généralement, la solubilité des asphaltènes dans les pétroles bruts augmente avec la température [20] et conduit donc à une diminution de la concentration d'asphaltène solide encrassant la paroi quand la température augmente. De manière antagoniste, une augmentation du transfert thermique favorise la production des précurseurs à l'asphaltène et donc augmente la possibilité du dépôt en surface.

### 3. Vitesse d'écoulement

Un paramètre de contrôle de l'encrassement chimique est la vitesse de l'écoulement du fluide dans le tube. L'effet de la vitesse est doublement fort sur l'encrassement chimique [13]. Le premier effet est de jouer sur les transferts de masse et de chaleur. Le second est d'intervenir sur l'arrachement.

Les précurseurs responsables de la formation de dépôt à la surface d'échange sont soit en suspension soit dissous dans le fluide et ils sont transportés de ce fluide vers les parois par diffusion. Le moteur de ce transport est la différence de concentration des précurseurs dans le fluide et proches de la surface.

Au fur et à mesure que la couche de dépôt commence à se former sur la surface d'échange, la contrainte de cisaillement à la paroi, proportionnelle à la vitesse du fluide, peut donner lieu à un arrachement de la couche encrassée et compense ainsi le processus d'encrassement [21].

Ainsi, la vitesse a deux effets contradictoires sur le mécanisme de dépôt. Pour une température de fluide donnée, l'augmentation de la vitesse augmente le transfert thermique et donc réduit la température du mur et de film. Ceci a pour conséquence la diminution du dépôt en paroi [18]. D'un autre côté, si le mécanisme est contrôlé par le transfert de masse du fluide vers les parois, alors la vitesse de dépôt augmente avec la vitesse du fluide. Il faut ajouter à cela l'effet de la turbulence qui accroît ces transferts de masse et de chaleur.

### 4. Propriétés du fluide

Le pétrole brut est un mélange d'un grand nombre d'hydrocarbures. Les huiles lourdes contiennent généralement des proportions beaucoup plus élevées en asphaltènes et en soufre et ont tendance à encrasser à un rythme plus rapide. Un autre facteur important qui influence l'encrassement est le mélange de plusieurs bruts, qui peut être instable [22].

Pour cette raison, la compatibilité des pétroles bruts est testée [19]. Certains mélanges sont étudiés pour atténuer l'encrassement. Une étude sur le mélange de carburants de type *Jet* a également été réalisée et montre que le problème n'est pas propre aux pétroles bruts et s'étend largement aux combustibles raffinés [23].

## V Modèles d'encrassement

Les modèles mathématiques pour représenter l'encrassement sont nécessaires pour prédire le taux d'encrassement et déterminer les paramètres opérationnels. Un grand nombre de modèles semi-empiriques pour l'encrassement issus du pétrole brut sont rapportés dans la littérature [1, 22, 24]. Ces modèles ont été développés sur la base de données expérimentales obtenues sur bancs d'essai de laboratoire. Ils décrivent l'encrassement selon la notion suivante, où le taux d'encrassement net est la différence entre les taux de dépôt et d'arrachement [24] (Fig. 1.4) :

$$\frac{dm_s}{dt} = \Phi_{dep} - \Phi_{arr} \quad (1.10)$$

où  $m_s$  représente la masse de dépôt par unité de surface,  $\Phi_{dep}$  le taux de dépôt et  $\Phi_{arr}$  le taux d'arrachement.



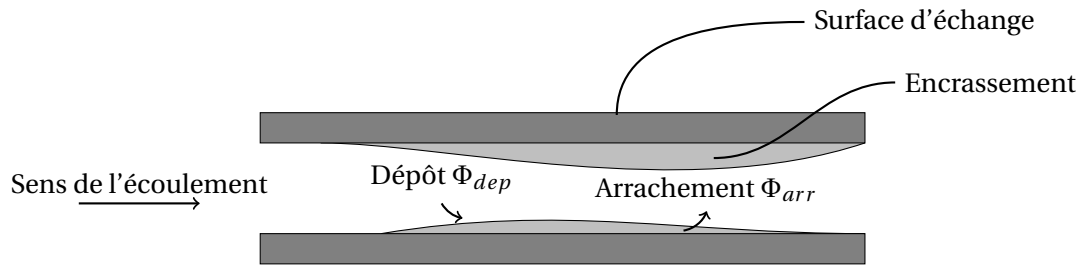


FIGURE 1.4: Mécanisme d'évaluation de l'encrassement

Les différences fondamentales entre les différents modèles rapportés dans la littérature sont dans la description du terme de dépôt et d'arrachement. Le taux de dépôt est soit décrit par un modèle de type « transport-réaction », soit par la seule expression d'un transfert de masse. En général, les modèles de type « transport-réaction » sont plus précis. En effet, l'augmentation de la résistance thermique n'est pas le seul effet imputable au dépôt de coke. En réduisant considérablement le diamètre du tube (Fig. 8), la section débitante plus restreinte provoque une perte de charge supplémentaire par augmentation de la vitesse du fluide et du nombre de *Reynolds*.

Une autre conséquence directe du dépôt de coke sur la dynamique est le changement de rugosité de surface qui conduit à une augmentation du niveau de turbulence en particulier à la paroi et améliore le transfert thermique en proche paroi.

Par ailleurs, au fur et à mesure du dépôt, du fait de la géométrie cylindrique, la surface d'échange va diminuer. Nous verrons dans la suite que cet effet est négligeable lorsque l'on compare l'épaisseur du dépôt avec le rayon des tubes.

## 1. Principes de la modélisation

Précédemment, une vue conceptuelle du processus d'encrassement a montré trois étapes (Fig. 1.1) :

- l'initiation,
- l'accroissement,
- l'équilibre.

La durée de ces trois étapes permet d'envisager trois régimes limites (Fig. 1.5). Le régime (I) représente une relation linéaire de l'épaisseur du dépôt avec le temps, c'est-à-dire un taux de développement de la couche d'encrassement constant dès le début du processus. La période d'initiation est instantanée ou très courte. Cette courbe est caractéristique de produits à fort pouvoir encrassant. Le régime (II), représente une baisse du taux de dépôt une fois que l'initiation a eu lieu, mais sans atteindre l'équilibre. Enfin, le régime (III) contient les trois phases précitées (A), (B) et (C) de la Fig. 1.2.

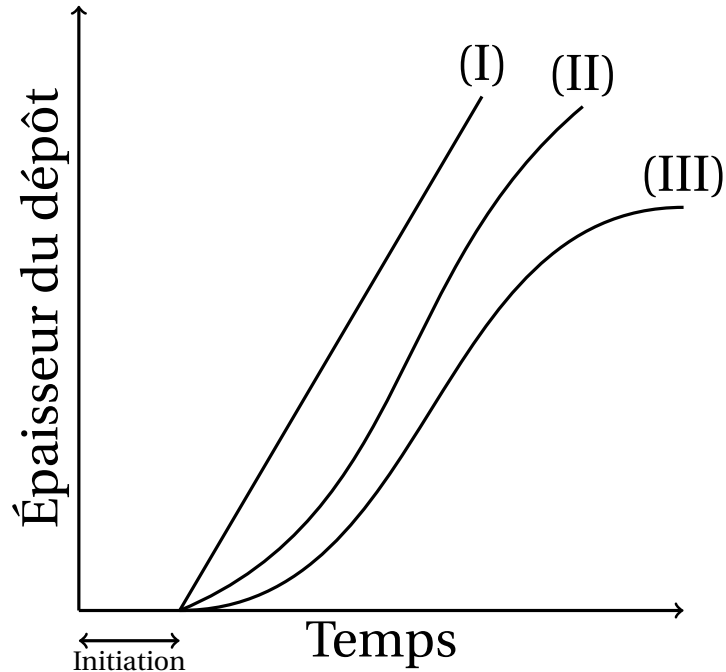


FIGURE 1.5: Courbes schématiques de l'évolution de l'épaisseur du dépôt en fonction du temps pour les trois régimes d'encrassement

Les trois régimes présentent une période d'initiation, mais dans certains encrassements, comme lors du dépôt d'une couche de cire à partir d'hydrocarbures, ce délai peut être très court si bien qu'elle est négligeable.

Il est souvent très difficile, voire impossible de prévoir la période d'initiation, même avec l'expérience. En effet, il s'agirait de connaître avec certitude et *a minima* l'état de surface des tubes, la composition ainsi que l'état du fluide à traiter. Compte tenu de la variabilité des bruts traités dans l'industrie pétrolière et de l'impossibilité de mesurer l'état de surface des tubes, la plupart des modèles mathématiques mis au point préfèrent ignorer ce délai d'initiation [13]. L'encrassement commence dès que les flux de chaleur sont importants. L'erreur associée est faible. Une période d'initiation de l'encrassement est courte est synonymes de problèmes intenses [25, 26].

## 2. Modèle simple général

Le modèle le plus simple correspond au régime (I) (Fig. 1.5). Il s'écrit sous la forme :

$$R_{\text{coke}} = \frac{dR_{\text{coke}}}{dt} (t - t_{\text{init}}) \quad (1.11)$$

où  $R_{\text{coke}}$  représente la résistance thermique du coke et  $t_{\text{init}}$  la période d'initiation du phénomène.

Ce modèle, malgré sa simplicité, nécessite de déterminer le taux de croissance et est lié à la densité et à la conductivité du dépôt (cf. Eq. (1.1)), jamais connu à l'avance et pouvant varier au cours du temps.

De plus, l'encrassement n'a que peu de chance d'être linéaire au cours de l'expérience compte tenu de la variation de la température et de l'écoulement du fluide.

Malgré ces difficultés, ce modèle simple permet après calibration dans le cas où les changements de régime d'écoulement ne sont pas importants, de bien décrire l'encrassement [19, 27].

### 3. Modèle asymptotique

Le modèle asymptotique a été élaboré de la manière suivante pour représenter le plateau du régime (III) [24] :

$$R_{\text{coke}} = R_{\text{coke},\infty}(1 - e^{-\beta t}) \quad (1.12)$$

où  $R_{\text{coke},\infty}$  est la résistance limite et  $\beta$  une constante liée aux propriétés du système. La détermination de ces deux constantes pose les mêmes problèmes que pour le modèle précédent.

### 4. Modèle de *Ebert et Panchal* [1]

Ce modèle s'écrit :

$$\frac{dR_{\text{coke}}}{dt} = \alpha(Re)^\beta \exp\left(-\frac{Ea}{RT_f}\right) - \gamma\tau \quad (1.13)$$

où  $Re$  est le nombre de *Reynolds*,  $T_f$  la température dans la couche limite,  $\tau$  le taux d'arrachement pariétal et  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $Ea$  et  $\gamma$  sont des paramètres mesurés expérimentalement (Tab. 1.2). Le premier terme de droite dans Eq. (1.13) représente la formation de dépôt par réaction chimique avec une dépendance thermique en  $T_f$ . Le second terme représente l'arrachement qui dépend de la contrainte de cisaillement  $\tau$  à la paroi. La dépendance du modèle à la vitesse est double. L'augmentation de la turbulence conduit directement à l'augmentation du taux de dépôt et par l'intermédiaire du nombre de *Reynolds* qui représente l'augmentation des transferts de masse et de chaleur par la turbulence. En même temps, l'augmentation de la vitesse augmente les frottements pariétaux et donc le taux d'arrachement.

Cette relation empirique de *Ebert et Panchal* introduit la notion de condition seuil du taux d'encrassement pour les huiles brutes (« Threshold fouling model »). Lorsque le taux d'arrachement est plus fort que le taux de dépôt, le terme de droite de l'Eq. (1.13) est négatif et aucun dépôt n'est possible. Cette notion de seuil correspond à une égalité entre le dépôt et l'arrachement. L'Eq. (1.13) permet de définir la température seuil d'encrassement en fonction du cisaillement  $\tau$  pour une valeur donnée du *Reynolds*. Cette température est tracée Fig. 1.6 et correspond à l'équilibre déjà évoqué précédemment.

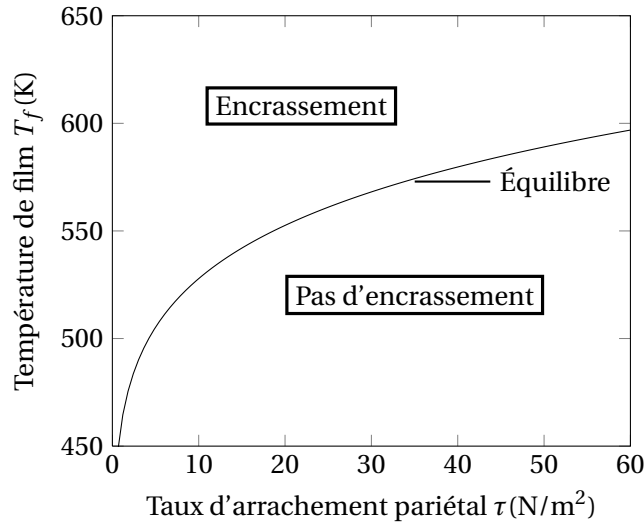


FIGURE 1.6: Température seuil d'encrassement obtenue par Ebert & Panchal [1] en fonction du taux d'arrachement,  $Re = 12000$

$\alpha$	$\beta$	$E$	$\gamma$
(Km <sup>2</sup> /kW)	-	(kJ/mol)	(m <sup>2</sup> /N · (Km <sup>2</sup> /kW)/hr)
$30,2 \cdot 10^6$	-0,88	68	$1,45 \cdot 10^{-4}$

TABLE 1.2: Paramètres de la loi d'encrassement de Ebert & Panchal [1]

Dans ce modèle, l'encrassement est donc contrôlé par la température de film ou de paroi des tubes. Pour éviter l'encrassement cette température doit rester en dessous de la valeur seuil. Cette approche est largement utilisée dans les systèmes industriels.

## 5. Modèles globaux

De nombreux autres modèles ont été développés sur la base du modèle de *Ebert & Panchal*. Les raisons de ce succès sont les suivantes [28] :

- les constantes peuvent être facilement obtenues par des études sur unité pilote ou bien sur des données réelles,
- ce modèle est un outil simple de design des unités et permet de minimiser les dépôts [13, 22],
- la notion de seuil fournit un outil d'analyse simple,
- ce modèle permet de comparer, de manière simple, différents bruts en terme d'encrassement.

L'amélioration du modèle de *Ebert & Panchal* passe par le choix optimal des constantes du modèle. Différents auteurs donnent différentes corrélations pour le terme de dépôt  $\Phi_{dep}$ . Ce terme dépend toujours de  $Re$  et parfois du nombre de  $Pr$  lorsque les auteurs estiment que le dépôt et ses précurseurs se forment dans la couche limite thermique [29]. De plus, les données expérimentales sont relevées à différents endroits : à la paroi ( $T_s$ ) [1], dans la couche limite dynamique et thermique ( $T_f$ ) [19, 22, 29, 30]. Des différences plus mineures sont également observées selon les auteurs pour le terme d'arrachement  $\Phi_{arr}$ , qui dépend soit du cisaillement pariétal  $\tau$  [1, 31], soit du nombre  $Re$  [1, 30]. Les différents modèles sont résumés dans Tab. 1.3 [16].

<i>Epstein &amp; Watkinson</i> [27]	$\frac{dR}{dt} = \frac{a}{u^n} \exp\left(-\frac{Ea}{RT_s}\right)$
<i>Epstein</i> [12]	$\frac{dR}{dt} = \frac{C_b}{\left[\frac{a}{u} + bu^2 \exp\left(-\frac{Ea}{RT_s}\right)\right]}$
<i>Ebert &amp; Panchal</i> [1]	$\frac{dR}{dt} = \frac{a}{Re^n} \exp\left(-\frac{Ea}{RT_f}\right) - bu^2$
<i>Yeap</i> [29]	$\frac{dR}{dt} = \frac{a}{\left[\frac{a}{u} T_s^{2/3} + bu^2 \exp\left(-\frac{Ea}{RT_s}\right)\right]} - cu^{0.8}$

TABLE 1.3: Modèles globaux [16]

## VI Mesure de l'encrassement

Les mesures les plus répandues sont [13, 32] :

- la pesée directe du dépôt formé,
- la mesure de l'épaisseur,
- la mesure du flux de chaleur transféré,
- la mesure de la chute de pression.

### Pesée directe

Cette méthode est la plus simple pour évaluer l'importance du dépôt sur les surfaces d'essai en laboratoire. Après avoir asséché le dépôt pour n'obtenir que la partie solide, celui-ci est gratté puis pesé. La méthode exige une balance précise pour pouvoir évaluer des changements relativement petits dans la masse du dépôt.

### Mesure de l'épaisseur

La mesure de l'épaisseur exige l'accès à l'intérieur des tubes. Cet accès n'est généralement pas mis en place dans les fours industriels, les tubes sont eux-même peu accessibles.

### Mesure du flux de chaleur

La résistance thermique d'encrassement peut être déterminée à partir des transferts de chaleur au cours du processus de dépôt. Les données sont rapportées en termes de changement du coefficient de transfert thermique global d'une installation [19]. Une hypothèse majeure relative à cette méthode et que la présence du dépôt n'affecte pas l'hydrodynamique de l'écoulement, ce qui est généralement faux, mais peut être corrigé par des corrélations. La connaissance et la prise en compte de l'état de surface sont également importantes.

### Chute de pression

Alternativement à des mesures indirectes de transfert de chaleur, il est possible d'utiliser l'évolution des pertes de charge provoquées par la présence du dépôt. En effet, les pertes de charge augmentent

avec la réduction de la section débitante pour un débit imposé. Cette méthode est souvent combinée avec la mesure directe de l'épaisseur de la couche de dépôt. Les changements dans le coefficient de frottement peuvent également être utilisés comme un indicateur de l'encrassement dans les conditions réelles.

## VII Conclusion

Les origines du dépôt dans l'industrie pétrolière sont nombreuses. Les conséquences sur l'écoulement en terme d'échange thermique et de perte de charge pénalisent économiquement les installations. Cinq mécanismes d'encrassement ont été présentés. Dans le cas du pétrole brut, un composé organique complexe, la dégradation thermique est pilotée en grande partie par la chimie. Le dépôt dans les fours de raffineries est contrôlé, en premier lieu, par la température de la paroi ou du fluide et par la vitesse de l'écoulement. Des modèles simples de prédiction du dépôt ont été proposés ces dernières années. Ces modèles, basés sur des données expérimentales, font intervenir les propriétés de l'écoulement en ignorant la composition des pétroles considérés.

Dans cette étude bibliographique, il ressort que l'encrassement dans l'industrie des procédés est avant tout le résultat de réaction chimique. Celui-ci est fortement dépendant de la température de la paroi et du film. L'augmentation de ces températures conduit à des encrassements de plus en plus importants. Un second paramètre de contrôle est la vitesse de l'écoulement. Celui-ci peut favoriser le développement d'une couche de dépôt en augmentant les transferts de masse à la paroi ou, de manière antagoniste, en augmentant le taux d'arrachement sur la surface d'échange.

Le problème de dépôt est abordé dans cette thèse d'un point de vue thermique. Dans la suite, nous décrirons tous les phénomènes d'échange thermique dans le four qui conduisent à cet encrassement. Nous verrons également comment modéliser une loi de dépôt pour la prédiction de ce phénomène.

# 2

## Combustion

La combustion turbulente non prémélangée repose sur des phénomènes physiques complexes et fortement couplés : diffusion moléculaire de la chaleur et des espèces, mouvements turbulents, thermodynamique et procédés chimiques qui nécessitent un grand nombre d'espèces et de réactions élémentaires, interagissent et contrôlent le dégagement de chaleur.

La première difficulté pour étudier la combustion dans les fours est la définition du combustible dont la composition est imparfaitement connue et varie. Une première étape est donc de définir un combustible « modèle » représentatif du cas étudié (*Feyzin*).

La modélisation de la structure des flammes turbulentes est une tâche complexe dont la résolution numérique n'est pas aisée. Si des méthodes de résolution des équations de *Navier-Stokes* de type LES existent, leur application à des installations de la taille des fours de raffinerie est encore hors de portée à la vue du coût de calcul qu'elles impliquent.

Partant du constat que le problème de dépôt qui nous intéresse dans ce travail est essentiellement contrôlé par les échanges thermiques des gaz chauds avec les tubes et les parois, nous ne cherchons pas à décrire finement le front de flamme, mais seulement la distribution spatiale des gaz rayonnants. Pour cela, une approche originale est proposée, basée sur un modèle de flamme de diffusion analytique. Cette description repose sur un découplage formel entre le processus de mélange d'une part et la structure locale de la flamme dans l'espace du mélange d'autre part, le lien entre les deux physiques étant la dissipation scalaire. Ce modèle est présenté dans la Section II.

### I Définition des combustibles gazeux brûlés dans les fours

Le combustible utilisé dans les fours est un mélange d'espèces (indice  $k$ ), chacune étant caractérisée par :

- sa densité  $\rho_k$  ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )

- sa capacité thermique  $Cp_k$  (J/kg·K), qui caractérise sa capacité à emmagasiner la chaleur,
- sa masse molaire  $M_k$  (kg/mole).

Dans l'industrie des procédés, le combustible utilisé dans les brûleurs est un mélange issu du procédé lui-même. Si les produits combustibles raffinés ont des compositions imposées par les motoristes (Jet Fuel, diesel, essences...), la composition des combustibles brûlés dans les fours varie souvent. Le tableau 2.1 détaille la composition du mélange appelé *TOTAL* dans le four de distillation sous vide (DSV) de *Feyzin* tel qu'il est fourni par *TOTAL*. En plus des espèces oxygène, hydrogène et azote, ce mélange contient des chaînes carbonées de longueur  $C_1$  à  $C_4$ , pour lesquelles les fractions molaires sont connues.

Afin de modéliser la combustion de ce combustible, les chaînes carbonées de quatre atomes de carbone ou plus ont été enlevées. Dans les mesures, elles représentent 3,1% du volume du mélange, nous considérons que l'erreur induite restera faible. Les espèces oxydantes, inertes ont été conservées dans les mêmes proportions. Alors que les espèces enlevées du mélange ont été distribuées équitablement aux espèces combustibles restantes. La proportion de chaque espèce combustible a donc été légèrement augmentée du fait de ce report. Ce nouveau mélange est appelé *TOTAL-TP1*.

Mélange	TOTAL	TOTAL-TP1
$O_2$	0,1	0,1
$N_2$	6,65	6,65
$H_2$	28,6	29,24
$CH_4$	46,3	47,34
$CO$	0,1	0,1
$CO_2$	0,2	0,2
$C_2H_4$	6,3	6,44
$C_2H_6$	6,7	6,85
$C_3H_8$	1,7	1,74
$C_3H_7$	1,3	1,33
Mélange de $C_5+$	0,70	–
$IC_4H_{10}$ (iso-butane)	1	–
$NC_4H_{10}$ (butane)	1,10	–
Mélange de butène $C_4$	0,30	–
Masse molaire du mélange	16,15	18,6

TABLE 2.1: Composition molaire du mélange *TOTAL* et de son mélange modèle *TOTAL-TP1*

Pour un mélange de  $N$  espèces, la densité  $\rho$  du mélange s'écrit :

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k \quad (2.1)$$

De même la capacité thermique molaire  $C_p^k$  s'écrit :

$$C_p^m = \sum_{k=1}^N C_{p,k}^m X_k \quad (2.2)$$



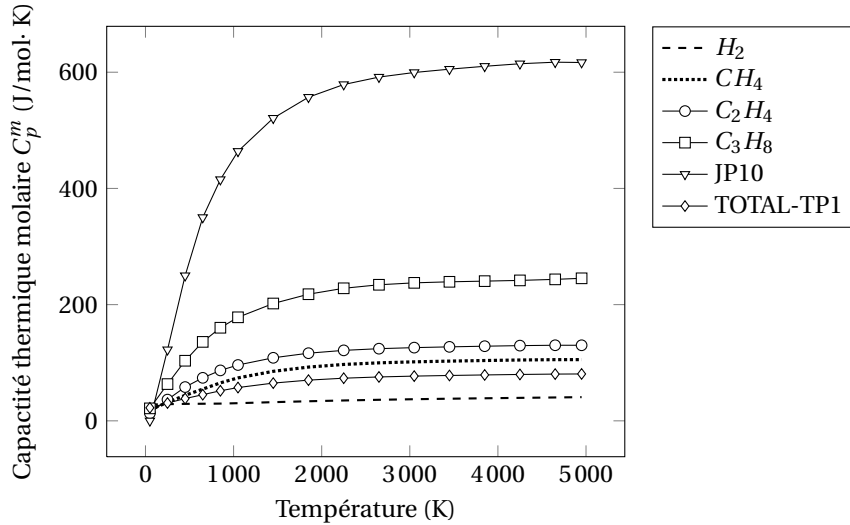


FIGURE 2.1: Évolution de la capacité thermique molaire en fonction de la température pour les espèces  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_3H_8$  comparés aux mélanges TOTAL-TP1 et JP10

où  $X_k$  et  $C_{p,k}^m$  sont respectivement les fractions molaires et la capacité thermique molaire de l'espèce  $k$ . La variation des capacités thermiques molaires des gaz purs avec la température est illustrée Fig. 2.1. Elles sont comparées à la capacité thermique du mélange TOTAL-TP1 et du carburant Jet JP10. Dans les plages de température balayées (de 300 à 2500K), les capacités thermiques varient énormément. Celle du mélange *TOTAL-TP1* se situe par construction entre celles de l'hydrogène et du méthane, espèces majoritaires du mélange.

Enfin, la masse molaire  $M$  du mélange est défini par :

$$M = \sum_{k=1}^N M_k X_k \quad (2.3)$$

Pour les combustibles, le Pouvoir Calorifique Inférieur (P.C.I.) définit l'énergie que dégage la combustion d'un kilogramme de combustible lorsque l'eau est produite à l'état gazeux. Le P.C.I. d'un mélange de gaz est une combinaison linéaire des P.C.I. des espèces le composant :

$$PCI = \sum_{k=1}^N PCI_k Y_k \quad (2.4)$$

où  $Y_k$  est la fraction massique de l'espèce  $k$ . Le tableau 2.2 donne le P.C.I. de combustible commun et de la valeur du carburant TOTAL-TP1. Le mélange TOTAL-TP1 est situé entre l'hydrogène et le méthane. Il contient par kilo plus d'énergie que le méthane avec une masse molaire proche de celle du méthane, grâce à l'hydrogène.

## II Modélisation de la combustion dans le brûleur du four

Des modèles sont construits pour prédire les propriétés des écoulements réactifs turbulents, stationnaires ou instationnaires. Ces modèles visent à résoudre les trois équations tridimensionnelles non

	$PCI^m$ (kJ/mole)	$PCI$ (kJ/kg)
$H_2$	241	120500
$CH_4$	802	50100
$C_3H_8$	2060	46600
$C_8H_{18}$	5225	45800
TOTAL-TP1	836	52300

TABLE 2.2: *Pouvoirs Calorifiques Inférieurs molaire (gauche) et massique (droite) des espèces  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $C_3H_8$ ,  $C_8H_{18}$  comparé au mélange TOTAL-TP1*

linéaires : la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. En combustion, la résolution d'autres équations vient s'ajouter telles que la conservation des espèces. Pour les résoudre, les variables turbulentes sont mathématiquement décomposées en une quantité moyenne et une quantité fluctuante.

Un premier modèle de résolution des équations de *Navier-Stokes* est resté pendant plus de trois décennies la principale technique de simulation numérique dans l'industrie. Le modèle (RANS) moyenne ces équations par l'introduction d'un filtrage. Des termes supplémentaires apparaissent et nécessitent la recherche de fermetures de la turbulence adaptées à un large éventail d'applications pratiques. L'établissement d'un modèle général de fermeture s'est révélé jusqu'ici sans succès.

Il existe deux méthodes pour moyenniser ces équations de conservation : la moyenne de *Reynolds* et moyenne *Favre* [33, 34]. La moyenne de *Favre* applicable lorsque la compressibilité est importante, se révèle plus adaptée à la résolution des écoulements réactifs. Il est clair que pour les écoulements réactifs ou les transferts de chaleur importante, les fluctuations de densité ne sont pas faibles par rapport à la densité moyenne.

Il existe quatre types de modèles de turbulence couramment utilisés en pratique comme les modèles :

- les modèles linéaires de viscosité turbulente :
  - modèle algébrique de *Baldwin*, [34–36],
  - à une équation *Spalart-Allmaras* [37],
  - à deux équations  $k-\epsilon$  et  $k-\omega$  [34],
- Modèles de fermeture au second ordre comme (RSM) [38].

La plupart des modèles qui tombent dans l'une des trois premières catégories ont une similitude sous-jacente, appelée approximation de Boussinesq. Cette approximation suppose que le tenseur de *Reynolds* est proportionnel à la moyenne du tenseur des déformations. Cette constante de proportionnalité est le tenseur de viscosité turbulente.

Les modèles algébriques ne possèdent pas de caractères généraux. Il existe un lien direct entre les fluctuations de vitesse et les gradients de vitesse moyenne. Pour cette raison, ils dépendent largement du type d'écoulement. Les modèles à une ou deux équations tentent de surmonter cette difficulté par la résolution des équations de transport et permettent de déterminer le lien entre les fluctuations de vitesse et les gradients de vitesse moyenne.

Si les méthodes (RANS) sont attrayantes, toutes les fluctuations turbulentes sont modélisées en utilisant des approximations algébriques. Ceci pose problème, car la vorticit  de l'écoulement turbulent s'étend sur une large gamme d'échelles de longueur et de temps qui peuvent exister relativement proches les unes des autres.

Une deuxième méthodologie est la simulation numérique directe (DNS) des équations de Navier-

Stokes qui résoud la gamme complète des échelles de temps et de longueur présentes dans un système particulier. Cette méthode extrêmement coûteuse n'est pas utilisée dans l'industrie.

La simulation des grandes échelles (LES) se positionne entre la (DNS) et les approches (RANS). Cette approche sépare les échelles de longueur (tourbillons) en deux groupes. Le premier groupe est constitué des grandes échelles et est simulé numériquement.

Plutôt que de moyenner, une opération de filtrage spatial des équations de *Navier-Stokes*, est réalisée pour séparer les grands tourbillons des petits. C'est une approche intermédiaire entre le (RANS) et la simulation directe, pour la résolution de la turbulence, qui permet de capturer les grands tourbillons énergétiques et modélisent les petits influencés par les forces visqueuses moléculaires. Ces petits tourbillons tendent à posséder un comportement relativement universel et permettent la création de modèles de dissipation de sous-maille [39–41]. Au contraire, les grandes structures interagissent avec l'écoulement moyen et sont généralement anisotropes du fait de la géométrie du problème. Un modèle de turbulence unique ne peut décrire l'ensemble des topologies d'écoulement rencontrées dans toutes les applications.

Néanmoins, elle est devenue un outil standard pour la résolution des écoulements turbulents réactifs dans des chambres de combustion de la taille de turbines aéronautiques où les problèmes scientifiques rencontrés nécessitent une forte description de l'instationnarité des écoulements [42–46] (instabilité thermoacoustique, interaction rayonnement-turbulence,...).

Des ressources informatiques importantes et un gros volume de stockage sont nécessaires, mais dans des proportions accessibles. Si les coûts de calcul sont raisonnables pour des systèmes de la dimension des moteurs de voiture ou d'avion, l'échelle des fours industriels rend prohibitif le calcul. Dans la littérature, les plus grandes chambres de combustion calculées sont de l'ordre du mètre [47].

Il est proposé dans ce travail de calculer la répartition des gaz chauds par une méthode analytique. La flamme turbulente est vue comme une flamme laminaire étirée, dont l'étirement et la hauteur sont des paramètres dans la présente approche (Fig. 2.3). Cette méthode ne prétend pas donner une solution de la flamme turbulente, mais seulement une description à l'ordre 0 des gaz chauds présents dans le four.

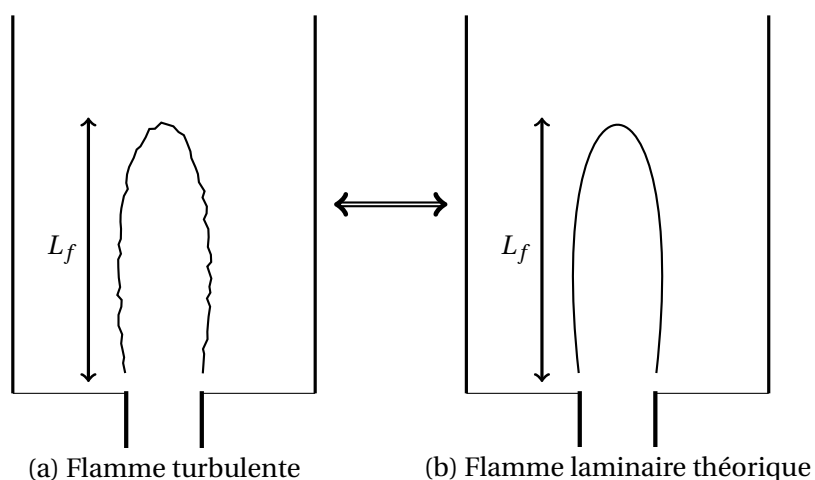


FIGURE 2.2: Modélisation de la flamme du brûleur de Feyzin

## 1. Modèle analytique

Dans le four cylindrique de l'usine de raffinage de *Feyzin* étudiée les tubes verticaux sont disposés en forme de serpentín autour d'un brûleur central. Celui-ci vient brûler le mélange TOTAL avec de l'air, assurant une combustion en continu à une relativement température élevée. Ce brûleur est utilisé dans un régime de diffusion où le carburant et l'air ne sont pas mélangés avant qu'ils ne pénètrent dans le four. L'air y est préchauffé pour accroître l'efficacité globale de la flamme.

Pour dériver le modèle, nous considérons un carburant, de fraction massique  $Y_F^0$  de densité  $\rho_F^0$  et de vitesse  $u_F^0$ , injecté parallèle à l'axe  $\mathbf{u}_x$ , et un oxydant injecté parallèlement, de fraction massique  $Y_O^0$ , de densité  $\rho_O^0$  et de vitesse  $u_O^0$ . L'orifice d'injection de carburant a un diamètre de  $2e_0$ , tandis que l'oxydant débouche sur un diamètre égal à  $2e_1$  (Fig. 2.3).

De nombreux concepts ont été développés pour décrire les flammes de diffusion [45, 48, 49]. Une approche courante vise à séparer le problème du mélange entre carburant et oxydant et le problème réactif.

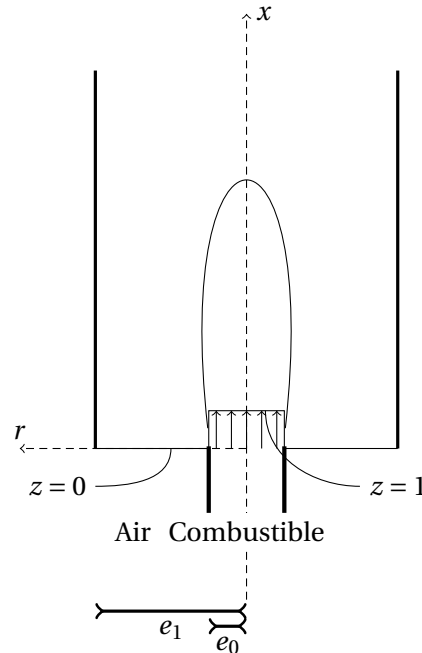


FIGURE 2.3: Configuration de la flamme jet axisymétrique

## 2. Hypothèses principales

Quelques hypothèses sont nécessaires pour dériver la solution analytique de la flamme de diffusion schématisée Fig. 2.3 :

- la pression thermodynamique est supposée comme constante et le nombre de Mach de l'écoulement est petit,
- le produit  $\rho D$  est supposé constant ( $\rho D = \rho_O^0 D_O = \rho_F^0 D_F$ ), et la loi de *Fick* [50] est utilisée sans correction de la vitesse de diffusion,

- les capacités thermiques de chaque espèce chimique sont égales et indépendantes de la température,
- le nombre de Lewis est égal à 1, les temps caractéristiques de la diffusion thermique et de la diffusion massique sont égaux.

### 3. Équations de conservation

La masse  $\rho_k = \rho Y_k$  de chaque espèce  $k$  suit une équation de conservation :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (2.5)$$

où  $\dot{\omega}_k$  est le taux de production/destruction de l'espèce  $k$ .

Le taux de réaction de l'oxydant est relié à celui du carburant par  $\dot{\omega}_O = s\dot{\omega}_F$  via le coefficient stoechiométrique  $s = \frac{\nu_O M_O}{\nu_F M_F}$  où  $\nu_O$  et  $\nu_F$  sont les proportions stoechiométriques de la réaction d'oxydation du carburant par l'oxydant. De plus, le taux de dégagement de chaleur total  $\dot{\omega}_T$  de la réaction est lié à celui du carburant et à la chaleur de réaction par unité de masse de carburant  $Q$  par  $\dot{\omega}_T = -Q\dot{\omega}_F$  [45]. Le système d'équations pour les fractions massiques  $Y_F$  et  $Y_O$  ainsi que la température se réduit à :

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_F) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial Y_F}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_F \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_O) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial Y_O}{\partial x_i} \right) + s\dot{\omega}_F \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i T) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{Q}{C_p} \dot{\omega}_F \quad (2.8)$$

Pour résoudre ce problème, la notion de scalaire passif est introduite. La fraction de mélange est un scalaire passif utilisé notamment pour l'analyse des flammes de diffusion, car elle permet de réduire le système d'équations Eqs. (2.6)-(2.8) à une seule équation de conservation.

Il existe plusieurs définitions de scalaire passif (Eq. (2.9)), qui sont toutes solutions de la même équation de conservation (Eq. (2.10)), avec les mêmes conditions limites  $z = 1$  côté carburant et  $z = 0$  côté oxydant  $O$ .

$$z = \frac{sY_F - Y_O + Y_O^0}{sY_F^0 + Y_O^0} = \frac{\frac{C_p}{Q}(T - T_O^0) + Y_F}{\frac{C_p}{Q}(T_F^0 - T_O^0) + Y_F^0} = \frac{\frac{sC_p}{Q}(T - T_O^0) + Y_O - Y_O^0}{\frac{sC_p}{Q}(T_F^0 - T_O^0) - Y_O^0} \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i z}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \quad (2.10)$$

Pour résoudre analytiquement l'Eq. (2.10), des simplifications supplémentaires sont nécessaires :

- 1 - l'écoulement est stationnaire  $\frac{\partial}{\partial t} = 0$ ,
- 2 - les vitesses radiales et tangentielles sont nulles :  $u_r = u_t = 0$ ,

3 - la diffusion dans les directions axiale et tangentielle est négligeable devant la diffusion radiale

$$\frac{\partial}{\partial x} \ll \frac{\partial}{\partial r} \text{ et } \frac{\partial}{\partial \theta} \ll \frac{\partial}{\partial r}.$$

Ces affirmations permettent de réduire Eq. (2.10) dans le système de coordonnées cylindriques à :

$$\frac{\partial z}{\partial x} = \alpha \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial z}{\partial r} \right), \quad (2.11)$$

avec  $\alpha = \frac{D}{u_r^0}$ .

#### 4. Résolution du problème réactif : modèles pour la structure d'une flamme de diffusion

L'introduction du scalaire passif permet de réduire le nombre de variables à transporter. Pour calculer  $Y_k$  et  $T$ , une hypothèse supplémentaire suppose que la température et les fractions massiques d'espèces ne dépendent que de la fraction de mélange et du temps :

$$\begin{aligned} T &= T(z, t) \\ Y_k &= Y_k(z, t) \end{aligned} \quad (2.12)$$

Le problème Eq. (2.12) définit la structure de flamme et peut être résolu selon trois approches :

- chimie infiniment rapide,
- chimie non infiniment rapide,
- d'équilibre chimique.

##### 4.1 Chimie infiniment rapide

Dans ce cas, le carburant et l'oxydant réagissent de manière instantanée en comparaison avec les autres temps caractéristiques du problème. Ainsi, le taux de réaction est une fonction *Dirac* au point stoechiométrique. Ceci implique que le problème Eq. (2.12) se résume à  $\frac{\partial^2}{\partial z^2} = 0$  avec une condition limite au point stoechiométrique. La température et les fractions massiques sont donc des fonctions linéaires de  $z$  (Fig. 2.4). Cette solution est appelée solution de *Burke-Schumann* [51].

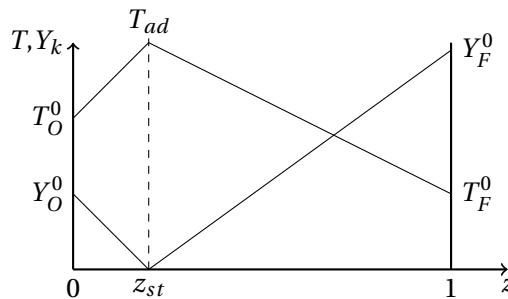


FIGURE 2.4: Structure de flamme pour une chimie infiniment rapide

La continuité de fonction au point stoechiométrique  $z = z_{st}$  permet d'écrire la solution pour la tem-

pérature et les fractions massiques sous la forme :

$$z > z_{st} : \begin{cases} Y_F(z) = zY_F^0 + (z-1)\frac{Y_O^0}{s} = Y_F^0\left(\frac{z-z_{st}}{1-z_{st}}\right) \\ Y_O^0(z) = 0 \\ T(z) = zT_F^0 + (1-z)T_O^0 + \frac{QY_F^0}{C_p}z_{st}\left(\frac{1-z}{1-z_{st}}\right) \end{cases} \quad (2.13)$$

$$z < z_{st} : \begin{cases} Y_F(z) = 0 \\ Y_O^0(z) = Y_O^0\left(1 - \frac{z}{z_{st}}\right) \\ T(z) = zT_F^0 + (1-z)T_O^0 + \frac{QY_F^0}{C_p}z \end{cases} \quad (2.14)$$

avec  $z_{st}$  la position stoechiométrique de la flamme dans l'espace de la fraction de mélange (où  $Y_F$  et  $Y_O$  sont nulles ici). Par inversion des équations 2.13-2.14 à la stoechiométrie,  $z_{st}$  est donné par :

$$z_{st} = \frac{1}{1 + \frac{sY_F^0}{Y_O^0}} \quad (2.15)$$

La composition des carburants change la valeur de la stoechiométrie des différents mélanges :  $z_{st} = 0,055$  pour le méthane/air et  $z_{st} = 0,054$  pour le mélange TOTAL-TP1/air.

La flamme TOTAL-TP1 a une température adiabatique (2340K) plus élevée que celle du méthane (2245K), grâce à l'hydrogène contenu dans ce mélange.

## 4.2 Chimie non-infiniment rapide

Si l'hypothèse de chimie infiniment rapide n'est pas valable, le temps caractéristique lié à l'écoulement induit une structure de flamme plus complexe dont les effets sont quantifiés en utilisant le nombre de *Damköhler* [52] :

$$D_a^{fl} = \frac{\tau_f}{\tau_c}, \quad (2.16)$$

où  $\tau_f$  est un temps caractéristique de l'écoulement (pour une flamme de diffusion, on choisit l'inverse du taux d'étirement) et  $\tau_c$  évalue le temps chimique

La résolution du problème Eq. (2.12) doit être faite numériquement. La Figure 2.5 représente la configuration de flamme de diffusion à contre-courant résolue par *COSILAB* ou *CANTERA* [53, 54]. Pour résoudre ce problème, le carburant est injecté face à un jet d'oxydant de débit identique, formant un plan de stagnation. La flamme se stabilise à mi-distance entre les injecteurs. Ces solutions permettent de construire des tables qui relient de manière unique, pour un étirement donné, la température  $T$  et les fractions massiques  $Y_k$  d'espèces  $k$  à  $z$ .

Pour illustration, la Fig. 2.6-(a) représente la température et les fractions massiques des espèces en fonction de la fraction de mélange<sup>1</sup> pour une flamme de diffusion laminaire méthane/air à pression atmosphérique et température ambiante (300K). La figure Fig. 2.6-(b) donne le résultat de la flamme

1. La fraction de mélange peut-être définie de plusieurs façons. Comme le nombre de Lewis est différent pour chaque espèce, la fraction de mélange n'est pas bien définie par la relation simple 2.9 [55].

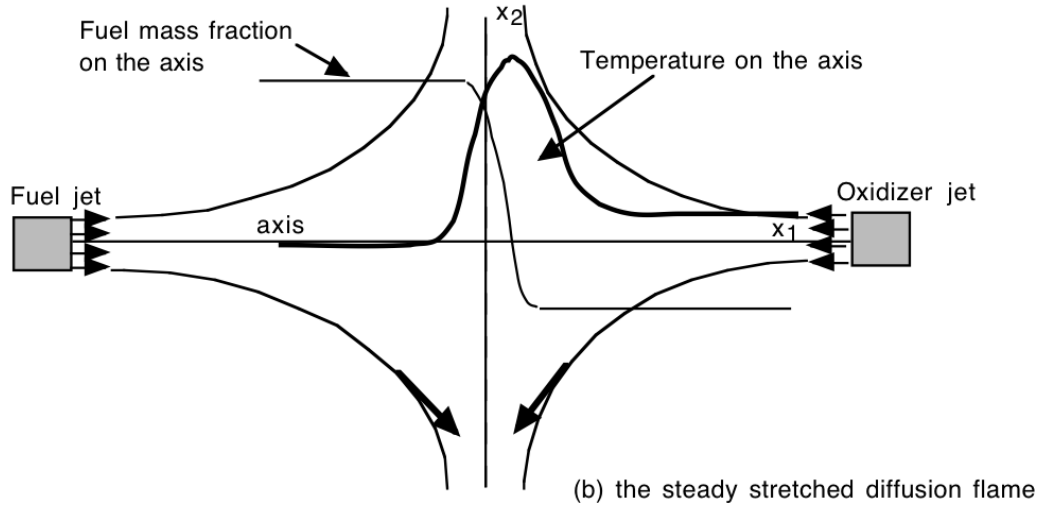


FIGURE 2.5: Flamme de diffusion à contre-courant [45]

1D pour de l'air préchauffé à 525K et du carburant TOTAL-TP1 à 300K. La fraction de mélange utilisée comme scalaire passif suit la définition de *Bilger* [55, 56] :

$$z_B = \frac{2(Y_C - Y_{C,2})/w_C + (Y_H - Y_{H,2})/2w_H - (Y_O - Y_{O,2})/w_O}{2(Y_{C,1} - Y_{C,2})/w_C + (Y_{H,1} - Y_{H,2})/2w_H - (Y_{O,1} - Y_{O,2})/w_O} \quad (2.17)$$

où les indices (1) et (2) font référence respectivement à l'entrée de carburant et d'air.

La température maximum de chacune de ces flammes est inférieure à la température trouvée pour la chimie infiniment rapide (Tab. 2.3).

	Méthane	TOTAL-TP1
Chimie infiniment rapide ( $a \rightarrow 0s^{-1}$ )	2245K	2340K
Chimie non infiniment rapide ( $a = 105s^{-1}$ )	1980K	2143K

TABLE 2.3: Températures maximales en fonction de l'étirement

Dans de telles flammes, le paramètre principal est le taux d'étirement  $a$  qui est contrôlé par  $\tau_f$ . Le temps chimique  $\tau_c$  est dépendant du taux de réaction total  $\dot{\omega}_T$ , et conserve pour des conditions données le même ordre de grandeur. En toute rigueur,  $a$  est le gradient de vitesse à la flamme. Comme cette quantité n'est pas facile à calculer et dépend de l'endroit où il est calculé (du fait de  $\rho$  variable), une valeur approche est utilisée. La littérature donne plusieurs approximations du taux d'étirement [45, 55, 56]. L'équation 2.18 donne un ordre de grandeur facile à calculer :

$$a = \frac{|U_O| + |U_F|}{H}, \quad (2.18)$$

où  $u_O$  (resp.  $u_F$ ) est la vitesse de l'oxydant (resp. carburant) à l'injection et  $H$  la distance entre ces deux injections.



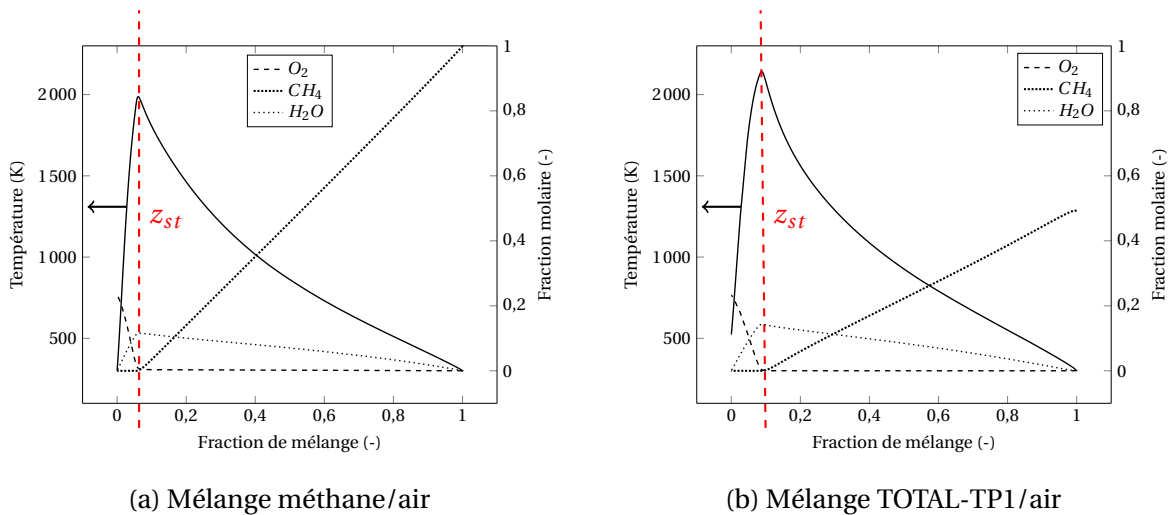


FIGURE 2.6: Structure d'une flamme laminaire de diffusion de : (a) méthane/air et de (b) TOTAL-TP1/air calculée avec le mécanisme détaillé GRI 3.0 [57] - Taux d'étirement :  $a = 105s^{-1}$

La Figure 2.7 montre la température maximale pour les flammes de diffusion méthane/air et TOTAL-TP1/air en fonction de l'étirement. La température limite où  $a = 0s^{-1}$  correspond à la chimie infiniment rapide qui donne la température maximale. Pour les taux d'étirement de plus en plus élevés, la chimie devient un facteur limitant : les réactions chimiques ont de plus en plus de difficultés à se maintenir, et deviennent de plus en plus lentes. L'extinction brutale survient lorsque le nombre de *Damköhler* atteint une valeur critique (fort étirement). Cette tendance a été étudiée et vérifiée par [58–60] avec des modèles asymptotiques.

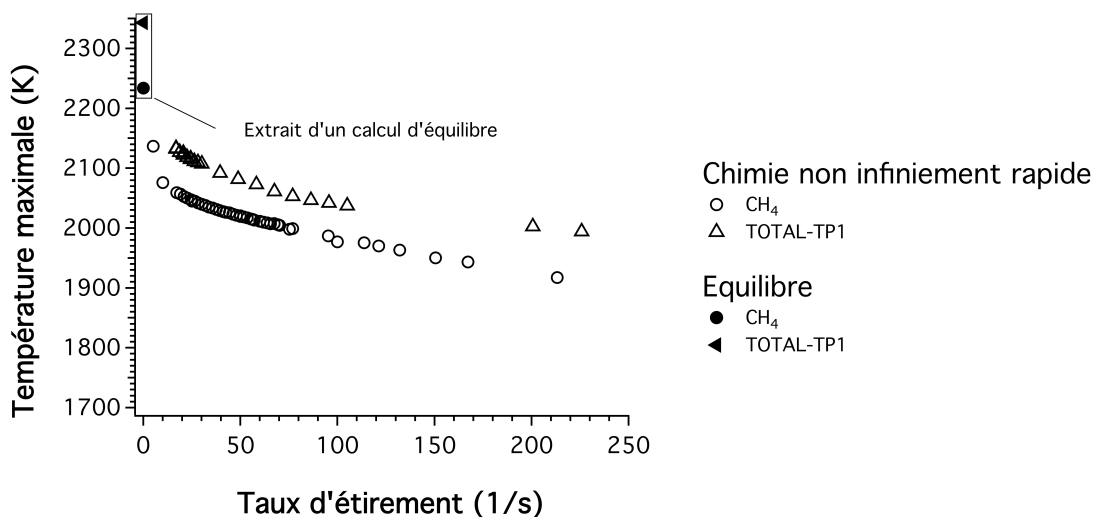


FIGURE 2.7: Température maximale en fonction du taux d'étirement - Mécanisme GRI 3.0

### 4.3 Équilibre chimique

L'équilibre chimique correspond au minimum d'entropie et se produit lorsque le taux de réaction net est nul. Cet état correspond au minimum de l'énergie de *Gibbs* du système et ne dépend que des espèces en présence. La Figure 2.8 montre un calcul d'équilibre pour un mélange TOTAL-TP1/air réalisé avec 53 espèces.

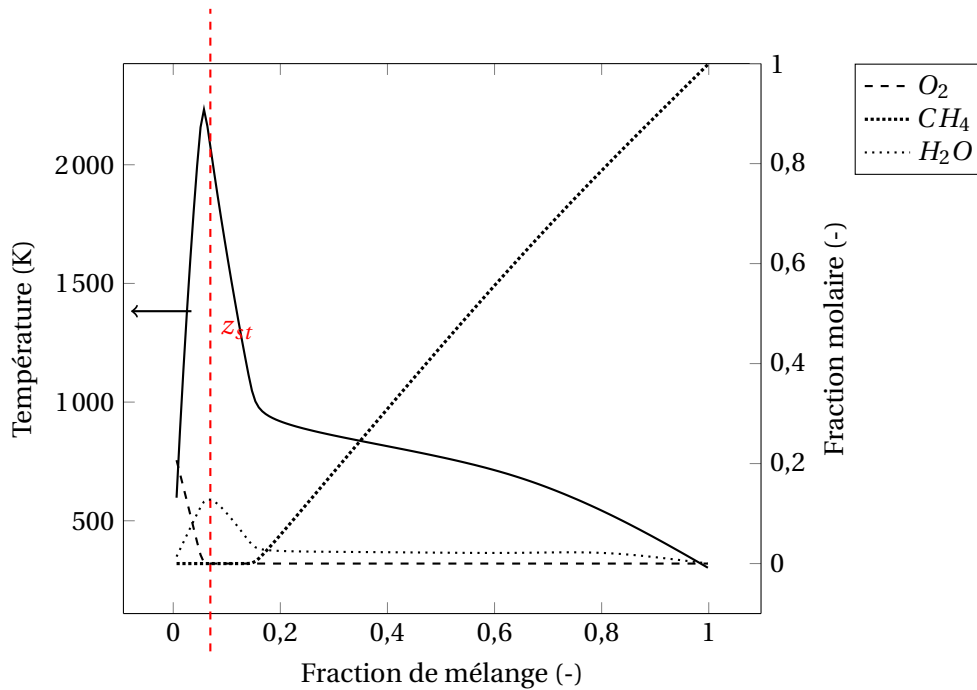


FIGURE 2.8: Calcul d'équilibre du mélange TOTAL-TP1/air calculé avec les 53 espèces du GRI [57]

En comparant avec la Fig. 2.6-(b), les profils sont très différents du côté carburant, ce qui signifie que dans cette zone, le mélange n'est pas à l'équilibre dans la flamme 1D.

### 5. Résolution de l'équation de transport pour la fraction de mélange

Pour connaître le champ de fraction de mélange une solution analytique de l'Eq. (2.10) peut être développée une fois les conditions limites fixées. En entrée, un profil de type chapeau pour la fraction de mélange est imposé (Fig. 2.3) :

$$z(0,r) = H(r - e_0) \quad (2.19)$$

où  $H$  est la fonction de *Heaviside* et  $e_0$  est le rayon du disque d'injection de carburant. Les parois de la chambre sont modélisées par des conditions aux limites de *Dirichlet* :

$$z(x,r = e_1) = 0 \quad (2.20)$$

Deux autres développements analytiques ont été réalisés pour une condition de flux nul de la fraction de mélange à la paroi et un domaine infini. Ils sont détaillés en annexe A.

### Séparation des variables

La première étape pour résoudre Eq. (2.11) consiste à utiliser la méthode de séparation des variables. Une solution générale de l'Eq. (2.11) est donc cherchée sous la forme :

$$z(x,r) = h(x)g(r), \quad (2.21)$$

où  $g$  et  $h$  sont des fonctions dépendantes de  $x$  et  $r$  respectivement.  $g'$  et  $h'$  désignent leur dérivée.

L'équation Eq. (2.11) s'écrit donc :

$$gh' = \alpha \left( g''h + \frac{1}{r}g'h \right) \quad (2.22)$$

Les fonctions  $g$  et  $h$  recherchées n'étant jamais identiquement nulles, Eq. (2.22) peut s'écrire :

$$\frac{1}{\alpha} \frac{h'}{h} = \frac{g'' + \frac{1}{r}g'}{g} \quad (2.23)$$

Comme le membre de gauche ne dépend que de  $x$  et le membre de droite ne dépend que de  $r$ , ces deux expressions sont constantes. De plus, la fraction de mélange étant finie pour tout  $x$  et  $r$ , cette constante doit être strictement négative et nous obtenons l'égalité :

$$\frac{1}{\alpha} \frac{h'}{h} = \frac{g'' + \frac{1}{r}g'}{g} = -\lambda^2 \quad (2.24)$$

avec  $\lambda$  une constante non nulle à déterminer.

Deux équations indépendantes sont obtenues et forment le système d'équations :

$$\frac{1}{\alpha} \frac{h'}{h} = -\lambda^2 \quad (2.25)$$

$$g'' + \frac{1}{r}g' + \lambda^2 g = 0 \quad (2.26)$$

La solution de Eq. (2.25) est immédiate :

$$h(x) = Ae^{-\alpha\lambda^2 x} \quad (2.27)$$

avec  $A$  une deuxième constante à déterminer.

La seconde équation 2.26 est une équation de *Bessel* d'ordre 0 et admet la solution générale [61] :

$$g(r) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n J_0(\lambda_n r) + \sum_{n=0}^{\infty} D_n Y_0(\lambda_n r) \quad (2.28)$$

avec  $J_0$  et  $Y_0$  les fonctions de *Bessel* d'ordre 0 et  $C_n$ ,  $D_n$ ,  $\lambda_n$  l'ensemble des constantes à déterminer.

Ainsi, la solution générale de l'Eq. (2.11) s'écrit :

$$z(x,r) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n J_0(\lambda_n r) e^{-\alpha\lambda_n^2 x} + \sum_{n=0}^{\infty} D_n Y_0(\lambda_n r) e^{-\alpha\lambda_n^2 x} \quad (2.29)$$

### Solution particulière

Dans la seconde étape, on cherche la solution particulière du problème traité en déterminant les constantes  $C_n$ ,  $D_n$  et  $\lambda_n$  en fonction de la condition limite de *Dirichlet* (Eq. (2.20)) et la fonction de *Heavisde* (Eq. (2.19)).

En premier lieu, la fraction de mélange doit être finie en  $r = 0$ , or la fonction de *Bessel* de seconde espèce  $Y_0$  a par définition une limite infinie en 0. Les constantes  $D_n$  sont donc nulles et Eq. (2.29) se simplifie en :

$$\forall (x, r) \in \mathbb{R} \times \mathbb{N}, \quad z(x, r) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n J_0(\lambda_n r) e^{-\alpha \lambda_n^2 x} \quad (2.30)$$

Puis, l'évaluation de Eq. (A.13) à la paroi (Eq. (2.20)) permet de déterminer les constantes  $\lambda_n$  :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad z(x, r = e_1) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n J_0(\lambda_n e_1) e^{-\alpha \lambda_n^2 x} = 0 \quad (2.31)$$

Donc, au moins une des égalités suivantes est vérifiée :

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad C_n = 0 \quad (2.32)$$

$$\forall n, J_0(\lambda_n e_1) = 0 \quad (2.33)$$

La première solution (Eq. (2.32)) est exclue car elle conduit à la fonction nulle. La solution de Eq. (2.33) est :

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad \lambda_n = \frac{Z_n}{e_1}, \quad (2.34)$$

où  $Z_n$  est le  $n$ -ième zéro de la fonction  $J_0$  de *Bessel* d'ordre 0.

Enfin, les coefficients  $C_n$  sont déterminés en utilisant la dernière condition limite d'entrée (Eq. (2.19)) :

$$\forall r \in \mathbb{R}, \quad z(x = 0, r) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n J_0\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) = H(r - e_0) \quad (2.35)$$

Les fonctions de *Bessel* définissent une base orthonormale notée (B) dans un espace des fonctions *Hilbert*. Les fonctions  $p_n$  définissent la projection sur cette base (B) [62, 63] :

$$p_n : f \mapsto \int_0^{e_1} f J_0\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr \quad (2.36)$$

La projection de Eq. (2.35) sur cette base donne :

$$\begin{aligned} \forall n \in \mathbb{N}, \quad C_n \int_0^{e_1} J_0^2\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr &= \int_0^{e_1} H(r - e_0) J_0\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr \\ &= \int_0^{e_0} J_0\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr, \end{aligned} \quad (2.37)$$

ce qui permet de déterminer les coefficients  $C_n$  :

$$C_n = \frac{\int_0^{e_0} J_0\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr}{\int_0^{e_1} J_0^2\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr} \quad (2.38)$$

Le dénominateur est évalué dans [61] :

$$\int_0^{e_1} J_0^2\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr = \frac{e_1^2}{2} J_1^2(Z_n) \quad (2.39)$$

Il reste à l'évaluer le numérateur en utilisant la formule suivante [61] :

$$\int_0^x \xi J_0(\xi) d\xi = x J_1(x) \quad (2.40)$$

En effectuant le changement de variable  $\xi = \frac{Z_n}{e_1} r$  dans Eq. (2.40), l'évaluation du numérateur de Eq. (2.37) :

$$\begin{aligned} \int_0^{e_0} J_0\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr &= \left(\frac{e_1}{Z_n}\right)^2 \int_0^{\frac{e_0}{e_1} Z_n} \xi J_0(\xi) d\xi \\ &= \frac{e_0 e_1}{Z_n} J_1\left(\frac{e_0}{e_1} Z_n\right) \end{aligned} \quad (2.41)$$

La solution particulière du problème de mélange s'écrit finalement :

$$z(x, r) = 2 \frac{e_0}{e_1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{J_1\left(\frac{e_0 Z_n}{e_1}\right)}{Z_n J_1^2(Z_n)} J_0\left(\frac{Z_n r}{e_1}\right) e^{-\frac{\alpha Z_n^2 x}{e_1^2}}. \quad (2.42)$$

### Longueur de flamme

La longueur de flamme  $L_f$  d'une flamme de diffusion se définit par rapport au positionnement de la fraction de mélange à la stoechiométrie :

$$z(x = L_f, r = 0) = z_{st} \quad (2.43)$$

$L_f$  peut être évaluée en utilisant la solution du problème de mélange Eq. (2.42) en  $r = 0$  et  $x = L_f$  :

$$z_{st} \approx 2 \frac{e_0}{e_1} \frac{J_1\left(\frac{e_0}{e_1} Z_1\right)}{Z_1 J_1^2(Z_1)} e^{-\frac{\alpha Z_1^2 L_f}{e_1^2}} \quad (2.44)$$

avec  $J_0(0) = 1$ . La longueur de flamme est égale à :

$$L_f = \frac{e_1}{Z_1^2} \operatorname{Re} \ln \left( \frac{2 \frac{e_0}{e_1} J_1\left(\frac{e_0}{e_1} Z_1\right)}{Z_1 J_1^2(Z_1)} \frac{1}{z_{st}} \right) \quad (2.45)$$

avec  $Z_1$  le premier zéro positif de  $J_0$  et le nombre de Reynolds  $Re = \frac{e_0 u_F^0}{D} = \frac{e_0}{\alpha}$  basé sur le rayon du brûleur.

Cette longueur de flamme est à comparer avec la longueur de la flamme de diffusion 2D plan [64] :

$$L_f = \frac{e_0^2}{\pi \alpha} z_{st}^2 = \frac{e_0}{\pi} Re z_{st}^2 \quad (2.46)$$

Cette longueur de flamme théorique augmente linéairement avec le nombre de Reynolds  $Re$ . Cette dépendance avait déjà été mise en évidence par *Hottel & Hawthorne* en (1949) [65] : Cette figure montre

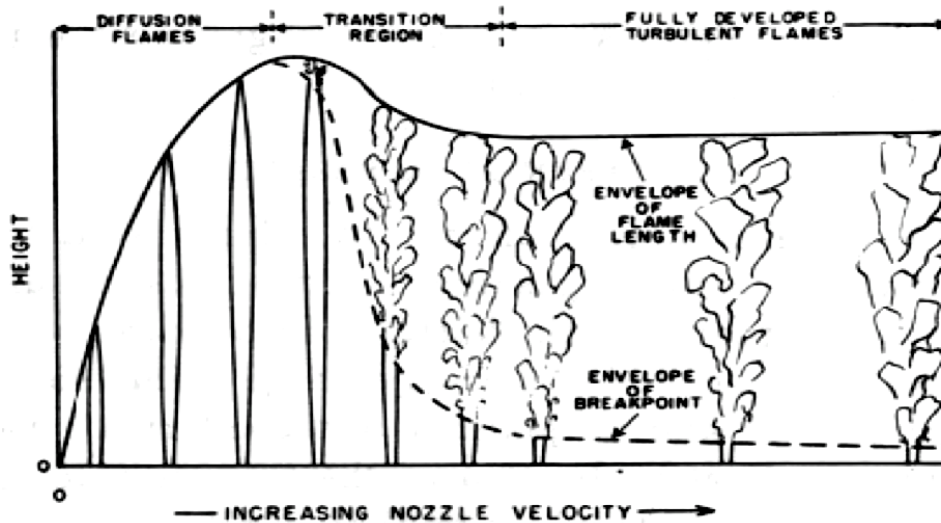


FIGURE 2.9: Longueur d'une flamme de diffusion en fonction de la vitesse débitante du carburant - Expérience de *Hottel & Hawthorne* [65]

la dépendance linéaire de la longueur d'une flamme de diffusion par rapport à la vitesse débitante dans le régime laminaire. Cette flamme atteint une longueur maximale dans la région de transition entre le régime laminaire et turbulent, puis se stabilise à une longueur constante en moyenne.

Dans notre cas, la hauteur de flamme est connue et est utilisée pour évaluer  $Re$ . Comme par ailleurs  $e_0$  et  $u_F^0$  sont fixés, la bonne hauteur est ajustée par  $D$ , qui représente la diffusion turbulente.

## 6. CANDLE

La théorie exposée précédemment est mise en pratique par l'intermédiaire du code nommé *CANDLE*. Ce code calcule la fraction de mélange à l'aide des quatre solutions analytiques pour des flammes laminaires théoriques : 2D plan [45], 2D axi-symétrique avec fraction de mélange imposée, flux imposé et non confinée (Annexe A- I et A- II)

La chimie utilisée est laissée au choix de l'utilisateur Il peut directement choisir une chimie infiniment rapide ou importer une chimie complexe de code monodimensionnel comme *CANTERA* et *COSILAB*.

L'utilisateur fourni le maillage et les paramètres suivants : la taille de l'injecteur  $e_0$ , la vitesse d'injection  $u_F^0$ , la longueur de flamme et le diamètre du four.

Pour accélérer la production d'une solution analytique le code a été parallélisé à l'aide d'*OpenMP*. Cette implémentation permet une utilisation simple sur des machines multicoeurs. La solution est directement utilisable par les codes développés au CERFACS (AVBP, PRISMA).

### III Application au cas industriel *Feyzin*

Les résultats fournis par *CANDLE* donnent les champs d'espèces et de température avec la chimie non infiniment rapide tabulée à partir du GRI 3.0. Le point de fonctionnement correspond au four de *Feyzin*.

#### 1. Configuration géométrique et point de fonctionnement

L'enceinte du four *Feyzin* est un cylindre de rayon  $R_{\text{four}} = 2,885\text{m}$  et de hauteur  $14\text{m}$  (Fig. 2.10). Le brûleur de ce four a un diamètre  $D_b = 40\text{cm}$ . Le carburant et le comburant se mélangent en sortie de brûleur. L'air est en excès et préchauffé. Les données pour le point de fonctionnement du four sont résumées Tab. 2.4. La longueur de flamme est estimée à  $7\text{m}$ .

Données	Unité	Air	Carburant
Température $T$	(K)	525	300
Densité $\rho$	( $\text{kg}/\text{m}^3$ )	1,6	0,64
Débit $\dot{m}$	( $\text{kg}/\text{s}$ )	0,27	5,11

TABLE 2.4: Données du point de fonctionnement de l'installation *Feyzin*

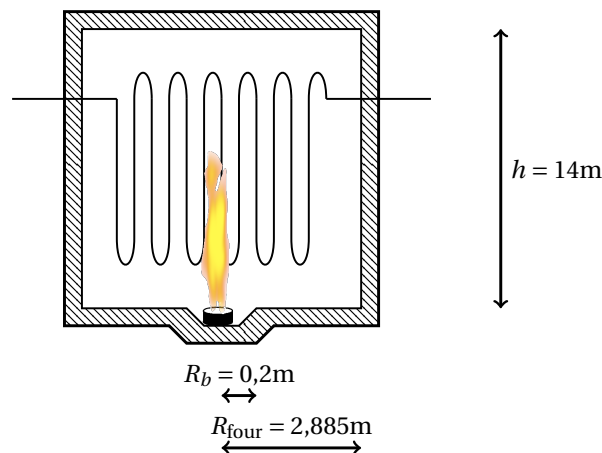


FIGURE 2.10: Schéma de la zone radiative du four cylindrique de *Feyzin*

La viscosité est évaluée pour le mélange air/carburant à  $\nu_{\text{mel}} = 2,765e^{-5}\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}$  par une loi de mélange. L'écoulement en sortie d'injecteur est fortement turbulent. Son nombre de Reynolds basé sur le diamètre du brûleur est égal à  $Re_D = 588000$ .

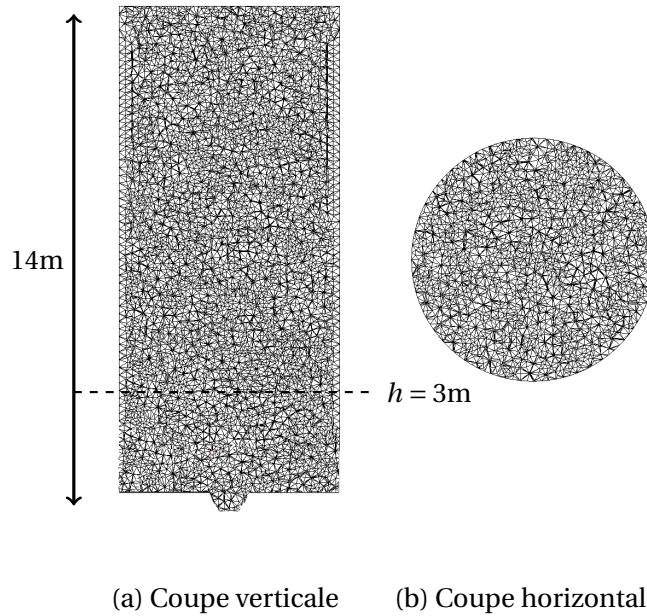


FIGURE 2.11: Coupes du maillage du four sans tubes utilisé pour le calcul de la flamme de diffusion par CANDLE

Le maillage utilisé par *CANDLE* est constitué de 9645 noeuds et 18900 cellules (Fig. 3.43). Les tubes ne sont pas pris en compte pour le moment dans la géométrie.

La chimie utilisée est GRI 3.0 déjà utilisé pour la flamme calculée avec le carburant TOTAL-TP1 (Fig. 2.6). Le taux d'étirement provoqué par le développement des structures turbulentes est évalué par :

$$a = \frac{U_{\text{Air}} - U_{\text{Carb}}}{d} \quad (2.47)$$

où  $U_{\text{Air}}$  et  $U_{\text{Carb}}$  sont les vitesses débitantes de l'air et du carburant, et  $d$  la taille caractéristique des structures. Le taux d'étirement s'évalue à  $110\text{s}^{-1}$  avec  $d = 0,025\text{m}$  estimé égale au diamètre du tube de l'injecteur de carburant. La chimie issue de la flamme à contre-courant de taux d'étirement égale à  $a = 105\text{s}^{-1}$  est choisie pour le calcul. (Sec. 4.2).

Le *PCI* calculé précédemment permet de déduire la puissance injectée par la combustion du carburant TOTAL-TP1 avec de l'air (Tab. 2.2). Cette puissance est égale à  $P_{\text{comb}} = \text{PCI} \times \dot{m}_F = 14,71\text{MW}$ .

## 2. Champs de fraction de mélange, température et de fractions molaires d'espèces

Les champs de température et d'espèces permettent de visualiser la flamme de diffusion obtenue. Tout d'abord, la Figure 2.12-(a) montre une coupe verticale de la fraction de mélange.

Les champs de température et d'espèces radiatives  $\text{CO}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}$  sont montrées Fig. 2.12-(b) et Fig. 2.13. Les gaz chauds se concentrent au centre du four de part et d'autre de la ligne stoechiométrique. Les espèces deviennent plus froides à fur et à mesure qu'elles se rapprochent des parois. d'espèces diminue jusqu'à des valeurs négligeables.



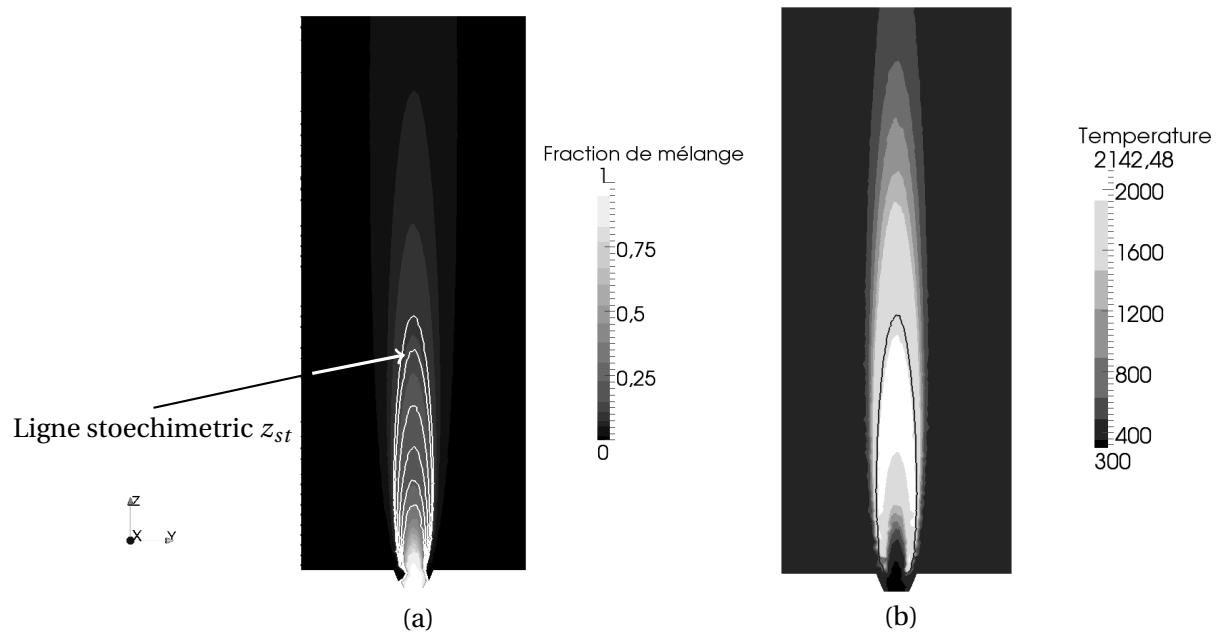


FIGURE 2.12: (a) Fraction de mélange pour la flamme de diffusion. L'isoligne  $z = z_{st}$  représente la zone où la flamme est la plus réactive - (b) Champ de température pour la chimie non infiniment rapide ( $a = 105\text{s}^{-1}$ )

De fortes inhomogénéités de température et d'espèces sont induites par la présence de la flamme, induisant des transferts de chaleur par conduction ou rayonnement. Nous évaluerons dans la suite ces différents transferts de chaleur.

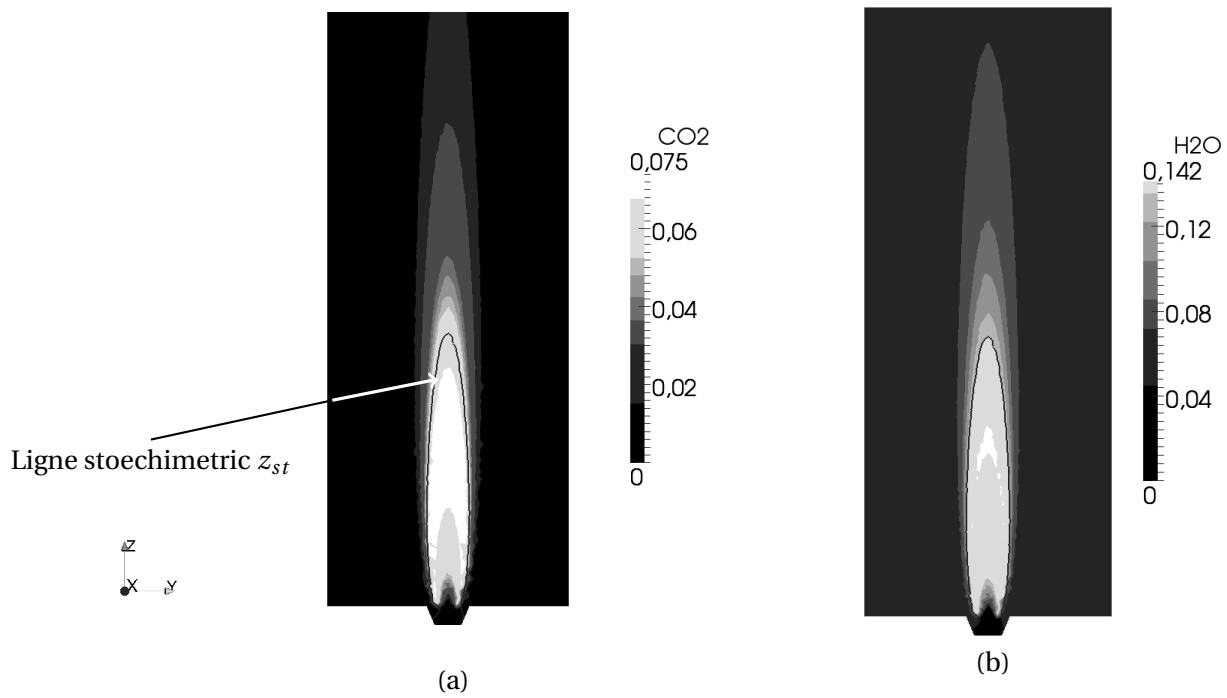


FIGURE 2.13: Champ de fraction molaire d'espèces  $\text{CO}_2$  (a) et  $\text{H}_2\text{O}$  (b) pour la chimie non infiniment rapide ( $a = 105\text{s}^{-1}$ )

# 3

## Thermique

Dans les fours industriels, l'objectif principal est de transférer de la chaleur à partir des produits de combustion chauds à tous types de charge plus froide. Une différence de température entre deux éléments dans un système permet le transfert de chaleur par un ou plusieurs des trois modes de transfert, à savoir la convection, la conduction et le rayonnement.

Le rayonnement est le mécanisme principal d'échange de chaleur dans les grands volumes. La convection joue également un rôle important. Enfin, la conduction joue un rôle critique pour l'échange de chaleur entre deux fluides séparés par une paroi. Ces trois modes de transfert et leur modélisation sont décrits dans ce chapitre.

### 3. Première loi de la thermodynamique : Transferts de chaleur et énergie

La première loi de la thermodynamique établit qu'au cours d'une transformation quelconque d'un système fermé, la variation de son énergie totale est égale à la quantité d'énergie échangée avec le milieu extérieur, sous forme de chaleur et sous forme de travail.

La première Loi de la thermodynamique pour un système fermé prend la forme suivante :

$$\dot{Q} = \dot{W} + \frac{dU}{dt} \quad (3.1)$$

où  $\dot{Q}$  représente le taux de transfert de chaleur,  $\dot{W}$  est le travail fourni au système (exprimé en W).  $\frac{dU}{dt}$  représente la variation temporelle de l'énergie interne  $U$ .

Si le seul travail est dû à un changement de volume  $dV$  du système, Eq. (3.1) se réécrit :

$$\dot{Q} = P \frac{dV}{dt} + \frac{dU}{dt} \quad (3.2)$$

faisant intervenir l'enthalpie  $H = U + PV$  de telle sorte qu'à pression constante :

$$\dot{Q} = \frac{dH}{dt} \quad (3.3)$$

#### 4. Modes de transfert de chaleur

La combustion de la flamme induit trois modes de transfert de la chaleur. Ces transferts couplés permettent de chauffer la charge à l'intérieur du tube. Ils sont tous les trois représentés schématiquement Fig. 3.1. Le tube reçoit de l'énergie par rayonnement des gaz chauds et de la paroi du four ; ainsi que par convection des écoulements pariétaux. Enfin, il transfère au travers de sa paroi la chaleur reçue par les gaz à la charge, par conduction thermique. La convection interne permet un transfert d'énergie de la paroi interne des tubes vers le fluide.

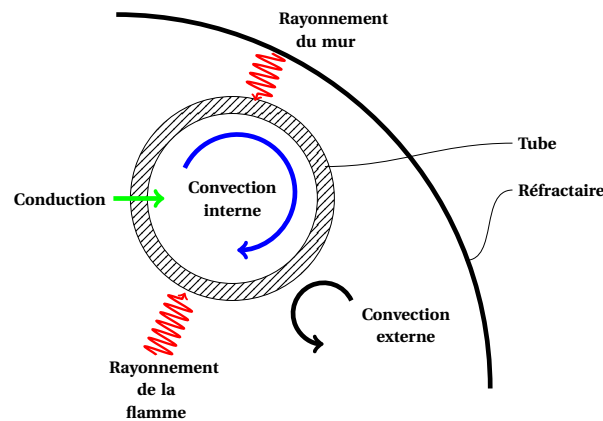


FIGURE 3.1: Bilan des modes de transfert de chaleur sur un tube dans un four

#### Conduction

La chaleur est transmise par contact direct, sans mouvement d'ensembles. Elle s'observe principalement dans les solides puisqu'il n'y a pas de convection dans les solides. C'est l'agitation thermique microscopique qui se transmet. Dans les métaux, la conduction fait intervenir les électrons libres qui les rendent bons conducteurs de la chaleur. En revanche dans les isolants, la conduction se fait mal.

#### Convection

Le transfert de chaleur par convection est attribuable au mouvement macroscopique d'un fluide, qui transporte avec lui l'énergie qu'il contient, et est donc limité aux liquides et aux gaz. La convection peut être naturelle (ou libre) quand c'est l'inhomogénéité de température qui permet le mouvement du fluide par gravité. Elle est forcée si un dispositif mécanique fait circuler le fluide.

## Rayonnement

Le transfert de chaleur par rayonnement est attribué à la propagation des photons. Ces particules sont associées à une énergie, appelée quantum, qui dépend de la longueur de l'onde électromagnétique transportée. Selon les niveaux d'énergie, l'interaction rayonnement matière est de nature différente. Pour les problèmes considérés en combustion, le rayonnement se situe entre l'infrarouge et le visible et a un impact sur la matière. Lorsqu'il atteint une surface, il peut être réfléchi, transmis ou absorbé. Tous les matériaux émettent de l'énergie thermique sous forme d'ondes électromagnétiques. La fraction de l'énergie qui est absorbée se manifeste sous forme d'échauffement du matériau. Les gaz et les liquides peuvent également absorber de l'énergie radiative, mais dans une moindre mesure.

## 5. Analyse dimensionnelle

Toutes les grandeurs physiques dépendent d'un nombre limité de dimensions fondamentales : unité de masse, de longueur, de temps et pour les problèmes de transfert de chaleur, de température.

Pour un système à  $p$  dimensions et  $n$  paramètres,  $(n - p)$  nombres sans dimension caractérisent ce système (théorème de *Vashy-Buckingham* ou théorème des groupements  $\Pi$ ).

Dans notre cas, les dimensions fondamentales sont  $J, kg, m, s, K$ . Les paramètres caractéristiques du fluide sont :

- la viscosité  $\mu$  ( $m^2/s$ ),
- la densité  $\rho$  ( $kg/m^3$ ),
- la conductivité  $\lambda$  ( $J/K \cdot m \cdot s$ ),
- la capacité thermique  $C_p$  ( $J/kg \cdot K$ ),
- le coefficient de dilatation thermique isobare  $\beta$  ( $K^{-1}$ ),
- le coefficient d'absorption  $\kappa_v$  ( $m^{-1}$ ).

Le paramètre de l'écoulement est la vitesse de caractéristique  $U$  ( $m/s$ ).  $D$  ( $m$ ) représente la longueur caractéristique de la géométrie. Et enfin, l'écart de température caractérise le transfert thermique  $\Delta T$  ( $K$ ), composé de deux températures absolues dans le système considéré.

Dans les systèmes considérés dans cette thèse, les cinq dimensions fondamentales sont utilisées et cinq nombres sans dimension peuvent être construits à partir de ces paramètres (Tab. 3.1) : *Reynolds*, *Prandtl*, *Lewis*, *Nusselt* et *Grashof*. Le nombre de *Rayleigh* est également introduit égal à  $Ra = Gr \times Pr$ .

Ces nombres indiquent les grandeurs liées, mais ne donnent pas la forme de la relation qui les lie. Ils permettent de fixer des limites de comportement des écoulements dans divers régimes. Les sections suivantes décrivent les modèles utilisés pour les différents modes de transfert.

Nombre adimensionnel	Formule	Comparaison
<i>Reynolds</i>	$Re = \frac{\rho UL}{\mu}$	(Forces d'inertie) / (Forces visqueuses)
<i>Prandtl</i>	$Pr = \frac{C_p \mu}{\lambda}$	(Diffusion de quantité de mouvement) / (Diffusion de la chaleur)
<i>Lewis</i>	$Le = \frac{\alpha}{D}$	(Diffusivité thermique) / (Diffusivité massique)
<i>Nusselt</i>	$Nu = \frac{hL}{\lambda}$	(Transferts convectifs) / (Transfert conductifs)
<i>Grashof</i>	$Gr = \frac{\beta g \Delta T \rho^2 L^3}{\mu^2}$	(Forces de gravité) / (Forces visqueuses)
<i>Rayleigh</i>	$Ra = \frac{C_p \beta g \Delta T \rho^2 L^3}{\lambda \mu}$	(Flottabilité) / (Diffusivités thermiques et dynamiques)

TABLE 3.1: Nombres sans dimension caractéristique

## I Conduction

Cette section est consacrée à la caractérisation du transfert de chaleur par conduction. Ce mode intègre une large gamme de systèmes complexes. Il est l'un des modes de transfert de chaleur les mieux compris. Beaucoup de solutions analytiques existent après simplification du problème. Aucun travail ne résume mieux ces études que ceux réalisés dans [66, 67]. Les auteurs y ont donné des solutions à un large éventail de problèmes, allant de sujets anciens comme celui du transport de courant dans un fil à des sujets tels que le laser et les systèmes de contrôle de température.

Une grande partie de l'intérêt porté à ce mode de transfert s'est développée ces dernières années. Les nouveaux problèmes rencontrés, sont par exemple, la résistance de contact, où une différence de température se développe entre deux solides qui n'ont pas un contact parfait avec l'autre, ou des problèmes où l'hypothèse de Fourier est remise en cause. En outre, les problèmes liés au transport dans les systèmes miniaturisés recueillent beaucoup d'intérêt. Un regain d'intérêt est également notable dans le domaine des matériaux composites, où la conduction de la chaleur est fortement directionnelle.

Du point de vue microscopique, la conduction dans les liquides est la conséquence de l'interaction entre molécules à haute température avec des molécules à température plus faible. Dans un solide conducteur, le transport d'énergie est associé au mouvement des électrons libres. Ceci explique d'ailleurs pourquoi les conducteurs électriques sont généralement de très bons conducteurs thermiques. Pour la grande majorité des applications, l'approche mésoscopique fondée sur la loi de Fourier est suffisante. Ce chapitre est consacré exclusivement à la théorie de la conduction de la chaleur par conduction mésoscopique.

À l'heure actuelle, la plupart des travaux d'analyse de la conduction sont accomplis par l'utilisation de codes. Ces outils ont montré leur capacité à analyser des systèmes inhomogènes, avec des géométries, et des conditions aux limites très complexes.

### 1. Loi de Fourier

La théorie mathématique de la conduction de la chaleur a été développée au début du XIXe siècle par Joseph Fourier. Cette théorie était basée sur les résultats d'expériences dans lesquelles un seul côté d'un solide rectangulaire est porté à la température  $T_1$ , le second étant porté à une température inférieure  $T_2$ . Les quatre autres faces sont isolées afin que la chaleur ne puisse circuler que selon une direction  $\mathbf{x}$ . Le flux de chaleur dans cette direction  $q_x$  est proportionnel à la différence de température, à la section transverse  $A_S$  et inversement proportionnel à l'épaisseur  $e$  de la matière :

$$q_x \propto \frac{A_S}{e} (T_1 - T_2) \quad (3.4)$$

La constante de proportionnalité liant le flux à la différence de température est appelée conductivité thermique et s'exprime en (W/m · K). L'équation 3.4 s'écrit alors :

$$q_x = \lambda \frac{A_S}{e} (T_1 - T_2) \quad (3.5)$$

Cette loi, également applicable pour la conduction dans les liquides et les gaz, montre qu'un matériau soumis à un gradient de température permet le transfert d'énergie dans le sens des températures les plus fortes vers les températures les plus faibles.

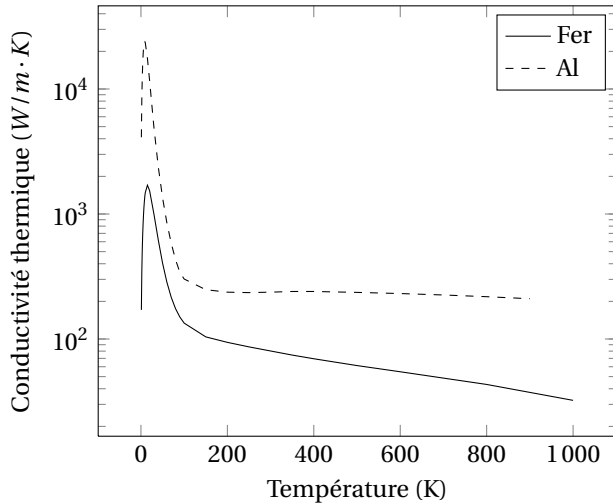


FIGURE 3.2: Conductivité des solides [68]

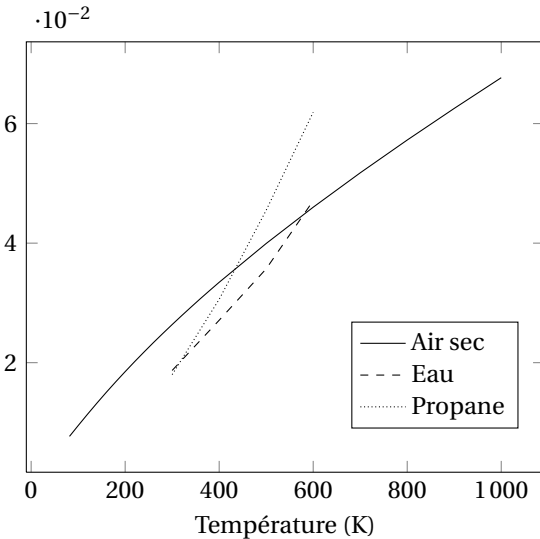


FIGURE 3.3: Conductivité des gaz [68]

L'équation générale locale de la loi de *Fourier* est de la forme :

$$\mathbf{q}_s(\mathbf{r}, t) = -\lambda \nabla T(\mathbf{r}, t) \quad (3.6)$$

où  $\mathbf{q}_s$  ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) représente le flux surfacique de chaleur,  $\mathbf{r}$  le vecteur position et  $t$  le temps.

## 2. Propriétés de matériaux

### 2.1 Conductivité thermique des matériaux

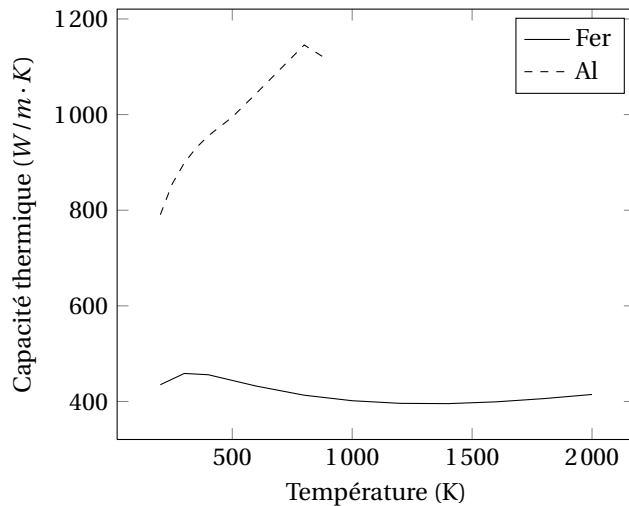
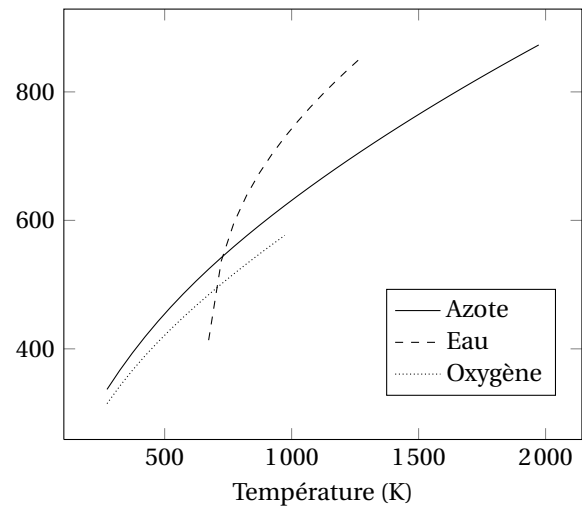
La valeur de la conductivité thermique  $\lambda$  permet de comprendre comment la conduction se produit dans un matériau donné. La conductivité thermique dépend fortement de la structure atomique et moléculaire du matériau. Comme telle, elle n'est pas généralement pas constante. Elle dépend notamment de l'état thermodynamique de la matière, c.-à-d. la température et de la pression. Plus les molécules se rapprochent, plus ce mécanisme sera important à température donnée du fait de leur proximité. Ceci explique en partie pourquoi les solides possèdent généralement une conductivité plus importante que les liquides, eux-mêmes plus conductifs que les gaz.

La gamme de conductivités thermiques est importante.  $\lambda$  varie d'un facteur  $10^5$  entre les gaz et le diamant à la température ambiante. Les valeurs les plus élevées sont associées à des métaux et les valeurs les plus faibles à des gaz et des isolants thermiques.

Les Figures 3.6-3.7 donnent un aperçu de la dépendance thermique de matériaux solides et de gaz courants.

Pour les solides, les liquides et gaz à basse pression, la dépendance de la conductivité thermique à la température est souvent considérée comme faible. La dépendance à la température a tendance à être assez faible dans les gammes de températures usuelles. Il est souvent acceptable de la traiter comme une constante, en particulier si la différence de température est modérée.



FIGURE 3.4: *Capacité thermique des solides* [68]FIGURE 3.5: *Capacité thermique des gaz*

Cette propriété peut également avoir un caractère anisotrope dans certains matériaux. Le bois et de nombreux matériaux stratifiés (en particulier les composites) présentent ainsi des conductivités thermiques plus faibles selon les directions perpendiculaires à cette stratification. Ainsi, pour ces matériaux anisotropes,  $\lambda$  a une forte dépendance directionnelle et n'est plus représenté par un scalaire mais un tenseur. Bien que la conduction de chaleur dans des matériaux anisotropes présente un intérêt fort pour cette application, ce sujet n'est pas abordé ici. Le lecteur intéressé pourra trouver une exposition assez détaillée dans [67].

## 2.2 Capacité thermique des matériaux

La capacité thermique à pression constante  $C_p$  représente le potentiel d'un matériau à stocker de l'énergie. Elle s'exprime en (J/kg·K). Elle dépend également de l'état physique du matériau et de sa température (Figs. 3.4-3.5).

## 2.3 Densité des matériaux

La densité d'un solide est plus importante que celle du liquide et du gaz (Fig. 3.7). La variabilité de la densité des gaz est généralement prise en compte dans les problèmes où de forts gradients de température sont présents. La densité des matériaux solides par contre est souvent considérée comme constante par simplification.

# 3. Équation de conduction de la chaleur

## 3.1 Établissement de l'équation générale de la conduction

Dans le cas de la conduction, la loi de transfert local est la loi de *Fourier*. Considérons un système en trois dimensions (Fig. 3.8). Le volume de contrôle  $V$  est délimité par une surface fermée  $A_S$ . Un

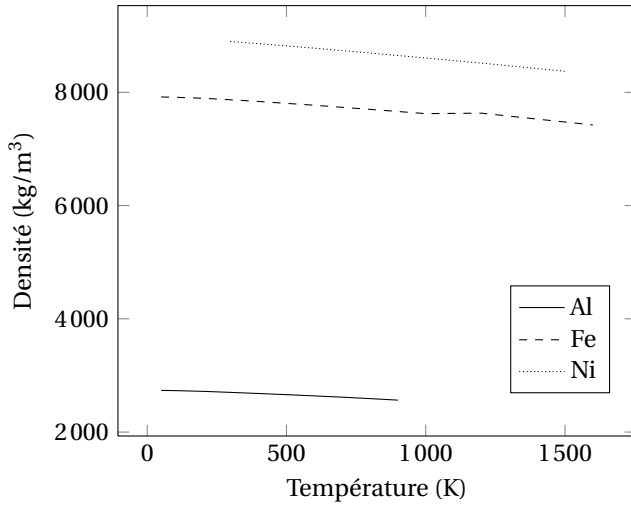


FIGURE 3.6: Densité des solides [68]

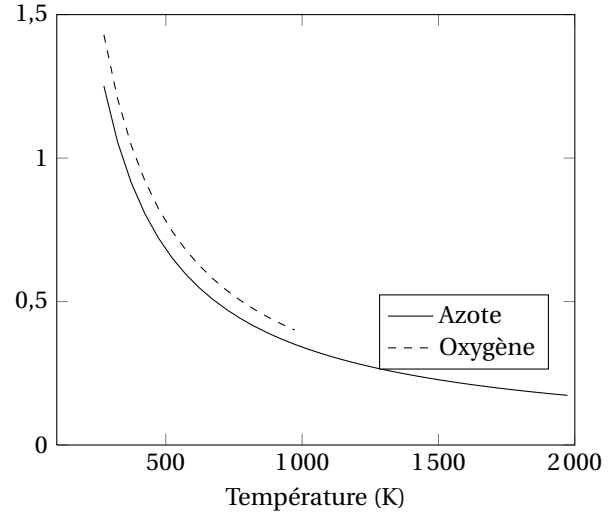


FIGURE 3.7: Densité des gaz [68]

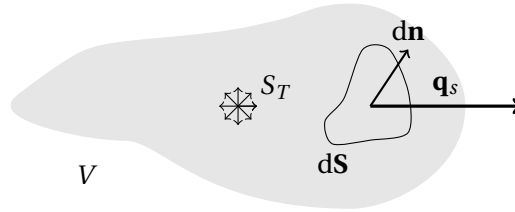


FIGURE 3.8: Volume de contrôle

élément de surface  $dA_S$  est défini selon la normale  $d\mathbf{n}$ . Un flux de chaleur  $\mathbf{q}_s(\mathbf{r}, t)$  passe par cette surface de contrôle. Ce volume peut éventuellement être chauffé par un terme volumique  $S_T(\mathbf{r}, t)$ .

La chaleur générée dans ce volume s'ajoute au bilan de flux passant par la surface de contrôle :

$$\dot{Q} = -\oint_{A_S} \mathbf{q}_s(\mathbf{r}, t) \cdot (d\mathbf{S}) + \iiint_V S_T(\mathbf{r}, t) dV \quad (3.7)$$

D'autre part, la variation d'énergie s'écrit :

$$\frac{dU(\mathbf{r}, t)}{dt} = \iiint_V \rho C_p \frac{\partial T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} dV \quad (3.8)$$

Pour des raisons de simplicité d'écriture, la dépendance temporelle et spatiale n'apparaîtra plus dans la suite. La première loi de la thermodynamique en l'absence de travail extérieur donne l'égalité :

$$\iiint_V \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} dV = \oint_{A_S} \mathbf{q}_s \cdot (d\mathbf{S}) + \iiint_V S_T dV \quad (3.9)$$

Cette relation donne avec la loi de *Fourier* Eq. (3.6) et avec l'utilisation du théorème de *Gauss* pour une surface fermée :

$$\iiint_V \left( \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (-\lambda \nabla T) \right) dV = \iiint_V S_T dV \quad (3.10)$$

L'équation générale de la chaleur sous sa forme locale s'écrit, en passant à la limite avec  $V \rightarrow 0$  :

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_p T)}_{\text{Variation d'Énergie interne}} + \underbrace{\nabla \cdot (-\lambda \nabla T)}_{\text{Diffusion thermique}} = \underbrace{S_T}_{\text{Terme source}} \quad (3.11)$$

Cette équation est valable dans :

- un milieu incompressible (Le travail extérieur au système a été exclu),
- sans convection.

Si la variation de la conductivité thermique avec la température est faible, l'équation 3.11 peut se mettre sous la forme :

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla^2 T = \frac{S_T}{\lambda} \quad (3.12)$$

Cette relation fait intervenir la diffusivité thermique  $\alpha = \frac{\rho C_p}{\lambda}$  et le Laplacien  $\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla T$ .

### 3.2 Exemples de solution analytiques

#### Conduction stationnaire dans un tube

On considère un solide ayant la forme d'un cylindre creux (Fig. 3.9). Les surfaces extérieures et intérieures sont maintenues à des températures  $T_1$  et  $T_2$ , respectivement. Les extrémités du cylindre sont isolées. La chaleur ne peut circuler que dans la direction radiale  $\mathbf{u}_r$ . Il n'y a pas de flux de chaleur selon la direction axiale  $\mathbf{u}_z$  et orthoradiale  $\mathbf{u}_\theta$  par symétrie.

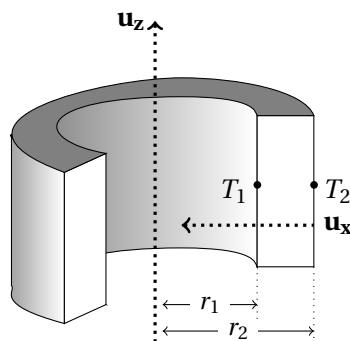


FIGURE 3.9: Cylindre creux soumis à deux températures limites fixées

Les hypothèses sont les suivantes :

1. le flux de chaleur est nul selon  $\mathbf{u}_z \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial z} = 0$
2. le flux de chaleur est nul selon  $\mathbf{u}_\theta \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial \theta} = 0$
3. le terme source est nul  $\Rightarrow S_T = 0$
4. le problème est stationnaire  $\Rightarrow \frac{\partial T}{\partial t} = 0$
5. le matériau est homogène et isotrope  $\Rightarrow \lambda = \text{cste}$

Sous ces conditions, l'équation de la chaleur s'écrit en coordonnées cylindriques :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \lambda r \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \frac{d}{dr} \left( r \frac{dT}{dr} \right) = 0 \quad (3.13)$$

L'intégration selon le rayon donne :

$$r \frac{dT}{dr} = c_1 \quad (3.14)$$

Puis :

$$T = c_1 \ln r + c_2 \quad (3.15)$$

où  $c_1$  et  $c_2$  sont des constantes à déterminer. L'application des conditions limites donne :

$$T(r = r_1) = T_1 = c_1 \ln r_1 + c_2 \quad (3.16)$$

$$T(r = r_2) = T_2 = c_1 \ln r_2 + c_2 \quad (3.17)$$

D'où :

$$c_1 = -\frac{T_1 - T_2}{\ln(r_2/r_1)} \quad (3.18)$$

$$c_2 = \frac{T_1 \ln r_2 - T_2 \ln r_1}{\ln(r_2/r_1)} \quad (3.19)$$

Le profil de température dans le cylindre creux s'écrit :

$$T(r) = -\frac{T_1 - T_2}{\ln(r_2/r_1)} \ln r + \frac{T_1 \ln r_2 - T_2 \ln r_1}{\ln(r_2/r_1)} \quad (3.20)$$

Et le flux surfacique  $\mathbf{q}_s = q_{r,s} \mathbf{u}_r$  est inversement proportionnel au rayon et s'écrit :

$$\mathbf{q}_s = -\lambda \frac{dT}{dr} \mathbf{u}_r = \frac{\lambda}{r \ln(r_2/r_1)} (T_1 - T_2) \mathbf{u}_r \quad (3.21)$$

La figure 3.10 trace la fonction Eq. (3.20) pour un tube de rayon externe  $r_2 = 0,02\text{m}$ , de rayon interne  $r_1 = 0,01\text{m}$  soumis à la température  $T_1 = 700\text{K}$  et  $T_2 = 710\text{K}$ .

### Résistance thermique équivalente

Le flux total  $\mathbf{Q}$  sur toute la surface d'un cylindre de longueur  $L$  et de rayon  $r$  est l'intégrale de  $\mathbf{q}_s$  sur cette surface :

$$\mathbf{Q} = \int \mathbf{q}_s L r_2 d\theta = \frac{2\pi\lambda L}{\ln(r_2/r_1)} (T_1 - T_2) = \frac{T_1 - T_2}{R_{cond}} \quad (3.22)$$

où  $R_{cond} = \frac{\ln(r_2/r_1)}{2\pi\lambda L}$  représente la résistance thermique conductive équivalente du solide.

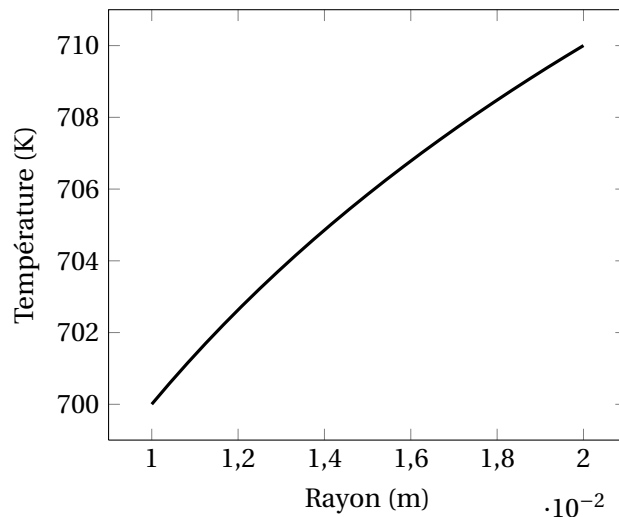


FIGURE 3.10: Profil de température dans un tube soumis à deux températures constantes ( $T_1$  et  $T_2$ )

### Conduction stationnaire dans un tube multicouche

Dans le cas d'un tube constitué d'une ou plusieurs couches de matériaux différents, on introduit, les températures au niveau des interfaces  $T_1$  et  $T_N$ .

En régime permanent, le flux de chaleur  $Q$  se conserve lors de la traversée des différentes couches et s'écrit :

$$Q = \frac{T_1 - T_2}{R_1} = \dots = \frac{T_{N-1} - T_N}{R_N} \quad (3.23)$$

avec  $R_n$  la résistance de la couche  $n$ , soit :

$$Q = \frac{T_1 - T_N}{\sum_{n=1}^N R_n} \quad (3.24)$$

### Effet d'une source d'énergie uniforme

Si le tube est soumis à une source thermique  $S_T$  (par effet Joule par exemple), le profil de température pour l'état stationnaire est obtenu en intégrant l'équation :

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (\lambda r \frac{dT}{dr}) + S_T = 0 \quad (3.25)$$

Si la conductivité thermique et la source  $S_T$  sont uniformes, l'équation 3.25 peut être intégrée de la manière suivante :

$$\int d(r \frac{dT}{dr}) = -\frac{S_T}{\lambda} \int r dr \quad (3.26)$$

Ainsi,

$$\frac{dT}{dr} = -\frac{S_T}{2\lambda} r + \frac{c_1}{r} \quad (3.27)$$

qui s'intègre en :

$$T(x) = -\frac{S_T}{4\lambda}r^2 + c_1 \ln(r) + c_2 \quad (3.28)$$

Cette solution fait apparaître un terme supplémentaire par rapport à la solution sans terme source.

Les constantes  $c_1$  et  $c_2$  sont obtenues à partir des conditions limites. Le flux est nul en  $r = r_2$  et impose :

$$c_1 = \frac{S_T r_2^2}{2\lambda} \quad (3.29)$$

. La constante  $c_2$  est trouvée par application de la condition limite  $T(r = r_1) = T_f$  sur la surface intérieure :

$$c_2 = \frac{S_T r_1^2}{4\lambda} + \frac{S_T r_2^2}{2\lambda} \ln r_1 \quad (3.30)$$

Le profil de température dans le matériau est donc :

$$T(x) = \frac{S_T}{4\lambda}(r_1 - r)^2 + \frac{S_T r_2^2}{2\lambda} \ln\left(\frac{r}{r_1}\right) + T_1 \quad (3.31)$$

Le maximum de température est obtenu sur la limite extérieure du cylindre.

#### 4. Résolution numérique de l'équation de transfert conductif

Cette section vise à présenter succinctement l'outil de résolution de l'équation de transfert conductif instationnaire, *AVTP* dans ce travail. La validation de cet outil sur des cas tests simples a été réalisée dans le cadre de la thèse de *J. Amaya* [69]. Pour les besoins de cette étude, nous avons introduit un terme source dans le code et une validation du tube chauffé est présentée.

##### 4.1 Présentation du code *AVTP*

*AVTP* est un code parallèle qui résout l'équation de transfert conductif Eq. (3.11) sur des maillages hybrides non structurés. Ce code s'appuie sur la structure de données *AVBP* [70]. L'intégration temporelle est basée sur une intégration explicite d'ordre 1 :

$$\frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} = a \nabla^2 T \quad (3.32)$$

où  $T^{n+1}$  et  $T^n$  représentent les températures à l'itération  $(n + 1)$  et  $(n)$ . Afin d'assurer la stabilité du schéma explicite, le pas de temps  $\Delta t$  vérifie la condition de *Fourier* suivante :

$$Fo = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x_{min}^2} < 0.5 \quad (3.33)$$

avec la taille caractéristique de la plus petite cellule du maillage prise égale à  $\Delta x_{min} = \sqrt[3]{Vol_{min}}$ .

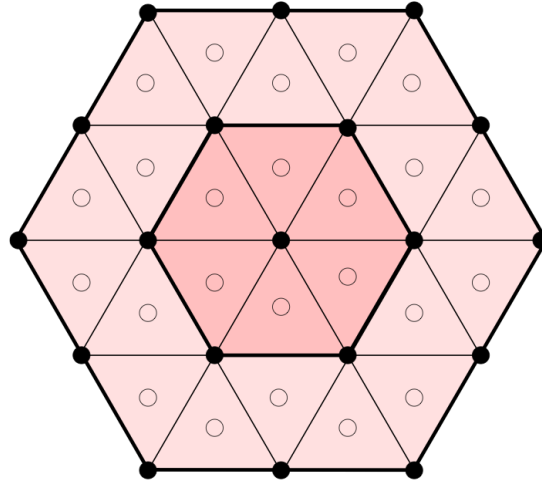


FIGURE 3.11: Noeuds et cellules utilisées pour le calcul du terme de diffusion  $\nabla^2 T$  avec l'opérateur  $4\Delta$  au noeud situé au centre - Image tirée de la thèse de N. Lamarque [71]

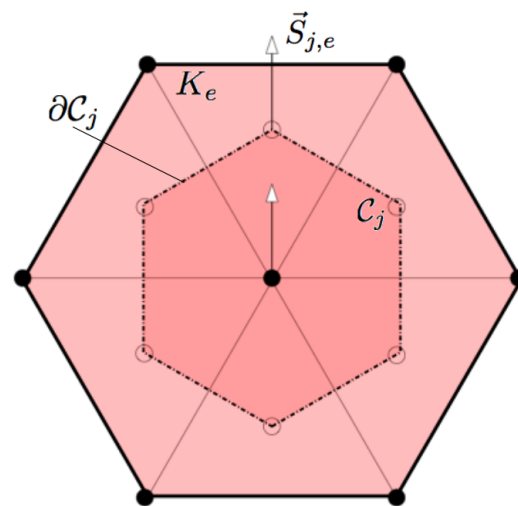


FIGURE 3.12: Noeuds et cellules utilisées pour le calcul du terme de diffusion  $\nabla^2 T$  avec l'opérateur  $2\Delta$  au noeud situé au centre - Image tirée de la thèse de N. Lamarque [71]

Le terme de diffusion ( $\alpha \nabla^2 T$ ) peut être calculé selon deux méthodes numériques. La première approche est une approche « cell-vertex » sur un élément discrétisé (Fig. 3.12). La seconde formulation est dérivée d'une méthode de type éléments finis centrés sur les noeuds de calcul.

Les détails sur ces deux opérateurs peuvent être consultés dans la thèse de Lamarque [71]. Trois types de condition limite peuvent être appliqués :

- **Dirichlet** : le mur est considéré comme isotherme,
- **Neumann** : le flux à la paroi est imposé,

- **mixte** : développée pour les couplages fluides/solides, cette condition limite impose un flux et un coefficient de relaxation  $\beta$  tels que  $q = q^{ref} + \beta(T - T^{ref})$ .

Une condition limite de type « coke » s'appuyant sur la condition limite de *Neumann* sera exposée dans la suite (Chap. 6).

#### 4.2 Validation de l'implémentation du terme source sur le cas du tube chauffé

Le cas simple de la section 3.2 permet de tester l'implémentation du terme source dans *AVTP*.

Considérons un cylindre creux d'épaisseur  $e = 0,01\text{m}$  et de rayon extérieur  $r_2 = 0,02\text{m}$ , isolé thermiquement de l'extérieur et soumis à une source thermique  $S_T = 6,5 \cdot 10^6\text{W/m}^3$  (Fig. 3.13). La température interne est imposée à  $T_1 = 700\text{K}$ .

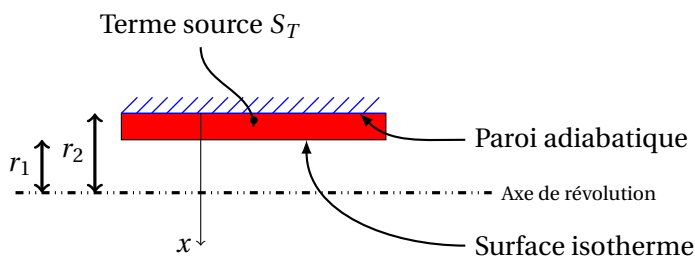


FIGURE 3.13: Configuration du calcul du tube chauffé

Les résultats sont présentés Fig. 3.14. Le code *AVTP* retrouve la courbe théorique. Le flux sur la paroi adiabatique est bien nul et la température maximale se situe bien sur cette paroi ( $e = 0,01\text{m}$ ). Cette validation est considérée suffisante pour les cas traités dans la suite.

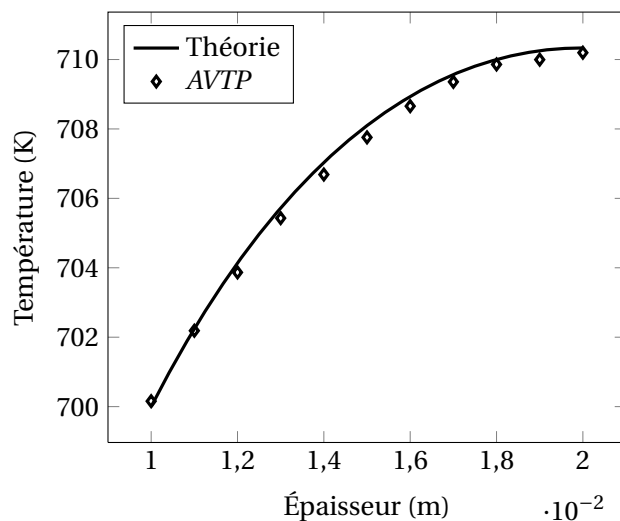


FIGURE 3.14: Effet d'une génération uniforme d'énergie dans un cylindre creux - Comparaison entre *AVTP* (symboles) et la théorie (trait pointillé)



## II Convection

Les transferts de chaleur qui s'effectuent simultanément avec des transferts de masse sont dits transferts de chaleur par convection. Ce mode de transfert est absent par définition dans les solides, mais se révèle généralement important au sein des milieux fluides.

Dans le problème qui nous intéresse, deux types de convection sont présents :

1. convection forcée sur la paroi externe des tubes,
2. convection forcée avec changement de phase sur les parois internes des tubes.

### 1. Notion de couche limite

Considérons l'écoulement d'un fluide parallèle à une plaque plane verticale (Fig. 3.15), à une vitesse uniforme  $u_\infty$ . La plaque étant immobile, la vitesse du fluide est nulle à sa surface ( $x = 0$ ).

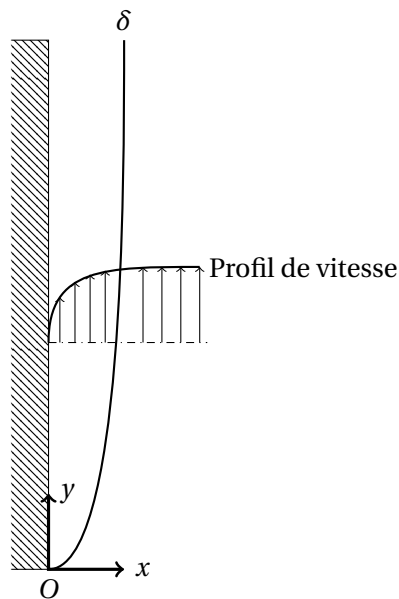


FIGURE 3.15: Couche limite dynamique d'un écoulement sur une plaque plane

Par viscosité, le fluide est ralenti sur une épaisseur  $\delta$  au-dessus de la plaque. Une compétition entre les forces d'inertie et les forces visqueuses se met en place. Considérons une particule fluide élémentaire à la paroi soumise aux forces de viscosité et à une force d'inertie. Cette particule subit un déplacement  $\delta_{diff}$  lié à la diffusion et un déplacement  $\delta_{conv}$  dû au mouvement global du fluide. Ces distances caractéristiques sont de l'ordre de :

$$\delta_{diff} \sim \sqrt{\tau_{diff}\nu} \quad (3.34)$$

$$\delta_{conv} \sim u_\infty \tau_{conv} \quad (3.35)$$

avec  $\nu$  la viscosité cinématique,  $\tau_{diff}$  le temps caractéristique de diffusion et  $\tau_{conv}$  le temps caractéristique de convection.

Loin de la plaque, le mouvement est peu perturbé et les effets liés à la viscosité sont faibles. A l'approche de celle-ci, ces effets deviennent forts et les vitesses, et donc les forces d'inertie, diminuent. Il existe une distance  $\delta$  à la paroi pour les temps caractéristiques de ces phénomènes s'équilibrent :

$$\frac{\delta_{diff}^2}{\nu} \sim \frac{\delta_{conv}}{u_\infty} \quad (3.36)$$

L'épaisseur de diffusion à l'équilibre  $\delta_{diff}$  est alors caractéristique de la couche limite dynamique et est notée  $\delta$ . La vitesse dans cette couche limite varie de 0 à  $u_\infty$ . Un nombre adimensionné permet de décrire la compétition entre la viscosité et l'inertie, il est appelé nombre de *Reynolds* :

$$Re = \frac{\text{Forces d'inertie}}{\text{Forces visqueuses}} = \frac{\tau_{diff}}{\tau_{conv}} = \frac{u_\infty \delta}{\nu} \quad (3.37)$$

Pour de grands nombres de *Reynolds*, les forces d'inertie, proportionnelles à la densité et à la vitesse, sont plus importantes que les forces visqueuses. Ces dernières ne font pas obstacle aux structures tourbillonnaires. L'équilibre des forces se fera proche de la paroi et la couche limite  $\delta$  sera faible. L'écoulement est qualifié de turbulent. Au contraire, dans les écoulements à faible nombre de *Reynolds*, les forces visqueuses empêchent le développement des tourbillons. Ces écoulements sont dits laminaires.

Un mécanisme similaire survient lorsque cet écoulement possède une température différente de la température de la paroi (Fig. 3.16). L'analogie de *Reynolds* montre que le gradient thermique est particulièrement important au voisinage de la paroi, dans une couche limite thermique qui se développe de manière analogue à la couche limite dynamique. Dans cette couche limite thermique, un équilibre thermique se met en place entre le fluide lointain et le fluide en proche paroi.

La compétition se fait entre la diffusion moléculaire de chaleur et la diffusion de la quantité de mouvement.

La distance caractéristique de la diffusion thermique s'écrit :

$$\delta_T \sim \sqrt{\tau_{cond} D} \quad (3.38)$$

avec  $\tau_{cond}$  le temps caractéristique de la conduction et  $D = \frac{\lambda}{\rho C_p}$  la diffusion thermique du matériau. Par ailleurs, pour évaluer l'efficacité relative du transport diffusif de chaleur et de quantité de mouvement, le nombre de *Prandtl* est évalué :

$$Pr = \frac{\text{Viscosité}}{\text{Diffusion thermique}} = \frac{\tau_{cond}}{\tau_{diff}} = \frac{\nu}{D} = \frac{\mu C_p}{\lambda} \quad (3.39)$$

avec  $\mu$  la viscosité dynamique.

Ce nombre ne dépend que des propriétés du fluide. Il est proche de 1 pour les gaz, et varie de 5 à 100000 pour les liquides organiques. La Figure 3.16 traduit ce phénomène. Pour des nombres de *Prandtl* faible, la diffusion de quantité de mouvement est plus lente que la diffusion thermique.

La couche limite thermique  $\delta_T$  résultante est plus fine que la couche limite dynamique  $\delta$ , dans le cas où  $Pr < 1$ . La conduction thermique s'établit dans la couche limite thermique : c'est un mode de transfert important. Par contre, si la couche limite thermique  $\delta_T$  est plus grande que la couche limite dynamique  $\delta$  ( $Pr \gg 1$ ) alors la conduction thermique est plus lente que la diffusion moléculaire et le transfert thermique par convection domine les échanges.

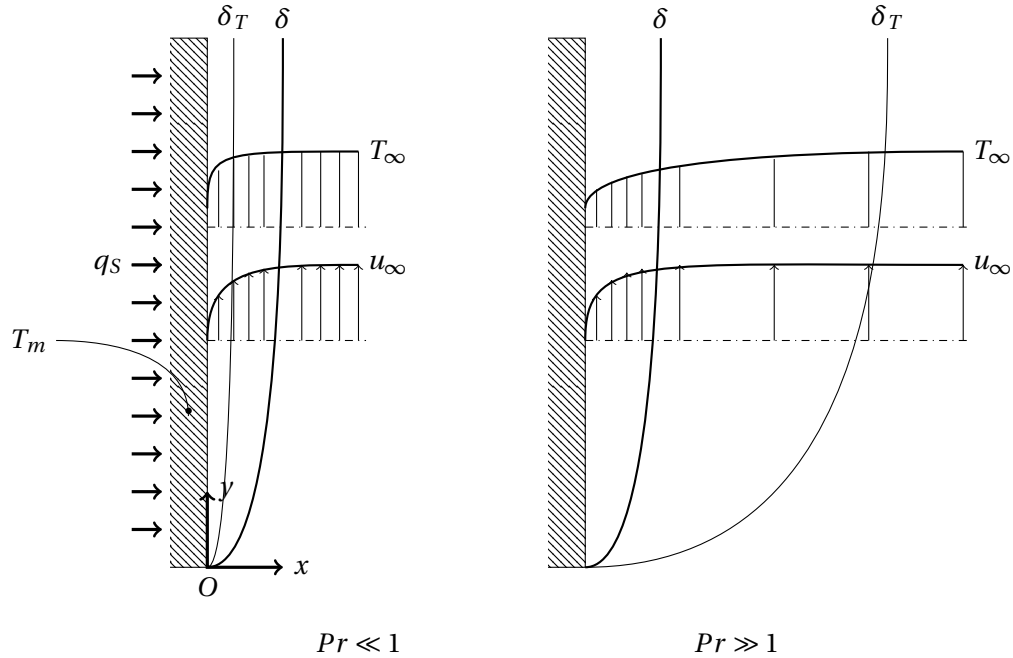


FIGURE 3.16: Couches limites dynamique  $\delta$  et thermique  $\delta_T$  d'un écoulement sur une plaque plane verticale en fonction du nombre de Prandtl  $Pr$

## 2. Loi de Newton & nombre de Nusselt

La loi de *Newton* évalue la puissance transférée à une surface mouillée  $A_S$ , à la température  $T_S$ , par un fluide à la température  $T_f$  en mouvement :

$$P_{\text{conv}} = hS(T_f - T_S) \quad (3.40)$$

où  $h$  est le coefficient de transfert convectif. Cette expression est utilisée quel que soit le régime de convection (forcée ou libre) et quel que soit le régime d'écoulement du fluide (turbulent ou laminaire). Les différences entre la convection d'un fluide en mouvement rapide, lent, ou stagnant, ainsi que les propriétés thermiques du fluide, sont incluses dans le paramètre de  $h$ .

Le coefficient  $h$  est souvent donné sous la forme d'un nombre de *Nusselt* :

$$Nu = \frac{P_{\text{conv}}}{P_{\text{cond}}} \quad (3.41)$$

où  $P_{\text{conv}}$  est la puissance transmise par convection et  $P_{\text{cond}}$  la puissance par conduction. Pour de grands nombres de *Nusselt*, les transferts par convection sont prédominants face aux transferts par conduction.

La puissance transmise par conduction étant évaluée par la loi de *Fourier* (Eq. (3.6)), le rapport de ces deux puissances permet d'évaluer le nombre de *Nusselt* :

$$Nu \approx \frac{h\Delta T}{\lambda\Delta T/\delta_T} = \frac{h\delta_T}{\lambda} \quad (3.42)$$

Une analyse dimensionnelle montre que  $Nu$  est une fonction plus ou moins complexe du nombre de *Prandtl* et du nombre de *Reynolds* :

$$Nu = f(Re, Pr) \quad (3.43)$$

Les forces d'inertie sont comparées au mécanisme de diffusion moléculaire par le nombre de *Reynolds*  $Re$  pour le régime forcé, ou de *Grashof*  $Gr$  pour le régime naturel. Si les forces d'inertie sont importantes (grand  $Re$ ), la couche limite dynamique sera mince. Si de plus le nombre de *Prandtl* est grand, la couche limite thermique sera grande comparée à la couche limite dynamique. Le nombre de *Nusselt* sera grand ( $h$  grand) et les transferts par convection seront importants comparés à la conduction. Ceci explique pourquoi les liquides, qui ont de grands nombres de  $Pr$ , transmettent mieux la chaleur par convection que les gaz.

### 3. Convection forcée ou naturelle dans un four

La convection d'un gaz sur un cylindre vertical est rencontrée dans de nombreux problèmes physiques [72]. En convection naturelle, l'écoulement loin de la surface est au repos. Dans le cas du four, les gaz chauds produits par la combustion créent, par le jet réactif central, un mouvement. Selon la force de l'écoulement induit par la flamme, le mouvement de ces gaz chauds vers les tubes s'effectue soit en régime de convection forcée, soit en régime de convection naturelle, soit en une combinaison des deux. L'évaluation du régime d'écoulement, qui détermine la manière de modéliser le transfert convectif, est donc la première étape.

Le critère de transition entre le régime forcé ou naturel est basé sur le paramètre de *Lloyd & Sparrow* [73]. Afin de comprendre ce paramètre, plaçons-nous dans le cas où un mur chauffé est immergé dans un réservoir de fluide froid (Fig. 3.17).

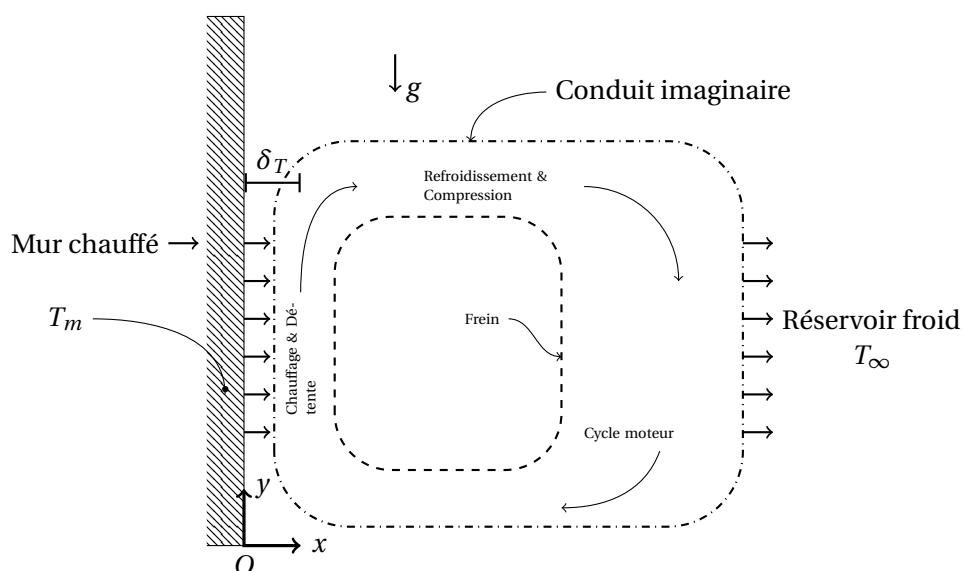


FIGURE 3.17: Convection naturelle le long d'un mur vertical

Le transfert de chaleur se fait toujours entre le mur et le réservoir et une couche limite thermique se développe sur ce mur. Pour un fluide de  $Pr \sim 1$ , l'épaisseur de cette couche limite est évaluée pour

un régime de convection forcée [72] à :

$$(\delta_T)_F \sim y Re_y^{-1/2} Pr^{-1/3} \quad (3.44)$$

avec  $(\delta_T)_F$  l'épaisseur de couche limite thermique en régime forcée et  $y$  la hauteur où elle est évaluée.

Pour le régime naturel [72] :

$$(\delta_T)_N \sim y Ra_y^{-1/4} \quad (3.45)$$

avec  $(\delta_T)_N$  l'épaisseur de couche limite en régime forcée. et  $Ra_y$  le nombre de *Rayleigh* basé sur  $y$ .

Le régime de convection est piloté par la couche limite thermique la plus mince. Le rapport des couches limites donne :

$$\text{Si } \frac{(\delta_T)_F}{(\delta_T)_N} = \frac{Ra_y^{1/4}}{Re_y^{1/2} Pr^{1/3}} > 1, \text{ Convection naturelle} \quad (3.46)$$

$$\text{Si } \frac{(\delta_T)_F}{(\delta_T)_N} = \frac{Ra_y^{1/4}}{Re_y^{1/2} Pr^{1/3}} < 1, \text{ Convection Forcée} \quad (3.47)$$

Ce rapport apparaît dans le paramètre de *Lloyd & Sparrow* qui donne un meilleur critère de transition entre les deux régime [72] :

$$\frac{Gr}{Re^2} = \left( \frac{Ra_y^{1/4}}{Re_y^{1/2} Pr^{1/3}} \right)^4 Pr^{1/3} \quad (3.48)$$

Pour des valeurs du paramètre de *Lloyd & Sparrow* inférieur à  $Pr^{1/3}$ , l'écoulement est en régime forcé. La Fig. 3.18 montre le résultat dans un diagramme  $Nu-Ra$ .

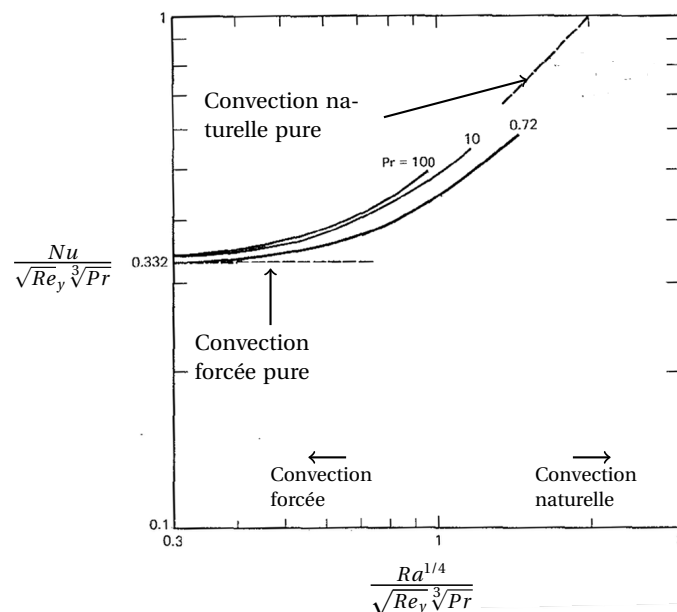


FIGURE 3.18: Critère de transition entre la convection naturelle et forcée le long d'un mur vertical [73]

#### 4. Convection forcée turbulente

Pour un cylindre dont le diamètre  $D$  est petit comparé à sa hauteur  $H$ , le transfert par convection forcée turbulente est estimé par celui d'un écoulement turbulent sur une plaque plane verticale. Le nombre de *Nusselt* moyen pour cet écoulement s'écrit [74, 75] :

$$\overline{Nu} = 0,029 Re^{0,8} G \quad (3.49)$$

avec

$$G = \frac{Pr}{(0,029/Re)^{1/2} [5Pr + 5 \ln((1 + 5Pr)/6) - 5] + 1} \quad (3.50)$$

Cette corrélation est tirée d'un développement théorique basé sur la théorie des couches limites turbulentes [72, 75].

#### 5. Transferts convectifs forcés avec changement de phase

Lorsqu'un transfert de chaleur est appliqué à une surface en contact avec un liquide, et si la température de la paroi est supérieure à la température de saturation du liquide, l'ébullition se produit sur le mur.

Il en résulte un phénomène complexe qui nécessite une connaissance approfondie des fluides et des matériaux présent. De plus, de nombreux régimes d'écoulement sont observés et rendent difficile la modélisation. Nous nous présenterons ici une description succincte des phénomènes rencontrés et de leur modélisation en termes de transfert de chaleur, illustrés avec l'expérience de *Nukiyama*, pour les écoulements diphasiques en régime d'ébullition.

##### 5.1 Régime d'ébullition

Le mécanisme de transfert de chaleur par ébullition se produit lorsque la température de surface est plus grande que la température de saturation du liquide. Le transfert d'énergie s'accompagne alors d'une transformation d'une partie du liquide en vapeur, mise en mouvement par flottabilité (convection naturelle) ou par un écoulement forcé (convection forcée).

La figure Fig. 3.19 montre les différents régimes d'ébullition. Un liquide à la température  $T_l$  initialement immobile est chauffé par un solide à la température  $T_m$ , lui-même soumis à un flux surfacique d'énergie  $q_s$ .

Le premier régime rencontré est le régime de convection naturelle. L'augmentation de la température du fluide à la surface diminue sa masse volumique par rapport au fluide environnant. Le liquide plus chaud monte sous l'effet de la flottabilité. Les bulles ne sont pas encore formées.

Le régime d'ébullition nucléée voit apparaître les premières bulles sur la surface. Celles-ci apparaissent lorsque la température du liquide atteint la température d'ébullition.

Ces bulles grandissent lorsque le flux sur la surface chauffée augmente. Les sites de production de bulles deviennent de plus en plus proches et forment des bouchons. Le régime est alors appelé régime

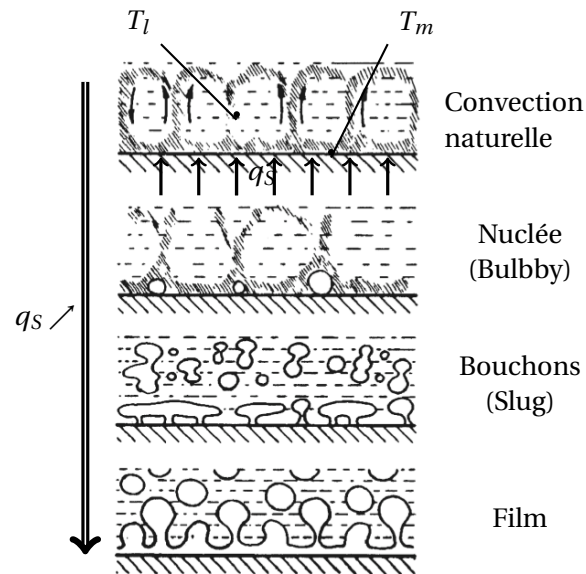


FIGURE 3.19: Régimes d'ébullition

de bouchons. C'est un régime d'ébullition transitoire entre le régime d'ébullition nucléée et le régime d'ébullition en film.

Dans le dernier régime, l'ébullition conduit à un film de vapeur surchauffée entre la surface et le liquide.

## 5.2 Régime d'ébullition en vase - Expériences de Nukiyama et de Drew & Müller

Ce passage du régime de convection naturelle monophasique au régime de film a été mené en premier par Nukiyama (Fig. 3.20).

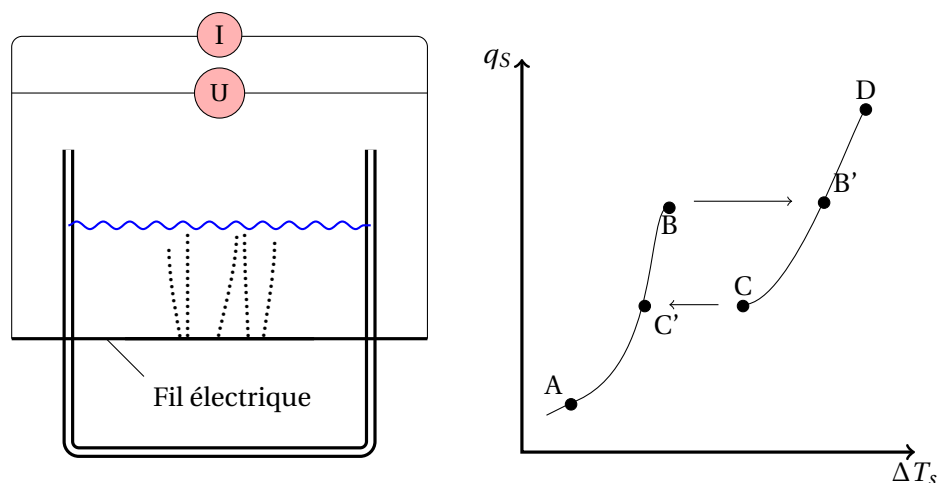


FIGURE 3.20: Courbe d'ébullition en vase à puissance imposée - Expérience de Nukiyama [76]

Dans un vase, de l'eau liquide est chauffée électriquement par un fil de Nichrome<sup>1</sup> connecté à un générateur de tension qui contrôle la puissance électrique injectée (Fig. 3.20-(a)). Cette puissance  $P$  peut être reliée au flux surfacique d'énergie transmis à l'eau  $q_S$  par la relation :

$$P = q_S S = UI \quad (3.51)$$

où  $S$  est la surface de fil chaud la paroi chaud,  $U$  est la tension délivrée par le générateur et  $I$  l'intensité.

Faisant varier  $P$ , *Nukiyama* mesure la différence entre la température de surface du fil et la température de saturation du liquide ( $\Delta T_s = T_s - T_{sat}$ ), également appelée surchauffe.

La Fig. 3.20-(b) donne l'évolution de  $q_S$  avec  $\Delta T_s$ . Cette courbe n'est pas monotone et traduit les différents régimes d'ébullition évoqués précédemment. Elle permet d'accéder à la valeur du coefficient de transfert  $h$  par la relation :

$$q_S = h\Delta T_s \quad (3.52)$$

Le premier point (A) est appelé initiation de l'ébullition, et correspond à l'apparition des premières bulles de vapeur à la surface du fil. Avant ce point, aucune bulle n'est visible, mais la température du fluide est en surchauffe ( $T_l > T_{sat}$ ).

Le régime suivant est celui de l'ébullition nucléée entre (A) et (C'). Ce régime est caractérisé par la génération de vapeur à un certain nombre de sites favorisant le développement de bulle de vapeur. Ces sites sont appelés sites de nucléation. Ce sont des petits interstices sur la surface, dans lesquelles la vapeur est piégée. En grossissant, les bulles se détachent de la surface.

Au fur et à mesure du chauffage, la fréquence de libération de ces bulles augmente. Entre le point (C') et (B), caractéristique d'un flux critique, les sites de nucléation se multiplient et les bulles isolées interagissent. Elles se font progressivement remplacer par des poches et des colonnes de vapeur. Ce régime est appelé régime de bouchons. La formation de cette vapeur sur la surface a pour effet d'isoler graduellement le liquide saturé de la paroi.

Au point (B), le fil a atteint sa température de fusion ( $\approx 1700\text{K}$ ). Le Nichrome est alors remplacé par un fil de platine dont la température de fusion est supérieure, occasionnant un saut de température brutal de (B) à (B'). Après ce point, le régime de film s'installe. La surface entière est en contact de gaz. Le flux augmente de manière proportionnelle avec  $\Delta T_s$  jusqu'à la température de fusion du fil.

En diminuant, le flux de chaleur à partir de (D), le minimum d'ébullition de film est localisée au point (C). En dessous de ce point, les films de vapeur s'effondrent et forment à nouveau des bulles isolées. L'ébullition revient dans le régime d'ébullition nucléée lorsque la température de film diminue.

Il est important de noter que dans cette expérience, la puissance est le paramètre contrôlé (en ordonnée), et la surchauffe est mesurée (en abscisse). La surchauffe est une fonction du flux et non l'inverse. Le point (C') n'est obtenu dans cette expérience que par une diminution du flux. Deux valeurs de surchauffe (C) et (C') peuvent être obtenues pour une valeur de flux imposée.

Une seconde expérience réalisée par *Drew et Müller* impose la température grâce à un tube où la circulation d'un fluide contrôle la température de paroi (Fig. 3.21). Cette fois-ci, le flux est mesuré pour une surchauffe imposée connue. Les courbes (AB) et (B'D) obtenues sont identiques à celle de

1. Alliage de Fer et de Nickel



l'expérience de *Nukiyama*, mais la courbe (BC) peut maintenant être tracée de manière continue en augmentant la surchauffe. Ce régime est le plus curieux, car le flux de chaleur diminue alors que la température de surchauffe continue d'augmenter. Cet effet est dû à des portions de plus en plus grandes de tube en contact avec le film continu de vapeur. La conductivité des gaz étant moins forte que celle des liquides, les transferts par convection se font de moins en moins bien.

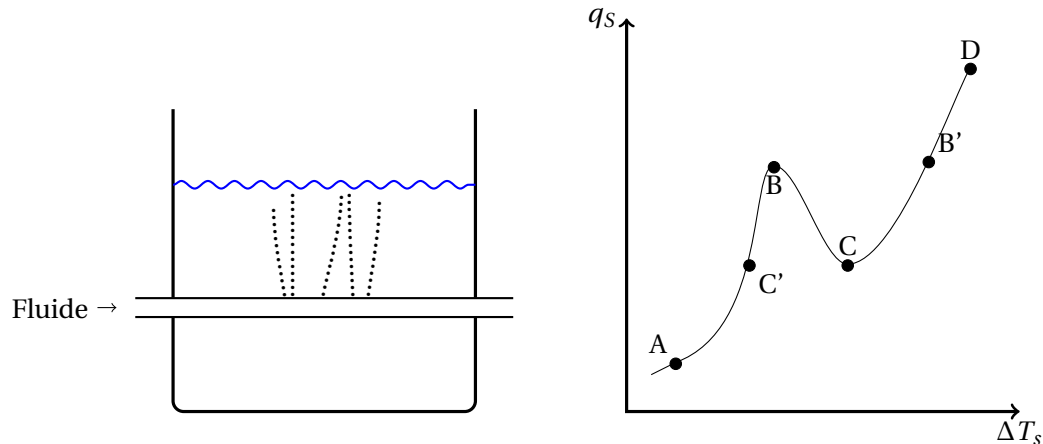


FIGURE 3.21: Ébullition en vase à température de paroi imposée - Expérience de Drew et Müller [77]

Dans la phase (BC), la vapeur est instable et est de manière intermittente remplacée par de l'ébullition nucléée. C'est un régime de transition qui s'arrête au point (C) lorsque la température de la paroi est devenue assez grande pour soutenir un film stable de vapeur à la surface du tube.

Ainsi, dans les expériences où le flux d'énergie est contrôlé (*Nukiyama*), le régime de transition (BC) ne peut-être capturé, et les points (B) et (C) ne sont accessibles que par une diminution (C) ou une augmentation (B) du flux.

### 5.3 Régime d'ébullition en conduite verticale

L'expérience de *Nukiyama* montre la complexité du transfert de chaleur avec changement de phase. Les écoulements en conduite qui nous intéressent font de plus intervenir le mouvement du fluide. Cependant, ils présentent des régimes d'ébullition similaires au cas du fluide au repos et des critères de transition analogues sont utilisés.

*Taitel & Dukler* exposent une manière de classer les écoulements diphasiques en conduite selon la distribution spatiale des différentes phases pour différents diamètres de tube et différentes propriétés du fluide [78, 79]. Les régimes d'ébullition rencontrés dans un écoulement vertical ascendant de gaz et de liquide sont présentés Fig. 3.22. Quatre régimes sont communément identifiés :

- Régime dispersé : dans ce régime, le gaz est présent sous forme de bulles dans une phase liquide continue. Les tailles de bulles ainsi que leur forme peuvent varier, mais restent très inférieures au diamètre du tube.
- Régime intermittent : le gaz prend de plus en plus de place et forme des poches de la taille du diamètre du tube.
- Régime agité : la vitesse du gaz augmente, l'écoulement devient instable. A ce moment, les forces de gravité et de frottement deviennent d'intensité équivalente au niveau du film liquide qui se forme

en paroi. Le liquide se déplace de bas en haut de manière oscillante. Ce régime est intermédiaire entre le régime intermittent et le régime annulaire.

- Régime annulaire : les deux phases sont clairement séparées. Le gaz se situe au centre du tube, tandis que le liquide forme un film à la paroi. Ce régime est généralement stable.

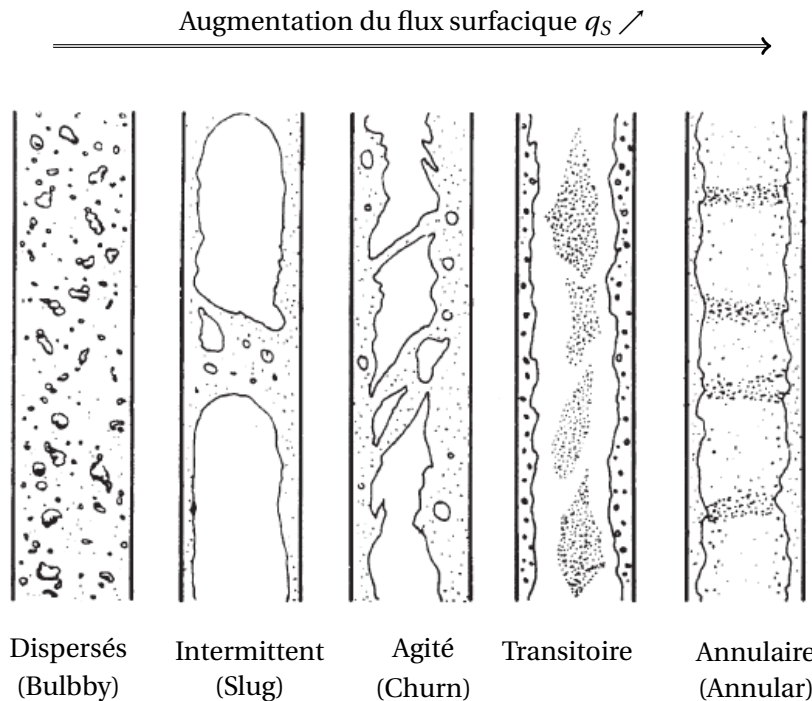


FIGURE 3.22: Régimes d'écoulement diphasique d'un fluide dans une conduite verticale [78]

Dans les fours de distillation atmosphérique, le régime d'écoulement n'est pas connu *a priori* compte tenu du changement permanent des conditions de fonctionnement. Le problème des écoulements diphasiques en conduite est de déterminer les transitions entre les différents régimes [78, 79]. Une méthode répandue consiste à établir une carte des écoulements à partir des conditions sur la vitesse du gaz par rapport à la vitesse du liquide (Fig. 3.23). Ces conditions dépendent de nombreux paramètres et changent avec les propriétés des fluides. Il résulte de cette complexité que le régime d'écoulement ne peut être établi sans une connaissance accrue de l'écoulement. De plus, les changements permanents en termes de débit, de flux de chaleur et de propriétés du pétrole brut considéré induisent des changements de carte d'écoulement. En l'absence d'une bonne caractérisation de l'écoulement diphasique dans le four de *Feyzin*, nous le considérerons comme monophasique.

Ainsi nous utilisons la corrélation établie pour les transferts thermiques convectifs d'un fluide monophasique dans une conduite, dite corrélation de *Dittus-Bolter*, avec les propriétés du liquide [80] :

$$Nu_L = 0,023 Re_L^{0,8} Pr_L^{0,4} \quad (3.53)$$

où  $Re_L$  est le nombre de *Reynolds* basé sur la vitesse du liquide et  $Pr_L$  est le nombre de *Prandtl* basé sur les propriétés du liquide.

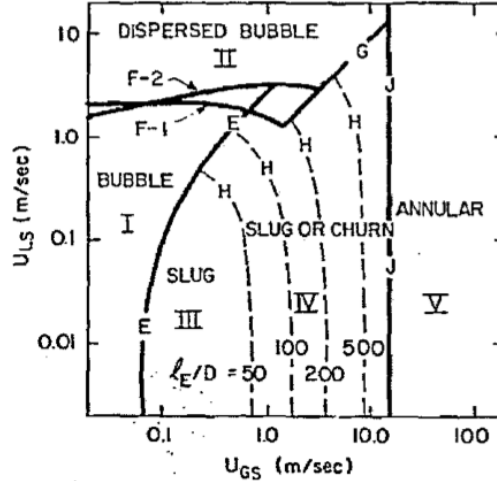


FIGURE 3.23: Carte des régimes d'écoulement diphasique air/liquide dans un tube vertical de diamètre de 5,1 cm à une atmosphère [78] -  $U_{GS}$  et  $U_{LS}$  sont respectivement la vitesse du gaz et du liquide

## 6. Transferts thermiques par convection dans un four : cas du four Feyzin

Dans un premier temps, le critère de *Lloyd & Sparrow* doit être évalué (Eq. (3.48)). Le nombre de *Rayleigh* et de *Prandtl* sont dépendants des seules propriétés physiques du gaz et peuvent être trouvés dans les tables [72]. Dans l'application visée ici, nous trouvons un paramètre de *Lloyd & Sparrow* inférieur à  $Pr^{1/3}$ , ce qui indique une convection forcée (Tab. 3.2). Le nombre de *Re* indique un régime d'écoulement turbulent.

Température des gaz brûlés ( $T_b$ )	(K)	1100
Température moyenne des tubes ( $\bar{T}_m$ )	(K)	710
Hauteur des tubes ( $H$ )	(m)	14m
$\frac{Ra}{H^3 \Delta T}$ [72]	( $m^{-3} \cdot K^{-1}$ )	18
<i>Reynolds</i> sur la hauteur	(-)	$1,6e^6$
<i>Prandtl</i> des gaz brûlés	(-)	0,68
Paramètre de <i>Lloyd &amp; Sparrow</i> [73]	(-)	0,42

TABLE 3.2: Données du point de fonctionnement de l'installation

Nous utiliserons donc une corrélation de convection forcée turbulente sur une paroi verticale pour calculer les transferts thermiques convectifs sur les tubes. Le nombre de *Nusselt* moyen basé sur la hauteur des tubes, évalué grâce à la formule Eq. (3.50), avec les valeurs de la table (Tab. 3.2) est égal à  $Nu_H = 1800$ .

La puissance reçue par convection des gaz de combustion sur les tubes est finalement égale à :

$$P_{conv,ext} = hS\Delta T = hS(T_b - \bar{T}_m) = 0,720 MW \quad (3.54)$$

avec une surface des tubes  $S = 348 m^2$  et le coefficient de transfert convectif  $h = Nu_H \cdot \lambda / H$ .

Cette puissance reçue par convection est faible comparée à la puissance dégagée par combustion évaluée précédemment à  $P_{comb} = 14,71\text{MW}$  (Chap. 2).

### III Rayonnement

Les termes « transfert de chaleur par rayonnement » et « rayonnement thermique » sont couramment utilisés pour décrire le transfert de chaleur induit par des ondes électromagnétiques.

Le rayonnement est un procédé thermique très différent de la convection et de la conduction. Du fait de sa nature ondulatoire, le rayonnement thermique peut transporter de l'énergie sur de longues distances à la vitesse de la lumière sans nécessiter un support naturel.

Une autre différence importante est la dépendance en température de ces transferts. Le transfert par rayonnement est proportionnel à la différence de température à la puissance quatre. Le transfert d'énergie radiative est donc très important dans les systèmes de combustion où la différence entre les gaz frais et les gaz brûlés est de l'ordre de 1000K.

Du fait de son caractère non local et de la complexité des mécanismes d'absorption des gaz, le rayonnement thermique est particulièrement difficile à modéliser et à calculer. Après un rappel des notions principales, l'approche qui sera utilisée dans la suite est présentée.

#### 1. Nature du rayonnement électromagnétique

Le spectre des ondes électromagnétiques est large. En fonction de sa longueur d'onde  $\lambda$ , l'énergie transportée par une onde peut être appréhendée de diverses manières. Ce spectre se décompose en plusieurs ondes se propageant dans le vide à la vitesse de la lumière,  $c_0 = 300,792\text{km/s}$ . La fréquence et la longueur d'onde sont liées par la vitesse de la lumière  $c = \frac{c_0}{n}$ , où  $c_0$  est la vitesse de la lumière dans le vide et  $n$  l'indice du milieu. Dans la suite, cet indice est supposé égal à 1. La vitesse de propagation est le produit de la longueur d'onde  $\lambda$  et de sa fréquence  $\nu$  :

$$c = \lambda \nu \quad (3.55)$$

Le rayonnement thermique est un sous-ensemble des champs électromagnétiques existants. Le spectre du rayonnement électromagnétique est illustré dans la Fig. 3.24 et s'étend des rayons gamma à haute fréquence, très énergétiques (ondes courtes), aux ondes radios (ondes longues). La lumière visible est définie comme la partie du spectre électromagnétique que nos yeux peuvent détecter. Elle se situe entre le violet à  $0,38\mu\text{m}$  et le rouge à  $0,78\mu\text{m}$ . Nos yeux sont plus sensibles au rayonnement vert qui survient à peu près au centre de cette fourchette,  $0,55\mu\text{m}$ .

Le rayonnement thermique est situé dans la partie du spectre électromagnétique allant de  $0,1\mu\text{m}$  à  $1000\mu\text{m}$ . Les autres portions du spectre sont en grande partie générées par des procédés non thermiques. Par exemple, les rayons gamma sont produits par la désintégration radioactive et les ondes radio sont produites artificiellement par des oscillations électriques. Le rayonnement considéré dans ce chapitre ne concerne que le rayonnement thermique.

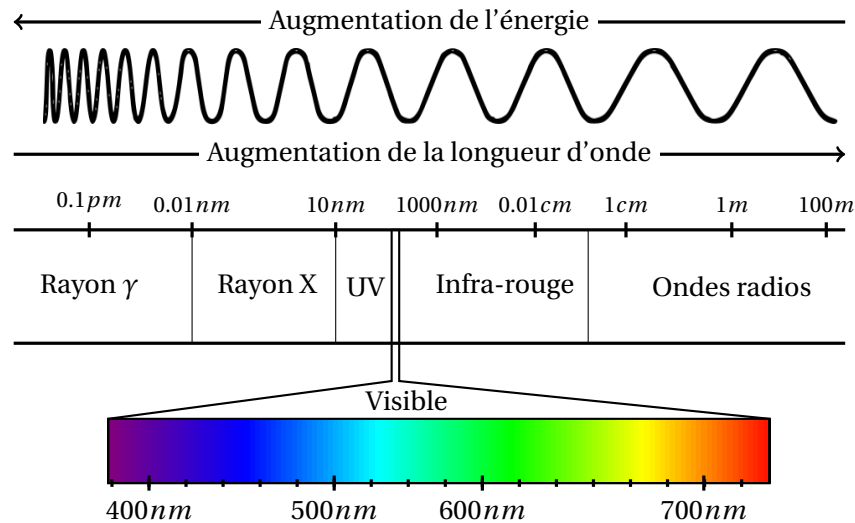


FIGURE 3.24: Spectre électromagnétique

## 2. Concepts et lois constitutives du rayonnement thermique

Avant de définir les grandeurs intégrales utiles à la résolution des transferts radiatifs à l'échelle macroscopique, quatre concepts utiles à la description des échanges radiatifs sont détaillés.

### 2.1 Équilibre thermodynamique local (E.T.L.)

Un système thermodynamique est en équilibre thermodynamique lorsqu'il est à la fois en équilibre thermique, mécanique et chimique. L'état local d'un système en équilibre thermodynamique est déterminé par les valeurs de ses paramètres intensifs, comme la pression ou la température. Il définit le minimum d'un potentiel thermodynamique, comme l'énergie libre de *Helmholtz* pour les systèmes à température et volume constant, ou l'enthalpie libre de *Gibbs* pour les systèmes à pression et température constantes.

Il est utile de différencier équilibre thermodynamique global et local. En thermodynamique, les échanges à l'intérieur d'un système et avec l'extérieur sont contrôlés par des paramètres intensifs comme la température, qui contrôle les échanges de chaleur. L'équilibre thermodynamique local signifie que ces paramètres peuvent varier dans l'espace et le temps, mais il existe un voisinage en équilibre autour de ce point, à la différence de l'équilibre thermodynamique global (E.T.G.) qui spécifie que ces paramètres intensifs sont homogènes dans tout le système. Le passage d'un équilibre local à un équilibre global est conduit par des phénomènes de transport qui tendent à minimiser le potentiel thermodynamique.

D'un point de vue radiatif, les propriétés radiatives d'un élément à l'équilibre thermodynamique local sont indépendantes de son environnement. Cet élément possède des propriétés identiques plongées au sein d'une cavité fermée isotherme à la même température.

Cette hypothèse est vérifiée dans les applications visées.

## 2.2 Corps noir

Un corps noir est un milieu opaque qui ne réfléchit aucun rayonnement. De ce fait, le corps noir :

- absorbe indépendamment de son épaisseur et de sa température, tout le rayonnement incident quelle que soit sa direction, sa longueur d'onde,
- émet un rayonnement isotrope, dont l'intensité suit la loi de *Planck*.

Un corps noir en équilibre thermodynamique dans une cavité noire isotherme absorbe plus d'énergie qu'un corps non noir (car réfléchissant). Puisqu'il est en équilibre, il doit nécessairement émettre plus d'énergie que le corps non noir. Le corps noir est un corps de référence pour tous les autres milieux.

Il n'est fait aucune autre hypothèse sur la nature de l'objet.

## 2.3 Loi de Planck

*Max Planck* a établi en 1901 une relation qui établit la dépendance de l'émission à la longueur d'onde. La loi de *Planck* définit la puissance émissive monochromatique  $E_{b,\lambda}$  telle que :

$$E_{b,\lambda} = \frac{C_1}{\lambda^5 \left[ e^{\frac{C_2}{\lambda T}} - 1 \right]} \quad (3.56)$$

où  $C_1 = 2\pi hc_0^2 = 3,742 \times 10^8 \text{ W} \cdot \mu\text{m}^4 / \text{m}^2$  et  $C_2 = hc_0/k = 1,439 \times 10^4 \mu\text{m} \cdot \text{K}$

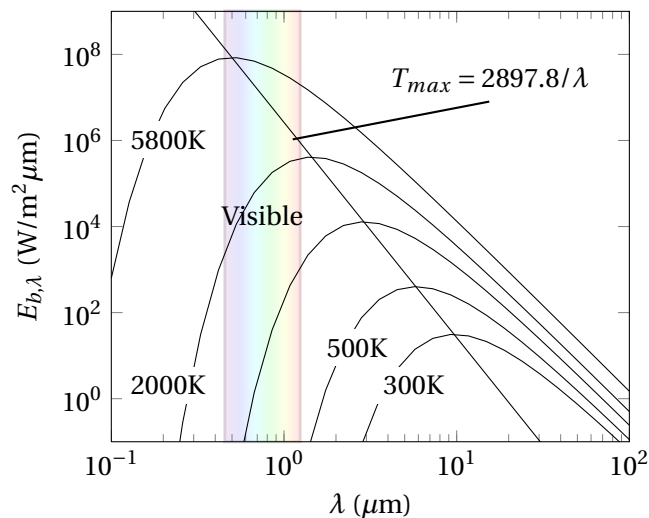


FIGURE 3.25: Puissance émissive du corps noir selon la longueur d'onde pour différentes valeurs de température - Loi de Planck

où  $h$  définit la constante de *Planck* et  $k$  la constante de *Boltzman*. Cette relation donne la distribution d'énergie d'un système à l'ETL Fig. 3.25. L'émissivité totale s'obtient par intégration de cette quantité Eq. (3.56) sur tout le spectre (cf. loi de *Stefan-Boltzman*) :

$$E_b = \int_0^{\infty} E_{b,\lambda} d\lambda = \sigma T^4 \quad (3.57)$$

Ainsi, l'aire contenue sous la courbe Fig. 3.25 représente l'émission totale du corps noir à une température donnée. Dans le domaine du rayonnement thermique  $[0,1\mu\text{m} - 1000\mu\text{m}]$ , un corps noir à la température de  $2000\text{K}$  émet plus de 90% de son énergie.

## 2.4 Loi de Stefan-Boltzman

*Stefan* et *Boltzman*, deux contemporains de *Einstein* furent les premiers (1879) à lier l'énergie émise par rayonnement d'un corps noir à sa température Fig. 3.58 :

$$E_b = \sigma T^4 \quad (3.58)$$

où  $E_b$  représente la puissance émise par un corps noir par unité de surface,  $\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{W/m}^2 \cdot \text{K}^4$  la constante de *Stefan-Boltzman* et  $T$  la température de la surface émettrice.

## 2.5 Loi de déplacement de Wien

Une autre propriété intéressante avait déjà été mise en évidence par *Whilhem Wien* en 1893. A une température donnée, il existe une longueur d'onde où l'émission du corps noir est maximale. Cette propriété découverte expérimentalement s'écrit :

$$(\lambda T)_{max} = 2897,8\mu\text{m} \cdot \text{K} \quad (3.59)$$

La constante de cette loi de *Wien* (Eq. (3.59)) est obtenue par la recherche du maximum de l'Eq. (3.56).

Pour des températures variant de  $300\text{K}$  à  $3000\text{K}$ , les longueurs d'onde maximales sont comprises entre  $\lambda_{max}(T = 300\text{K}) \approx 1\mu\text{m}$  et  $\lambda_{max}(T = 3000\text{K}) \approx 0,1\mu\text{m}$ , et contiennent la lumière visible, ce qui permet de voir les flammes.

Ces surfaces noires absorbent la quantité maximale possible de l'énergie radiative à l'équilibre radiatif, et servent de standard pour le classement de toutes les autres surfaces. Nous verrons que l'énergie émise par les différents corps est évaluée par comparaison à celle qu'émettrait le corps noir dans les mêmes conditions en introduisant un coefficient appelé émissivité.

## 2.6 Milieu opaque, transparent et semi-transparent

Lorsqu'une onde électromagnétique atteint une surface d'une nature quelconque (surface solide ou liquide, particules ou bulles d'air), l'onde peut être réfléchiée partiellement ou totalement, laissant pénétrer toute la partie non réfléchiée dans le milieu. L'onde peut être ainsi atténuée par absorption. Si l'atténuation est totale, le corps est dit opaque. Si une onde traverse ce milieu sans aucune atténuation, il est dit transparent. Tout corps permettant une atténuation partielle est appelé semi-transparent.

Cette notion d'opacité est liée à l'épaisseur du matériau traversé.

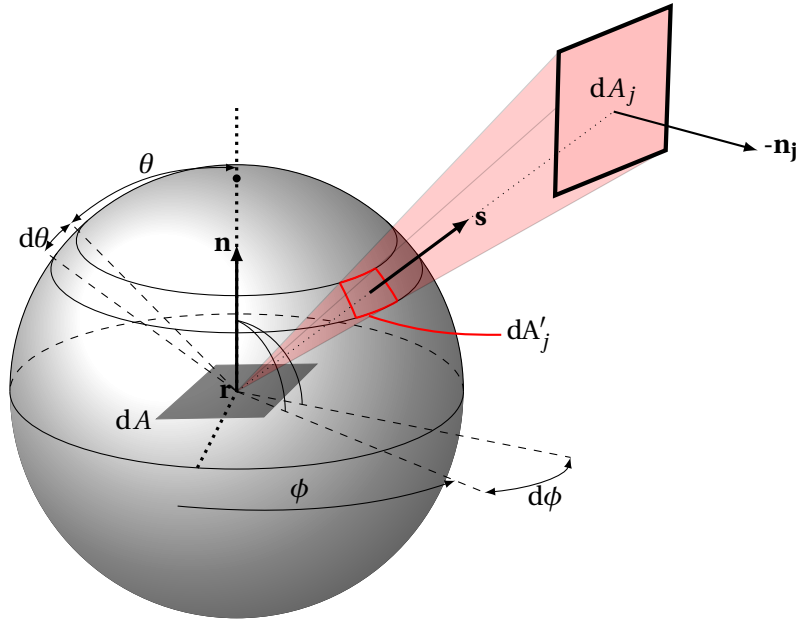


FIGURE 3.26: Direction d'émission et angle solide sur la sphère unité

### 3. Grandeurs radiatives

#### 3.1 Angle solide $d\Omega$

La nature directionnelle du rayonnement nécessite d'utiliser la notion d'angle solide, exprimé en *stéradian* ( $sr$ ) et variant entre 0 et  $4\pi$ .

Soit une surface élémentaire  $dA$  de normale  $\mathbf{n}$ , autour d'un point situé à la position  $\mathbf{r}$  voit dans la direction  $\mathbf{s}$  une surface de taille  $dA_j$ , située à une distance  $R$ . La projection de cette surface sur la sphère unité représente l'angle solide (Fig. 3.26). La surface projetée est définie par deux angles  $\theta$  et  $\phi$

Par considération géométrique, l'angle solide est défini comme la projection de la surface  $dA_j$  sur la sphère unité entourant le point  $\mathbf{r}$ . La projection de  $dA_j$ , notée  $dA'_j$ , sur cette sphère perpendiculaire à  $\mathbf{s}$  est représentée par la surface en trait rouge plein :

$$d\Omega = dA'_j = \frac{\cos\theta_j dA_j}{R^2} \quad (3.60)$$

où  $\theta_j$  est l'angle entre la normale  $\mathbf{n}_j$  de la surface  $dA_j$  et le vecteur de direction  $\mathbf{s}$ .

La surface totale de l'espace couvre une aire égale à  $4\pi$ .

#### 3.2 Luminance $I$

La luminance  $I$  permet de décrire la dépendance spatiale de l'intensité d'énergie émise ou incidente dans un milieu. Cette luminance dépend de la fréquence  $\nu$  et de la direction de l'onde considérée  $\mathbf{s}$ .

Soit  $dS$  une surface élémentaire fictive, centrée en  $\mathbf{r}$ , de normale  $\mathbf{n}$  et  $d\Omega$  l'angle solide élémentaire autour de la direction  $\mathbf{s}$  (Fig. 3.27). La luminance rayonnée en un point  $\mathbf{r}$  dans la direction  $\mathbf{s}$  à la fré-



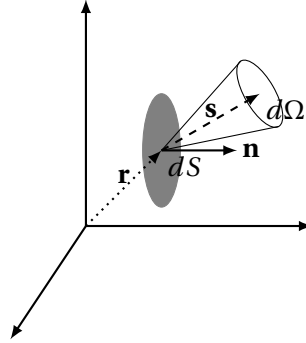


FIGURE 3.27: Luminance d'un point  $\mathbf{r}$  selon la direction  $\mathbf{s}$  traversant une surface  $dS$  de normale  $\mathbf{n}$

quence  $\nu$ , notée  $I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t)$  est la densité de puissance monochromatique  $d\Phi_\nu(\mathbf{r})$  qui traverse la surface  $dS$  pendant un temps  $dt$  :

$$I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t) = \frac{d\Phi_\nu(\mathbf{r})}{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{n})d\Omega dS dt} \quad (3.61)$$

L'intensité totale  $I(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t)$  est l'intégrale sur le spectre de  $I_\nu$  :

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t) = \int_0^\infty I_\nu(\mathbf{r}, t) d\nu \quad (3.62)$$

L'intégration spatiale de la luminance sur un hémisphère limité par une paroi placée en  $\mathbf{r}$  et de normale  $\mathbf{n}$  donne :

$$E_\nu(\mathbf{r}, t) = \int_{2\pi} I_\nu(\mathbf{r}, t) \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} d\Omega \quad (3.63)$$

### 3.3 Flux d'énergie radiative $\mathbf{q}^r$

La luminance est une fonction qui dépend de la direction de propagation et n'est donc pas un champ scalaire conventionnel. En intégrant cette luminance  $I$  (resp.  $I_\nu$ ) sur toutes les directions, le flux d'énergie  $\mathbf{q}^r$  (resp. flux spectral d'énergie  $\mathbf{q}_\nu^r$ ) qui traverse une surface de normale  $\mathbf{n}$  s'écrit :

$$(\mathbf{q}^r \cdot \mathbf{n})(\mathbf{r}) = q^r(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} \mathbf{I}(\mathbf{r}, t) (\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}) d\Omega \quad (3.64)$$

$$(\mathbf{q}_\nu^r \cdot \mathbf{n})(\mathbf{r}) = q_\nu^r(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} \mathbf{I}_\nu(\mathbf{r}, t) (\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}) d\Omega \quad (3.65)$$

et vérifie bien :

$$\begin{aligned} (\mathbf{q}^r \cdot \mathbf{n})(\mathbf{r}) &= q^r(\mathbf{r}) \\ &= \int_0^\infty q_\nu^r d\nu \end{aligned} \quad (3.66)$$

## 4. Propriétés des matériaux et modèles

Le calcul de la luminance nécessite la connaissance des propriétés spectrales du milieu. En rayonnement, le milieu est caractérisé par le coefficient d'absorption  $\kappa_\nu$ . Ce paramètre définit le spectre d'absorption du milieu en fonction de la fréquence. Il dépend de mécanismes atomiques, moléculaires et collisionnels sous-jacents. Si les solides et les liquides peuvent avoir des spectres relativement simples, les gaz présentent des spectres de raies fortement discontinus et très complexes. L'utilisation de modèles spectraux est inévitable.

### 4.1 Modélisation des propriétés spectrales des matériaux solides

Les surfaces réelles peuvent avoir un comportement radiatif complexe. Deux modèles sont utilisés pour la modélisation des propriétés spectrales des solides où la sélectivité fréquentielle et la dépendance spatiale de l'émission ne sont pas prises en compte.

#### Modèle de corps noir

Le modèle de corps noir définit l'émission d'un corps noir à l'équilibre thermodynamique. À une température donnée, le corps noir est le matériau le plus absorbant. Il émet l'énergie :

$$E_b = \sigma T^4 \quad (3.67)$$

#### Modèle de corps gris

L'émissivité d'un corps  $\epsilon$  est définie comme le rapport entre le rayonnement émis par celui-ci et le rayonnement émis par un corps noir à la même température. Ainsi, nous avons toujours :

$$0 \leq \epsilon \leq 1 \quad (3.68)$$

L'émissivité dépend de trois paramètres : la température, la fréquence, et l'angle d'émission de l'onde électromagnétique,  $\epsilon_\nu = \epsilon_\nu(T, \theta)$ .

L'émissivité totale  $\epsilon(T)$  et l'émissivité spectrale  $\epsilon_\nu(T)$  hémisphériques se définissent respectivement comme :

$$\epsilon_\nu(T) = \frac{E_\nu(T)}{E_{b\nu(T)}} \quad (3.69)$$

$$\epsilon(T) = \frac{E(T)}{E_b(T)} = \frac{\int_0^\infty \epsilon_\nu(T) E_{b\nu(T)} d\nu}{\sigma T^4} \quad (3.70)$$

où  $E_\nu(T)$  est la puissance spectrale émise par le corps gris.

Le modèle de corps gris est généralement utilisé pour caractériser un milieu diffusant la même luminance dans toutes les directions. En général, l'émissivité présente une grande dépendance en température, comme illustré Fig. 3.28.

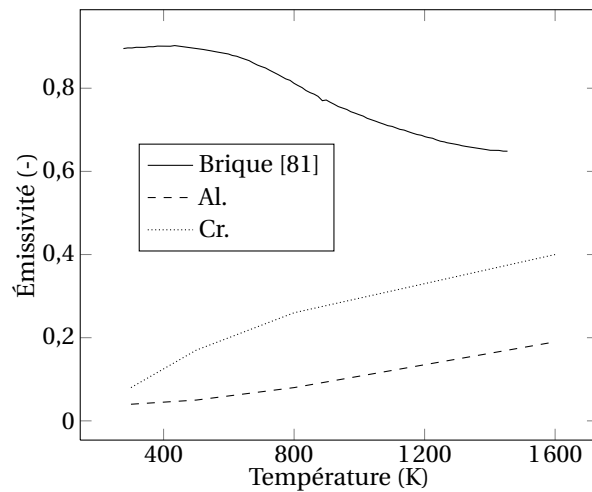


FIGURE 3.28: Variation de l'émissivité avec la température pour la brique (réfractaire) et pour deux métaux (Al et Cr)

#### 4.2 Modélisation des propriétés spectrales des gaz

La combustion d'hydrocarbures forme à haute température des produits composés de gaz actifs pour le rayonnement, comme le dioxyde de carbone  $CO_2$  ou l'eau  $H_2O$ . Un exemple de spectre d'un mélange d'azote et de dioxyde de carbone est représenté Fig. 3.29.

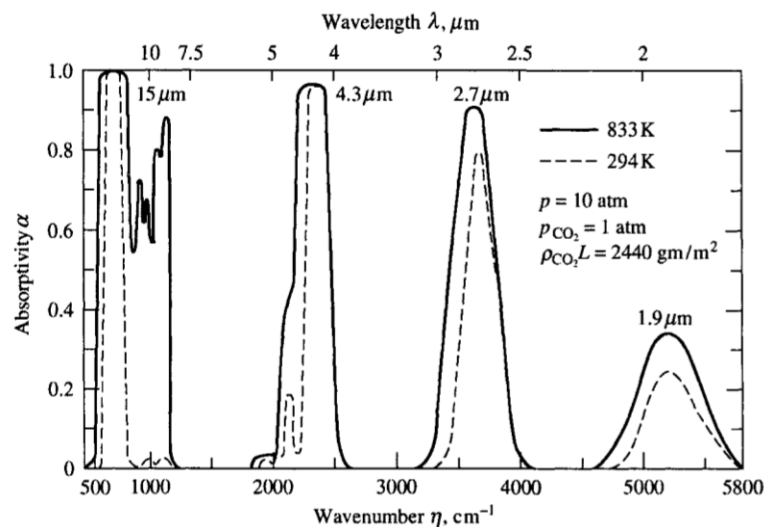


FIGURE 3.29: Spectre d'absorptivité d'un mélange isotherme d'azote et de dioxyde de carbone [82]

La présence de particules dans un milieu induit un phénomène de diffusion du rayonnement [83]. Ce problème n'est pas traité dans ce travail et seule l'absorption des gaz est considérée. Cette simplification est justifiée par la dimension des particules (de 10 nm à 100 nm dans les fours). En effet dans le régime de *Rayleigh*, où le diamètre des particules  $d$  est négligeable devant les longueurs d'onde dans l'infrarouge  $d \ll \lambda$ , le phénomène de diffusion est négligeable.

Les spectres possèdent un nombre de raies de l'ordre de  $10^6$  et nécessitent une modélisation. L'enjeu de ces modèles est de réduire le nombre de paramètres tout en conservant les propriétés fondamentales du spectre (absorption, émission, dépendance en température et en pression). Face à cet enjeu, la description exacte des propriétés spectrales est très coûteuse et extrêmement difficile.

Pour la combustion, les grandeurs radiatives utiles sont des grandeurs intégrées en fréquence. Cette intégration spectrale de la luminance du corps noir se fait par l'analyse, ou bien par tabulation sur des intervalles fréquentiels [83, 84]. Trois classes de modèles tentent de représenter cette dépendance fréquentielle du spectre [83, 85].

Le modèle le plus précis est le modèle *raie par raie* (*Line-by-Line*) et donne des résultats de référence. À l'inverse, les modèles globaux sont les plus simplifiés, ils sont moins précis, mais permettent d'atteindre des temps de calcul très réduits. Entre ces deux extrêmes, les modèles à *bandes étroites* font un bon compromis entre temps de calcul et précision. Ce type de modèle divise le spectre en bandes, auxquelles il attribue des propriétés d'absorption/émission caractéristiques pour chaque espèce, et qui sont soit constantes soit évoluant selon une fonction de forme modélisée.

### Modèles Raie par raie

Ce modèle est utilisé actuellement comme modèle de référence dans le domaine des transferts radiatifs. Les raies d'un mélange de gaz sont paramétrées par une amplitude et un profil de raie. Cela permet d'accéder à une précision élevée pour chaque raie. L'absorption à une fréquence donnée est obtenue par sommation de la contribution de chacune des raies.

La précision de ce modèle est liée à la banque des données spectroscopiques et aux hypothèses sur les profils de raies. Chaque calcul de coefficient d'absorption reconstruit le spectre d'absorption d'un mélange de gaz en sommant les contributions (près d'un million de raies dans un cas classique d'un mélange  $CO_2$  et  $H_2O$ ). La difficulté est de calculer l'effet de recouvrement de l'ensemble des raies. Ce recouvrement est à l'origine de temps de calcul toujours importants. Les simulations sont limitées à l'heure actuelle à des colonnes 1D de gaz et toujours inenvisageables sur des géométries réelles.

### Modèles à bandes étroites

Une bande étroite est un intervalle du spectre sur lequel la luminance du corps noir est considérée comme constante. Ainsi, l'évolution de la fonction de *Planck* sur une bande étroite  $\Delta\nu$  est considérée comme constante.

Les modèles à bandes étroites sont généralement des modèles statistiques [83, 84], qui représentent l'évolution de  $\kappa_\nu$  en fonction de la fréquence sous une forme simplifiée. Le modèle de Malkmus, représentatif du type de groupement de raies rencontré en combustion, permet de construire la statistique de la bande à partir du coefficient d'absorption moyen et d'un paramètre de forme du spectre [86].

### Modèles à bandes larges

Ces modèles sont une extension des modèles précédents à des intervalles plus larges en fréquence. L'hypothèse d'une variation constante de la fonction de *Planck* peut-être remise en cause. Le nombre

de bandes est réduit par rapport aux modèles précédents [87].

### Modèles globaux

L'ensemble des modèles globaux se ramène à une description du milieu comme une somme pondérée de gaz gris [88]. La description simple du coefficient d'absorption permet de réduire le temps de calcul, mais ce modèle est peu précis.

Le plus connu est le modèle « somme pondérée de gaz gris » ou *WSGG*<sup>2</sup>, qui considère une combinaison linéaire de gaz gris [89–91]. La version usuelle de ce modèle donne l'émissivité totale d'une colonne de gaz de longueur  $l$  homogène et isotherme sous la forme :

$$\epsilon(T, l) = \sum_{j=1}^N a_j(T) \left[ 1 - e^{-\kappa_j l} \right] \quad (3.71)$$

où  $\kappa_j$  et  $a_j(T)$  sont obtenus par ajustement sur les émissivités mesurées. L'exponentielle représente la transmittivité  $\tau_j = e^{-\kappa_j l}$  du gaz gris  $j$ . Ces modèles globaux trouvent leurs limites dans les cas où la dépendance fréquentielle est forte (suies non noires, surface non grises,...).

D'autres approches existent pour reconstruire un modèle global : *SLW*<sup>3</sup> [92, 93], *FS - cκ*<sup>4</sup>, *ADF* [94, 95],... Ils se distinguent principalement par les hypothèses faites lors de la définition de l'état de « référence » du système.

Les modèles globaux sont limités à des applications relativement homogènes du point de vue du rayonnement, c'est à dire où les gradients de température dans les gaz absorbants sont faibles. Cette hypothèse est souvent vérifiée dans les applications combustion, où les gaz frais peuvent être considérés comme transparents.

#### 4.3 Modèle statistique à bandes étroites avec $\kappa$ -corrélés (SNB-cκ)

Nous allons maintenant nous attacher à la description du modèle SNB-cκ utilisé dans nos calculs qui offre un bon compromis entre précision et temps de calcul [96, 97]. Ce modèle consiste à calculer la fonction  $\kappa(\nu)$  à partir de la connaissance de la transmittivité moyenne sur une bande étroite.

La moyenne d'une fonction  $F(\kappa_\nu)$  sur l'intervalle  $\Delta\nu$  s'écrit :

$$\overline{F_{\Delta\nu}} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} F(\kappa_\nu) d\nu \quad (3.72)$$

$$= \int_0^\infty F(\kappa) f(\kappa) d\kappa \quad (3.73)$$

L'équation 3.73 transforme l'intégrale sur la fréquence  $\nu$  en une intégrale sur l'absorption  $\kappa$  en introduisant la fonction de distribution  $f(\kappa)$ . Cette méthode est appelée méthode des  $\kappa$ -distribution. Elle permet de se libérer de la dépendance en fréquence, difficile à calculer, par un réordonnement

---

2. Weighted Sum of Gray Gases  
 3. Spectral Line WSGG  
 4. Full Spectrum SNBcκ

des coefficients d'absorption  $\kappa$  effectué avec l'utilisation d'une probabilité sur la valeur de  $\kappa$  dans l'intervalle  $\Delta\nu$  [98].

Sur un intervalle  $\Delta\nu$ , où  $\kappa(\nu)$  est supposé monotone, une fonction inverse  $\nu(\kappa)$  existe et permet d'écrire la densité de probabilité  $f(\kappa)$  :

$$f(\kappa) = \frac{1}{\Delta\nu} \left| \frac{d\nu}{d\kappa} \right| \quad (3.74)$$

soit :

$$f(\kappa) = \frac{1}{\Delta\nu} \sum_{i=1}^N \left| \frac{d\nu_i}{d\kappa} \right| \times [H(\kappa - \kappa_{i,min}) - H(\kappa_{i,max} - \kappa)] \quad (3.75)$$

où  $H$  est la fonction échelon unité, la valeur minimale  $\kappa_{i,min}$  et maximale  $\kappa_{i,max}$  de l'intervalle  $i$ .

En appliquant Eq. (3.73) à la transmittance d'une colonne de gaz homogène de longueur  $l$ , qui s'écrit  $\tau_\kappa(l) = \exp(-\kappa l)$ , nous obtenons la transmittance moyenne sur une bande étroite :

$$\overline{\tau}_{\Delta\nu}(l) = \int_0^\infty \exp(-\kappa l) f(\kappa) d\kappa \quad (3.76)$$

En introduisant la fonction de répartition  $g$  :

$$g(\kappa) = \int_0^\infty f(\kappa') d\kappa' \quad (3.77)$$

soit  $dg = f d\kappa$ .

La transmittivité moyenne s'écrit :

$$\overline{\tau}_{\Delta\nu} = \int_0^1 \tau(\kappa(g)) dg \quad (3.78)$$

La fonction  $g(\kappa)$  est monotone et croissante. Son inversion est plus aisée que l'inversion de  $f(\kappa)$ . Pour l'intégration numérique, une quadrature de *Gauss* est utilisée :

$$\overline{\tau}_{\Delta\nu} = \sum_{n=1}^{N_q} \omega_n \tau(\kappa(g_n)) \quad (3.79)$$

où  $g_n$  et  $\omega_n$  sont respectivement le point de quadrature et le poids associé.

Il reste à déterminer la fonction  $g$ . Le modèle de *Malkmus* permet de donner une expression analytique à cette fonction cumulative en faisant des hypothèses sur la forme des raies.

**Modèle de Malkmus** Ce modèle est représentatif des gaz rencontrés en combustion [86]. Il permet de construire statistiquement la transmittivité moyenne à partir du coefficient d'absorption moyen et d'un paramètre de forme du spectre.

Les hypothèses sont les suivantes :

– les raies ont pour distribution la loi suivante :

$$\text{pdf}(S) = \frac{1}{S} \exp\left(-\frac{S}{S^*}\right) \quad (3.80)$$

où  $S^*$  est l'intensité moyenne des raies,

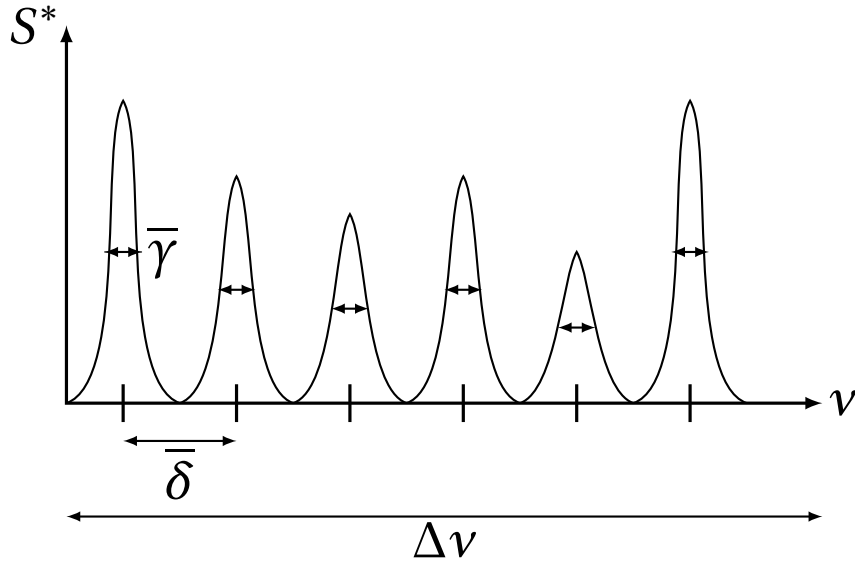


FIGURE 3.30: Modèle de distribution statistique des raies sur une bande étroite  $\Delta\nu$

- les raies ont la même largeur à mi-hauteur  $\bar{\gamma}$  (Fig. 3.30),
- les centres de raies sont distribués de manière uniforme,
- l'approche statistique (méthode des  $\kappa$ -distribution) sur le nombre de raies est permise dans la bande  $\Delta\nu$ .

La moyenne du coefficient d'absorption  $\bar{\kappa}_{\Delta\nu}$  est définie par :

$$\bar{\kappa}_{\Delta\nu} = \frac{S^*}{\bar{\delta}} \quad (3.81)$$

où  $\bar{\delta}$  représente l'écart entre deux raies.

Le paramètre de forme  $\Phi$  dépend de la largeur moyenne à mi-hauteur des raies d'absorption  $\bar{\gamma}$  et de leur espacement moyen  $\bar{\delta}$  :

$$\Phi = \frac{2\bar{\gamma}}{\bar{\delta}} \quad (3.82)$$

et la transmittivité moyenne s'écrit :

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l) = \exp \left[ \Phi \left( 1 + \left( 1 + \frac{2\bar{\kappa}_{\Delta\nu}l}{\Phi} \right)^{1/2} \right) \right] \quad (3.83)$$

La densité de probabilité de distribution  $f(\kappa)$  de ce modèle statistique, s'obtient par la transformée de Laplace inverse de  $\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l)$  :

$$f(\kappa) = \sqrt{\frac{\Phi\bar{\kappa}_{\Delta\nu}}{2\pi\kappa^3}} \exp \left[ \frac{\Phi}{2} \frac{(\kappa - \bar{\kappa}_{\Delta\nu})^2}{\bar{\kappa}_{\Delta\nu}\kappa} \right] \quad (3.84)$$

et conduit à la fonction de répartition  $g(\kappa)$  [99] :

$$g(\kappa) = \int_0^\kappa f(\kappa') d\kappa = \operatorname{erf} \left[ -\sqrt{\frac{\Phi \kappa_{\Delta\nu}}{\kappa'}} \left( 1 - \frac{\kappa}{\kappa_{\Delta\nu}} \right) \right] + \exp(2\Phi) \operatorname{erf} \left[ -\sqrt{\frac{\Phi \kappa_{\Delta\nu}}{\kappa'}} \left( 1 + \frac{\kappa}{\kappa_{\Delta\nu}} \right) \right] \quad (3.85)$$

Cette seconde fonction Eq. (3.85) permet de calculer facilement la fonction inverse intéressante, à savoir  $\kappa(g)$ . Le spectre synthétique est donc découpé en bandes étroites pour construire  $\kappa(g)$  (Fig. 3.31).

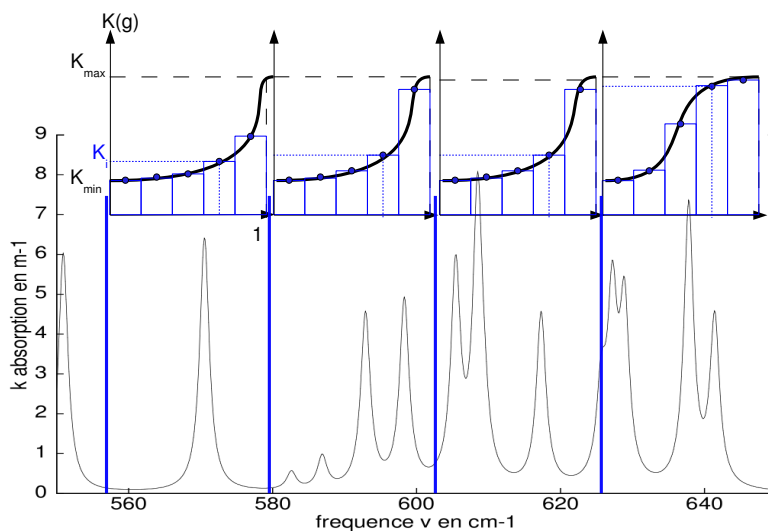


FIGURE 3.31: Découpage du spectre synthétique sur des bandes étroites et construction de la fonction cumulative  $\kappa(g)$  [100]

## 5. Équation du Transfert Radiatif (ETR)

L'Équation du Transfert Radiatif est une équation à l'échelle mésoscopique où la luminance dépend de l'espace, de deux directions (propagation et diffusion) et de la fréquence.

Considérons un volume élémentaire  $dV$  cylindrique de hauteur  $ds$  orienté dans la direction de propagation d'une onde de fréquence  $\nu$  Fig. 3.32. La composition des gaz participants est considérée comme homogène dans ce volume élémentaire. L'Équation du Transfert Radiatif fait le bilan de l'énergie entrante et sortante de ce volume. Des mécanismes d'atténuation et d'augmentation de la luminance peuvent avoir lieu au sein du volume.



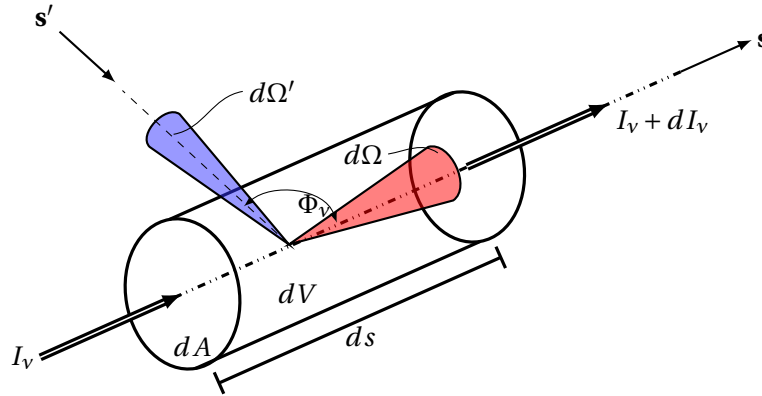


FIGURE 3.32: Coordonnées pour la dérivation de l'Équation de de Transfert Radiatif

### 5.1 Atténuation de la luminance

Deux phénomènes contribuent à la diminution locale de la luminance : l'absorption et la diffusion de l'énergie par les gaz. La diffusion spatiale de l'énergie n'est pas considérée ici.

L'absorption d'une onde dans un élément de longueur  $ds$  est proportionnelle à  $I_\nu$ . Le coefficient de proportionnalité est appelé coefficient d'absorption  $\kappa_\nu^{\text{abs}}$  et dépend de la pression, de la température et de la fréquence :

$$(dI_\nu)_{\text{abs}} = -\kappa_\nu^{\text{abs}} I_\nu ds \quad (3.86)$$

L'intégration selon la direction de propagation donne :

$$I_\nu(s) = I_\nu(0) \exp\left(-\int_0^s \kappa_\nu^{\text{abs}} ds\right) = I_\nu(0) e^{-\tau_\nu} \quad (3.87)$$

où  $I_\nu(0)$  est la luminance monochromatique entrante et  $\tau_\nu$  représente l'épaisseur optique. La fraction absorbée peut se mettre sous la forme :

$$\alpha_\nu = \frac{I_\nu(0) - I_\nu(s)}{I_\nu(0)} = 1 - e^{-\tau_\nu} \quad (3.88)$$

Il est intéressant de noter que si le milieu est gris et homogène,  $\tau_\nu = \tau$ . L'atténuation totale est exponentielle selon la direction  $\mathbf{s}$ . Cette caractéristique est reprise pour le modèle de type « somme pondérée de gaz gris » et justifie la forme de l'Eq. (3.71).

### 5.2 Augmentation de la luminance

La luminance augmente par l'émission d'énergie (contrôlée par la température) et la diffusion spatiale entrante, c'est à dire provenant des autres directions. Cette diffusion est encore négligée ici.

L'émission d'énergie dépend du volume du gaz et de sa composition. Sur le volume de contrôle représenté Fig. 3.32, l'émission dépend de la longueur du chemin optique. En équilibre thermodynamique local, le gaz émet une luminance égale à celle d'un corps noir à la même température [88] :

$$(dI_v)_{\text{emi}} = \kappa_v^{\text{emi}} I_{bv} ds \quad (3.89)$$

où la constante de proportionnalité  $\kappa_v^{\text{emi}}$ .

La loi de *Kirchhoff* implique l'égalité de coefficient d'émission et d'absorption  $\kappa_v^{\text{abs}} = \kappa_v^{\text{emi}} = \kappa_v$ .

### 5.3 Équation du transfert radiatif

La somme des contributions précédentes dans la direction  $\mathbf{s}$  permet d'écrire le bilan :

$$I_v(\mathbf{s} + ds, t + dt) - I_v(\mathbf{s}, t) = \kappa_v I_{bv}(\mathbf{s}, t) ds - \kappa_v I_v(\mathbf{s}, t) ds \quad (3.90)$$

En écrivant :

$$I_v(\mathbf{s} + ds, t + dt) = I_v(\mathbf{s}, t) + dt \frac{\partial I_v}{\partial t} + ds \frac{\partial I_v}{\partial \mathbf{s}} \quad (3.91)$$

et  $ds = c \cdot dt$ , nous obtenons l'équation du Transfert Radiatif (ETR) :

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_v}{\partial t} + \frac{\partial I_v}{\partial \mathbf{s}} = \kappa_v (I_{bv} - I_v) \quad (3.92)$$

Cette équation fait intervenir un terme de gauche dépendant de la vitesse de la lumière  $c$ . De fait, pour la majeure partie des applications ce terme peut être négligé par rapport à la vitesse caractéristique du système.

L'équation Eq. (3.92) permet de calculer le terme source radiatif total  $S_r$  pour un milieu non-diffusant par intégration de l'ETR sur l'ensemble du spectre :

$$S_r = \nabla \cdot \mathbf{q}^r = \int_0^\infty \kappa_v \left( 4\pi I_{bv} - \int_{4\pi} I_v(\mathbf{s}) d\Omega \right) dv \quad (3.93)$$

La variation d'énergie est, dans ce cas, la différence entre l'émission (premier terme de droite) et l'absorption du milieu (deuxième terme de droite).

## 6. Méthodes numériques pour la résolution de l'Équation de Transfert Radiatif

Le transfert de chaleur par rayonnement a été, probablement, le dernier mode de transfert d'énergie à être pris en compte par la communauté scientifique numérique. La raison vient essentiellement de la nature de l'équation de transfert radiatif à résoudre.

Peu de solutions analytiques simples existent. Dans le cas d'un milieu transparent, l'échange radiatif a lieu seulement entre les surfaces. L'équation de transfert radiatif n'a pas besoin d'être résolue : des techniques alternatives existent, basées sur l'utilisation de facteurs de forme [83, 101], pour calculer

directement l'échange radiatif entre les surfaces. Dans les milieux non transparents, il faut résoudre l'ETR en utilisant une discrétisation de la luminance  $I(\mathbf{s}, t)$ . Avec l'augmentation de la puissance informatique, il est possible aujourd'hui de résoudre cette équation par différentes méthodes numériques. Trois types de méthodes ont été développées :

- les méthodes intégrales,
- les méthodes différentielles,
- les méthodes statistiques.

Les méthodes intégrales résolvent l'ETR sous sa forme intégrale. Une des méthodes, appelée « lancer de rayon » ou « Ray tracing », consiste à discrétiser l'angle solide en angles élémentaires sur lesquels le rayonnement est supposé uniforme. Pour chaque rayon, le chemin est discrétisé en segments de longueur  $l$ , supposés homogènes et isothermes sur lesquels une transmittivité moyenne peut être calculée [102, 103].

Il existe également les méthodes différentielles qui discrétisent l'espace. Il s'agit notamment de la méthode aux ordonnées discrètes (DOM) [104–106] ou de la méthode des volumes finis [107].

De nombreux travaux concernant la parallélisation existent dans le domaine spatial et spectral [69, 88, 100, 108] .

Enfin, les problèmes de rayonnement thermique sont particulièrement bien adaptés à la résolution par une technique de Monte-Carlo. Cette méthode statistique particulière simule un échantillon aléatoire statistiquement représentatif de photons, de leur émission à leur absorption totale [109, 110]. L'absorption, l'émission, la diffusion sont reconstruites par les densités de probabilité issues de ces échantillons. Ces solveurs ne sont pas confrontés aux problèmes de parallélisation [88, 101, 111]. Par contre, leur coût est encore prohibitif dans le cas de géométries 3D complexes. Du fait de leur précision élevée, les résultats de ces simulations servent néanmoins de référence. Dans ce travail, la méthode aux ordonnées discrètes (DOM) qui présente un bon compromis entre précision et effort de calcul [69, 100] est utilisée et décrite en détail ci-dessous.

## 7. Méthodes aux ordonnées discrètes dans le logiciel *PRISSMA*

La méthode DOM a été implantée dans le solveur parallèle *PRISSMA* du CERFACS. L'espace est discrétisé suivant une quadrature angulaire. Sur chacune des directions angulaires, l'ETR est discrétisée par une approche de type volumes finis. La dépendance spectrale de l'équation est modélisée par des bandes étroites ou une somme pondérée de gaz gris.

Ce solveur bénéficie de différents niveaux de parallélisme décrits dans les thèses de J. Amaya [69] et D. Poitou [100].

### 7.1 Discrétisation angulaire

Dans la méthode aux ordonnées discrètes, l'équation de transfert radiatif est résolue selon  $N_{dir}$  directions discrétisant l'espace entier et le terme intégral est remplacée par la somme discrète sur toutes ces directions. À chaque direction angulaire  $\mathbf{s}_j$  est associé un poids  $\omega_j$ . Toutes les fonctions  $f(\mathbf{s})$  sont approchées par une quadrature dite angulaire :

$$\int_{4\pi} f(\mathbf{s}) d\Omega \approx \sum_{j=1}^{N_{dir}} \omega_j f(\mathbf{s}_j) \quad (3.94)$$

Les coordonnées angulaires  $\mathbf{s}_j$  sont notées  $\mathbf{s}_j = \mu_j \mathbf{i} + \eta_j \mathbf{j} + \zeta_j \mathbf{k}$  dans un repère cartésien  $R(P, \mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$ , où  $P$  représente le point courant. Différentes quadratures angulaires existent pour discrétiser l'espace.

La sélection de ces ordonnées discrètes détermine entièrement la précision recherchée selon l'effort de calcul nécessaire. Une méthodologie mathématique pour la dérivation des quadratures angulaires peut être trouvée dans [112, 113]. Les plus connus sont les schémas quadratiques suivants :

- symétriques,  $S_N$  [104, 114],
- de poids égaux,  $E_N$ ,
- de *Lebedev-Chebyshev* [115],  $LC_N$ ,
- géométriques,  $T_N$ .

Dans ce travail de thèse, les quadratures  $S_2$ ,  $S_4$ ,  $S_8$  et  $LC_{11}$  (resp. 8, 24, 80 et 96 directions) sont utilisées dans *PRISSMA* et sont décrites dans la suite.

### Schéma quadratique symétrique $S_N$

La principale caractéristique de ces quadratures est de sélectionner les directions discrètes selon les latitudes sur la sphère unité dans les trois directions (Fig. 3.33).

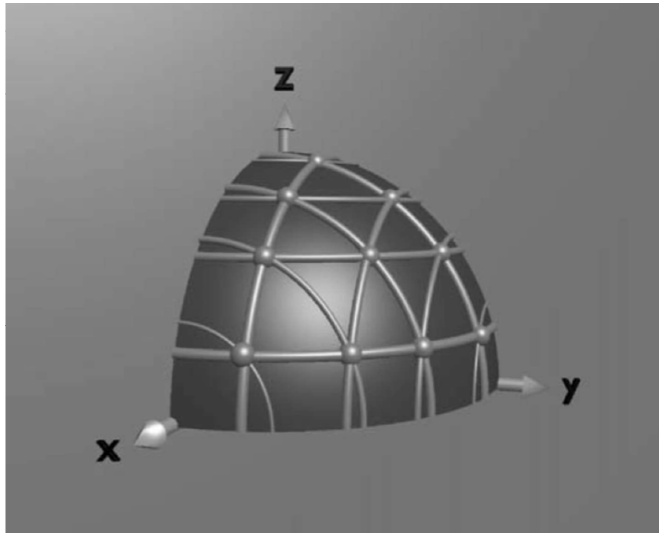


FIGURE 3.33: Directions de l'arrangement de la quadrature  $S_8$ , selon Koch et al. [113] - représentation d'un quadrant et de sa décomposition sur 10 directions, c'est-à-dire un total de 80 directions, indiquées par les sphères sur la surface

Les quadratures  $S_N$  possèdent un jeu de  $N_{dir} = N(N + 2)$  directions discrètes. Elles satisfont des relations de symétrie, notamment par rotation de  $90^\circ$  autour des axes principaux.

Il est à noter que, le choix d'une latitude fixe par construction les autres, limitant à un seul le nombre de degrés de liberté [112]. La table 3.3 donne à titre d'exemples les cosinus directeurs et les poids associés pour les quadratures  $S_2$  et  $S_4$ .

Quadrature $S_N$	Cosinus directeurs			Poids
	$\mu_j$	$\eta_j$	$\zeta_j$	
$S_2$ (symétrique)	0,5773	0,5773	0,5773	1,57079
$S_2$ (asymétrique)	0,5000	0,7071	0,5000	1,57079
$S_4$	0,2959	0,2959	0,9082	0,52359
	0,2959	0,9082	0,2959	0,52359
	0,9082	0,2959	0,2959	0,52359

TABLE 3.3: Cosinus directeurs et poids pour les quadratures  $S_2$  et  $S_4$ 

### Schéma quadratique de *Lebedev* $LC_N$

Une base orthogonale « naturelle » sur laquelle on peut décomposer un vecteur est une base composée d'harmoniques sphériques. Toute fonction continue se décompose en une série d'harmoniques sphériques. Cette décomposition, appliquée aux fonctions angulaires, est équivalente à la décomposition en série de Fourier pour les fonctions périodiques.

Les quadratures de *Lebedev* permettent d'intégrer exactement ces fonctions harmoniques sphériques. Les coefficients de poids sont identiques, seules les directions des ordonnées discrètes peuvent être ajustées.

La quadrature la plus utilisée est celle de type *Chebyshev* avec  $N = 11$  (96 directions). Le point faible de cette quadrature est le nombre élevé de directions engendrant un coût de calcul également élevé (comparable à  $S_8$ ). Cependant, sa précision en fait généralement une référence pour évaluer les autres quadratures.

## 7.2 Discrétisation spatiale

La discrétisation spatiale ne dépendant pas de la forme du spectre, l'indice  $\nu$  est omis pour ce paragraphe.

L'approximation de l'ETR en l'absence de diffusion Eq. (3.92) peut se discrétiser en coordonnées cartésiennes :

$$\mu_j \frac{dI_j}{dx} + \eta_j \frac{dI_j}{dy} + \zeta_j \frac{dI_j}{dz} = \kappa (I_j - I_b), \quad j = 1, 2, \dots, N_{dir} \quad (3.95)$$

Ce système de  $N_{dir}$  équations différentielles (non couplées en l'absence de diffusion) est résolu par une méthode de type volumes finis.

## 7.3 Intégration

On considère dans un plan la cellule  $P$  de surface  $dS$  (partie grisée Fig. 3.34). Les bords de cette surface fermée sont notés  $A_N$ ,  $A_S$ ,  $A_E$  et  $A_O$ .

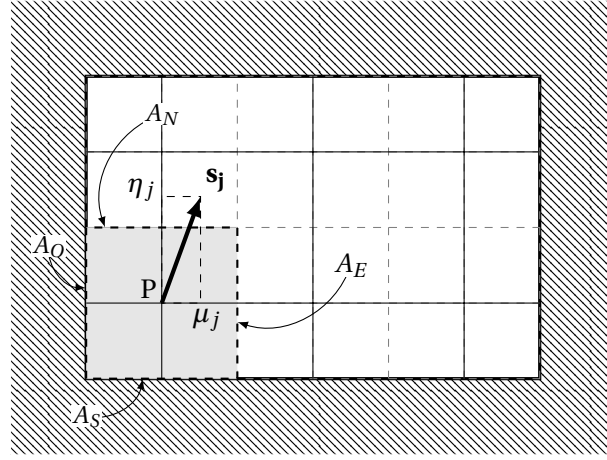


FIGURE 3.34: Schéma de la méthode des ordonnées discrètes dans un plan

En intégrant l'Eq. (3.95) par l'approximation des volumes finis sur cette surface de contrôle nous obtenons :

$$\mu_j(I_{E,j}A_E - I_{O,j}A_O) + \eta_j(I_{N,j}A_N - I_{S,j}A_S) = -\kappa(I_{P,j} - I_p^b)dS \quad (3.96)$$

où  $I_p^b$  est la luminance du corps noir en P.

Le nombre d'inconnues dans l'Eq. (3.96) peut être réduit en liant les luminances des bords de la cellule à la luminance moyenne de la cellule. La luminance  $I_{P,j}$  au point P est évaluée par moyenne barycentrique :

$$I_{P,j} = \gamma_x I_{E,j} + (1 - \gamma_x) I_{O,j} \quad (3.97)$$

$$I_{P,j} = \gamma_y I_{N,j} + (1 - \gamma_y) I_{S,j} \quad (3.98)$$

$$(3.99)$$

avec  $\gamma_x$  et  $\gamma_y$  des constantes généralement choisies égales à  $\gamma = \gamma_x = \gamma_y$ . Ce schéma a été proposé par *Carlson & Lathrop* [116].

Les valeurs de  $I_j$  sur les murs ( $I_{O,j}$  et  $I_{S,j}$ ) sont connues par les conditions limites.

En utilisant les équations 3.96-3.97-3.99, les luminances  $I_{E,j}$ ,  $I_{N,j}$  et  $I_{P,j}$  sont calculées :

$$I_{P,j} = \frac{\gamma\kappa I_p^b dS + \mu_j A_{OE} I_{O,j} + \eta_j A_{SN} I_{S,j}}{\gamma\kappa dS + \mu_j A_E + \eta_j A_N} \quad (3.100)$$

$$I_{E,j} = \frac{(\gamma-1)I_{O,j} + I_{P,j}}{\gamma} \quad (3.101)$$

$$I_{N,j} = \frac{(\gamma-1)I_{S,j} + I_{P,j}}{\gamma} \quad (3.102)$$

où

$$A_{OE} = \gamma A_O + (1 - \gamma) A_E \quad (3.103)$$

$$A_{SN} = \gamma A_S + (1 - \gamma) A_N \quad (3.104)$$

À partir des conditions limites en N et E, il est possible de continuer l'intégration vers les cellules voisines en suivant la même méthode jusqu'à atteindre l'autre condition limite.

L'intégration spatiale est suivie de l'intégration angulaire selon chaque direction  $I_{P,j}$  pour obtenir la luminance en chaque point du domaine.

Dans le cas où les surfaces sont réfléchissantes, la valeur initiale de la luminance sur le mur n'est pas connue et doit être estimée dans un premier temps. Ensuite, une procédure itérative permet de converger vers des valeurs aux conditions limites compatibles avec la solution dans le domaine.

La généralisation de cette méthode aux configurations en trois dimensions s'écrit :

$$\sum_{i=1}^{N_{face}} A_i D_{ij} I_{i,j} = \kappa (I_p^b - I_p) dV, j = 1, \dots, N_{dir} \quad (3.105)$$

où  $A_i$  est la surface de la face considérée  $i$  de volume élémentaire  $dV$ ,  $D_{ij} = (\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{n}_i)$  la projection de  $\mathbf{n}_i$  sur la direction discrétisée  $\mathbf{s}_j$ ,  $I_{P,j}$  la luminance au point  $P$  et  $I_p^b$  la luminance noire au point  $P$ .

Plusieurs schémas permettent de résoudre cette équation : le schéma exponentiel, le schéma *step* et le schéma diamant en flux moyen *DMFS*<sup>5</sup> [69, 100, 117]. Les deux derniers schémas décomposent la luminance de la cellule  $P$  de la manière suivante :

$$I_p = \gamma \overline{I_{ent}} + (1 - \gamma) \overline{I_{sor}} \quad (3.106)$$

où la luminance moyenne pondérée entrante  $\overline{I_{ent}}$  et sortante  $\overline{I_{sor}}$  s'écrivent :

$$\overline{I_{ent}} = \frac{\sum_{D_{ij}<0}^{N_{face}} D_{ij} A_j I_j}{\sum_{D_{ij}<0}^{N_{face}} D_{ij} A_j} \quad (3.107)$$

$$\overline{I_{sor}} = \frac{\sum_{D_{ij}>0}^{N_{face}} D_{ij} A_j I_j}{\sum_{D_{ij}>0}^{N_{face}} D_{ij} A_j} \quad (3.108)$$

Cette équation rappelle les équations (3.103)-(3.104) vues précédemment. Le paramètre  $\gamma$  est un facteur de poids qui définit le schéma :  $\gamma = 1/2$  pour *DMFS* et  $\gamma = 1$  pour le schéma *step*.

La luminance du point  $P$  se met alors sous la forme :

$$I_{P,j} = \frac{\gamma \kappa I_p^b dS - \sum_{D_{ij}<0}^{N_{face}} D_{ij} A_j I_j}{\gamma \kappa dS + \sum_{D_{ij}>0}^{N_{face}} D_{ij} A_j} \quad (3.109)$$

Dans la mesure où l'algorithme avance de proche en proche, il faut balayer les cellules dans un ordre particulier, si possible optimal.

### Réordonnement des cellules et balayage : « sweeping »

Dans *PRISSMA*, l'ordre de passage des cellules pour chaque direction discrète  $s_j$  est calculé *a priori* et les données sont réordonnées pour suivre cet ordre de passage. Dans le cas où les luminances aux parois sont connues, la solution pour un champ de température et d'espèces donnés est directement obtenue en un seul balayage.

Pour les maillages structurés, les mailles peuvent être balayées par ordre croissant selon les trois axes pour chaque direction discrète. Pour des maillages non structurés, les données sont rangées de façon aléatoire. L'ordre de passage est déterminé de sorte que les luminances aux faces d'entrée soient toujours connues (Fig. 3.35). Le déploiement de cette technique dans *PRISSMA* est développé dans *Joseph et al.* [108].

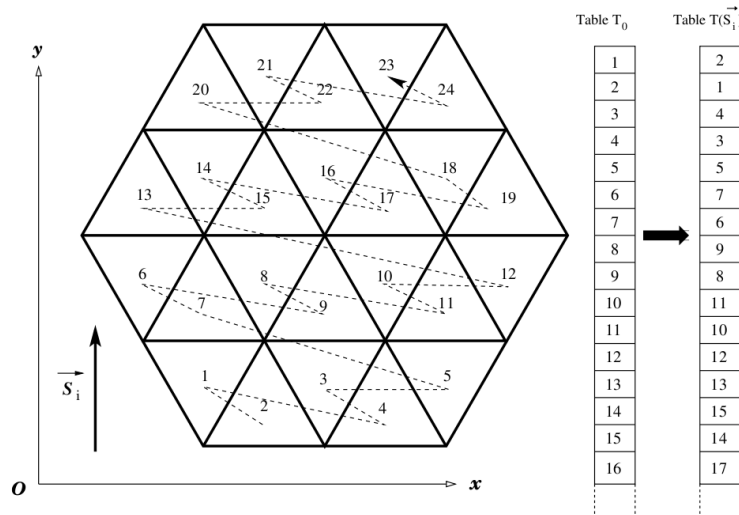


FIGURE 3.35: Principe de réordonnement des cellules pour la méthode DOM dans *PRISSMA* [100, 108]

### Exemple de calcul du rayonnement par la méthode DOM pour un cas analytique : rayonnement dans un milieu absorbant 1D avec température homogène

Un milieu gris de coefficient d'absorption  $\kappa$  à la température  $T_g$  chauffe deux parois noires froides à la température  $T_m$  et séparées d'une distance  $L$ . Le problème considéré est illustré Fig. 3.36.

Ce problème simple admet une solution analytique pour le flux du milieu gris vers les plaques froides [88, 118] :

$$\frac{q^r}{\sigma T_g^4} = 1 - 2E_3(\kappa L) \quad (3.110)$$

où  $E_3 = \int_0^1 \mu \exp\left(\frac{-x}{\mu}\right) d\mu$ .

Dans l'approximation  $S_2$ , le flux radiatif se met sous forme adimensionnée :

$$\frac{q^r}{\sigma(T_m^4 - T_g^4)} = \frac{1}{\pi} \sum_{i=1}^{N_{dir}/2} \omega_i \mu_i (\exp(-\tau/\mu_i) - \exp(-(\tau_L - \tau)/\mu_i)) \quad (3.111)$$



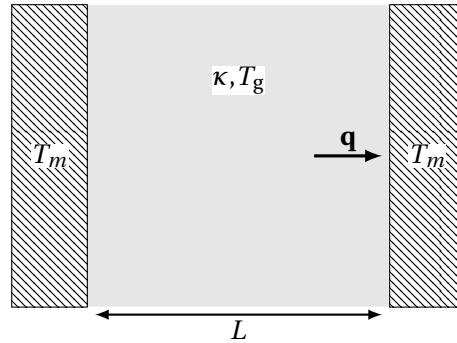


FIGURE 3.36: Rayonnement dans un milieu absorbant entre deux surfaces noires froides

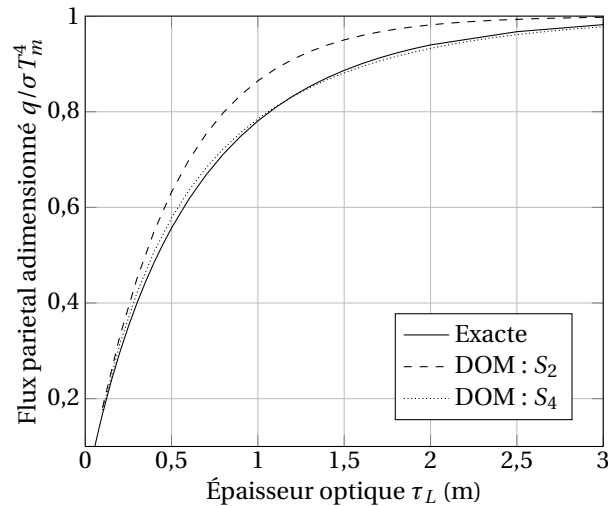
où  $\tau = \kappa y$ ,  $\tau_L = \kappa L$ ,  $\omega_i$  le poids de la direction  $i$  et  $\mu_i$  son cosinus directeur. Sur la plaque située en  $y = 0$ , à l'aide du tableau 3.3, l'équation 3.111 se réécrit pour l'approximation  $S_2$  asymétrique :

$$\frac{q^r}{\sigma(T_m^4 - T_g^4)} = (1 - \exp(-\tau_L/0,5)) \quad (3.112)$$

Pour l'approximation  $S_4$ , nous trouvons :

$$\begin{aligned} \frac{q^r}{\sigma(T_m^4 - T_g^4)} = & 0,3945012(1 - \exp(-\tau_L/0,2958759)) \\ & + 0,6054088(1 - \exp(-\tau_L/0,9082483)) \end{aligned} \quad (3.113)$$

Les résultats sont comparés Fig. 3.37 et montrent que la quadrature  $S_4$  donne d'excellents résultats sur cet exemple.

FIGURE 3.37: Comparaison des résultats  $S_2$  et  $S_4$  à la solution exacte pour le cas 1D - Quadrature  $S_2$  asymétrique et  $S_4$ 

#### 7.4 « False Scattering » et effet de rayon

Un des problèmes numériques pouvant apparaître dans la méthode des ordonnées discrètes est appelé « false scattering », conséquence d'erreurs de discrétisation spatiale [101, 117, 119]. Si un rayon

est propagé à travers une enceinte par la méthode des ordonnées discrètes, ce rayon va progressivement être diffusé numériquement au fur et à mesure de son parcours. Cette diffusion est non physique et elle peut être réduite par l'utilisation de maillages plus fins ou par l'utilisation d'un meilleur schéma spatial.

En plus de cette diffusion numérique, un autre effet connu sous le nom d'effet de rayon (« ray effect ») est une conséquence directe de la discrétisation angulaire [83]. Des oscillations peuvent apparaître en augmentant le nombre de noeuds de discrétisation à un nombre donné d'ordonnées discrètes.

Considérons une enceinte avec une source d'énergie radiative très localisée. L'énergie émise par cette source est transportée selon les directions des ordonnées discrètes qui peuvent ne pas couvrir certaines zones loin de la source d'émission. De fait, cet effet est plus important dans les régions présentant de fortes discontinuités [101]. Pour réduire cet effet sans changer la quadrature angulaire, la taille des mailles du domaine doit être augmentée.

Pour illustrer ce problème, considérons une source située à la distance  $L_x$  d'une paroi de taille  $L_y$  (Fig. 3.38). La source est visible sur la paroi à des points séparés d'une distance  $\Delta_{y,i}$  :

$$\Delta_{y,i} = L_x (\tan \theta_i - \tan \theta_{i-1}) \quad (3.114)$$

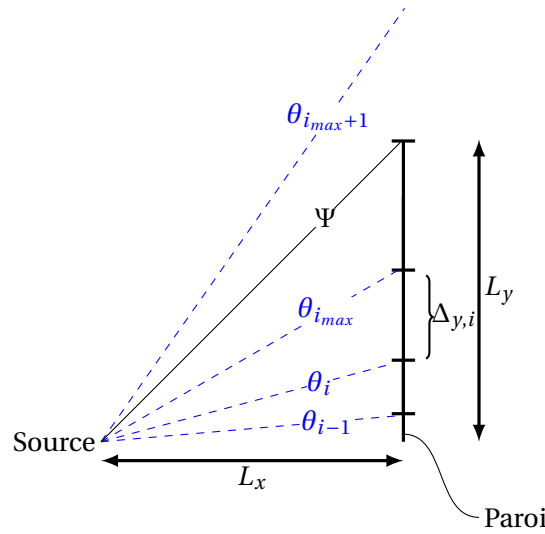


FIGURE 3.38: Effet de la discrétisation angulaire sur la résolution à la paroi

Un jeu de  $N$  ordonnées discrètes est choisi tel que l'angle entre chaque direction soit égal à  $\theta_i = (2i - 1)\pi/4N$ .

Donc, Eq. (3.114) se réécrit :

$$\Delta_{y,i} L_x \tan \frac{\pi}{2N} \left( 1 + \tan \left[ \frac{(2i-1)\pi}{4N} \right] \cdot \tan \left[ \frac{(2i-3)\pi}{4N} \right] \right) \quad (3.115)$$

Cette quantité  $\Delta_{y,i}$  augmente avec l'indice  $i$ , c'est-à-dire pour les grands angles, mais est bornée par la dimension de la paroi. Soit  $\Psi = \arctan(L_x/L_y)$  l'angle maximum que voit la source, il existe un  $i_{max}$  tel que :

$$\theta_{i_{max}} < \Psi < \theta_{i_{max}+1} \quad (3.116)$$

Par un développement limité autour de  $\Psi$  (si le nombre de quadrature est suffisamment grand  $N \gg 1$ ), la distance entre les différents points est de l'ordre de :

$$\Delta_{y,i} \approx L_x \tan \frac{\pi}{2N} \left[ 1 + \left( \frac{L_y}{L_x} \right)^2 \right] \quad (3.117)$$

La longueur  $\Delta_{y,i}$  est discrétisée par  $m$  mailles de taille  $\delta$ ,  $\Delta_{y,i} = m\delta$ , où  $\delta$  est l'ordre de grandeur de la taille des mailles qui permet d'éviter l'effet de rayon. Pour  $N$  ordonnées discrètes, nous avons donc le critère :

$$\delta \approx L_x \frac{\pi}{2Nm} \left( 1 + \left( \frac{L_y}{L_x} \right)^2 \right) \quad (3.118)$$

Pour réduire la diffusion par le « false-scattering » et l'effet de rayon, le maillage doit être raffiné en augmentant l'ordre de la quadrature [83, 108, 119].

## 8. Rayonnement et autres transferts thermiques

Cette section propose de discuter, sur un cas simple, l'importance relative du rayonnement par rapport aux autres modes de transfert.

Pour comparer le transfert radiatif aux autres modes de transfert, le coefficient de transfert  $\overline{h_{rad}}$  est introduit. Ce terme est analogue au coefficient de transfert défini dans la loi de *Newton*  $\overline{h}$  (Sec. II). L'importance relative de chacun de ces modes est évaluée par comparaison de ces coefficients.

On considère une surface grise  $A_s$  d'émissivité  $\epsilon$  à la température  $T_s$  soumise à des échanges convectifs et radiatifs avec le milieu ambiant non absorbant à la température  $T_\infty$  et avec un corps noir à la température  $T_b$  (Fig. 3.39).

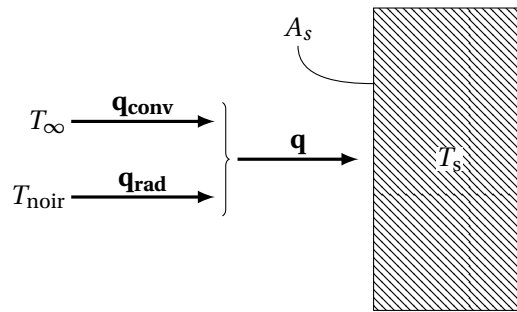


FIGURE 3.39: Schéma des flux transférés à une surface grise

Le taux de transfert de chaleur par convection est :

$$q_{conv} = \overline{h} A_s (T_s - T_\infty) \quad (3.119)$$

Du point de vue radiatif, la surface est supposée n'échanger de l'énergie qu'avec un autre corps noir de température  $T_b$ . Alors, le taux de transfert de chaleur par rayonnement est :

$$q_{rad} = \epsilon A_s \sigma (T_s^4 - T_b^4) \quad (3.120)$$

La définition de  $\overline{h_{rad}}$  s'obtient par factorisation de la différence de température telle que :

$$q_{rad} = \overline{h_{rad}} A_s \sigma (T_s - T_b) \quad (3.121)$$

avec

$$\overline{h_{rad}} = \epsilon \sigma (T_s^2 + T_b^2) (T_s + T_b) \quad (3.122)$$

Si les températures  $T_s$  et  $T_b$  sont relativement proches, une approximation raisonnable serait :

$$\overline{h_{rad}} \approx 4\epsilon\sigma \overline{T}^3 \quad (3.123)$$

où  $\overline{T} = (T_s + T_b)/2$ .

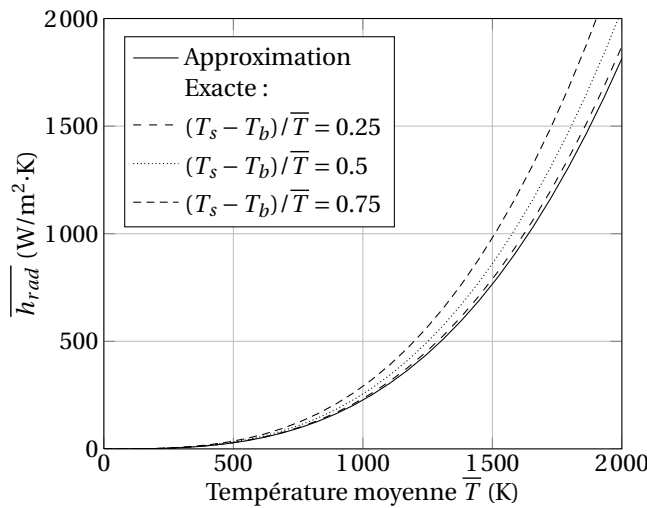


FIGURE 3.40: Comparaison des coefficients de transfert  $\overline{h_{rad}}$  calculés avec Eq. (3.121) et Eq. (3.123)

La Fig. 3.40 illustre les formules exactes et approchées pour le coefficient  $\overline{h_{rad}}$ , pour  $\epsilon = 1$  et trois valeurs de température normalisée  $(T_s - T_b)/\overline{T}$ . L'accord est presque parfait quand l'écart de température est inférieur à 30% de la température moyenne.

Comme la convection et le rayonnement sont simultanés, le taux net de transfert de chaleur à la surface est :

$$q = q_{rad} + q_{conv} = \epsilon A_s \sigma (T_s^4 - T_b^4) + \overline{h} A_s (T_s - T_\infty) \quad (3.124)$$

Si la température du corps noir est égale à celle du milieu ambiant  $T_b = T_\infty$  alors Eq. (3.124) devient :

$$q = \overline{h_{eff}} A_s (T_s - T_\infty) \quad (3.125)$$

avec  $\overline{h_{eff}} = \overline{h_{rad}} + \overline{h}$  le coefficient de transfert effectif.

La Fig. 3.41 montre comment le coefficient de transfert de rayonnement thermique varie avec la température moyenne. Les plages typiques des coefficients de convection libre et forcée sont également indiquées. Le rayonnement a un effet important dans presque tous les problèmes où les températures sont élevées comme dans les systèmes de combustion. Il peut devenir important dans le cas où la convection est naturelle. Cependant, il sera négligeable dans les problèmes de convection forcée à des températures modérées.

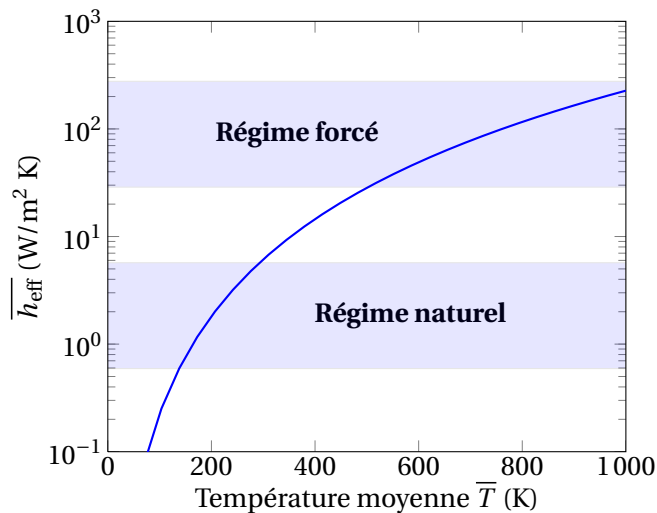


FIGURE 3.41: Évolution du coefficient de transfert effectif  $\overline{h_{eff}}$  avec la température moyenne Eq. (3.125) - Les zones typiques des coefficients en régime forcé et en régime libre sont superposés

## 9. Mesure du rayonnement incident

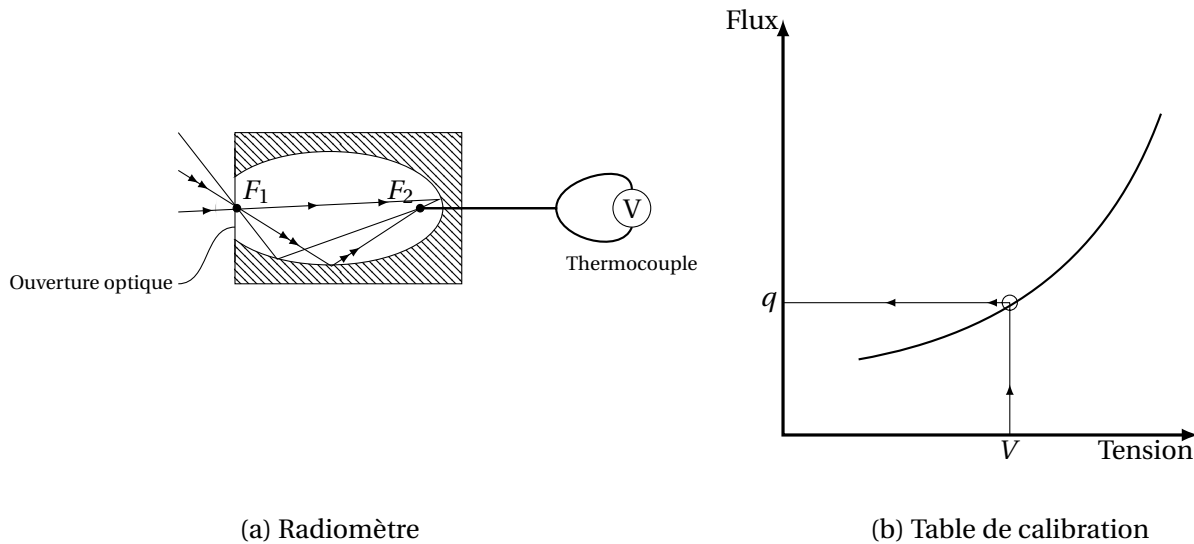
Le flux de chaleur est défini comme la quantité de chaleur transférée par unité de surface et de temps. C'est une grandeur dérivée car elle implique, en principe, de connaître deux quantités : le montant du transfert de chaleur par unité de temps et la surface sur laquelle ce transfert de chaleur s'effectue. En pratique, le flux de chaleur est mesuré par une variation de température provoquée par son effet sur un capteur dont l'aire est connue.

Un dispositif classique pour mesurer des différences de températures, et donc un flux, est appelé thermocouple. La mesure de température est basée sur l'effet thermoélectrique découvert par *Seebeck* [120, 121]. Le principe est le suivant : deux métaux différents soudés entre eux à leurs deux extrémités à des températures différentes, constituent un couple thermoélectrique, siège d'une force électromotrice. Cette force électromotrice est mesurable. En liant la force électromotrice à la différence de température entre les deux soudures, on réalise une table de calibration. La connaissance d'une température et de cette table permet d'accéder par la mesure de la tension à la seconde température.

Nous souhaitons mesurer le flux radiatif incident uniquement. Dans cette étude, un flux mètre ellipsoïdal a été utilisé pour capter le rayonnement incident dans le four (Fig. 3.42). Une ouverture optique est située à un foyer  $F_1$ . Comme le dispositif est une ellipse, le rayonnement extérieur entre par le foyer  $F_1$ , se réfléchit sur la paroi et atterrit au foyer  $F_2$ . L'idée du capteur est de venir placer un thermocouple au foyer  $F_2$ . Le radiomètre ellipsoïdal est fermé, le thermocouple en  $F_2$  n'est pas exposé aux gaz chauds et donc est isolé des flux convectifs.

La température du dispositif est maintenue constante par un flux continu d'azote s'écoulant autour.

Afin d'établir la loi entre le flux radiatif extérieur et la force électromotrice extérieure, ce radiomètre est plongé dans une cavité isotherme. Le flux entrant dans le dispositif est imposé par la cavité isotherme et permet de définir parfaitement l'émission arrivant sur le capteur par la théorie de *Planck* (Eq. (3.58)).



(a) Radiomètre

(b) Table de calibration

FIGURE 3.42: Schéma d'un radiomètre ellipsoïdal

La cavité ellipsoïdale dans les conditions de mesures donne accès à une tension qui, par lecture de la loi de calibration, donne accès au flux. Une méthode pour calibrer ce dispositif est donnée [122].

## 10. Rayonnement thermique d'un four : Application au cas industriel *Feyzin*

Le code *PRISSMA* est appliqué ici à la configuration de *Feyzin* dont on a modélisé la combustion par *CANDLE* (Chap. 2). La comparaison des flux radiatifs avec les mesures sur site permet d'évaluer la précision de la chaîne *PRISSMA / CANDLE*. Deux paramètres ont été testés pour le calcul radiatif :

1. le nombre de directions, défini par la quadrature spatiale ( $S_4, S_8, LC_{11}$ ),
2. la température des murs réfractaires.

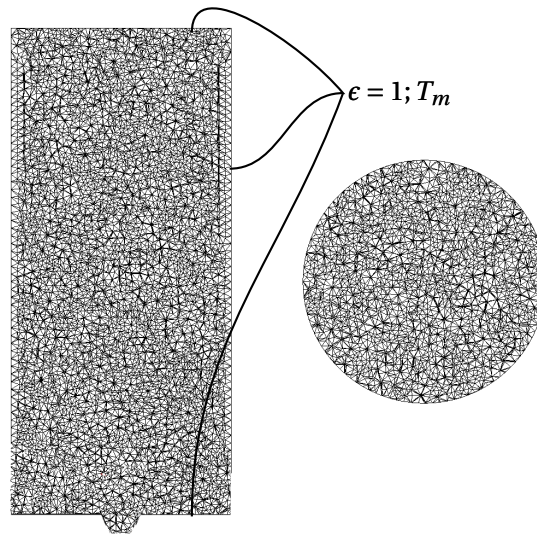
### 10.1 Configuration

Le domaine utilisé par *PRISSMA* est le même que celui utilisé précédemment par *CANDLE* (Chap. 2 et Fig. 3.43). Le réfractaire de l'enceinte est considéré comme un corps noir d'émissivité  $\epsilon = 1$ . Le modèle spectral utilisé est le modèle *SNB- $\kappa$*  avec 5 points de quadrature pour chaque bande spectrale.

Les différents cas d'études sont résumés dans le tableau 3.4.

	Cas				
	1	2	3	4	5
<b>Quadrature spatiale</b>	$S_4$	$S_8$	$LC_{11}$	$LC_{11}$	$LC_{11}$
<b>Température du réfractaire <math>T_m</math></b>	300	300	300	750	1000

TABLE 3.4: Cas tests pour le four *Feyzin*



(a) Coupe verticale (b) Coupe horizontale

FIGURE 3.43: Coupes du maillage sans tubes utilisé pour le calcul du rayonnement par PRISSMA de la flamme CANDLE

## 10.2 Solution radiative

La solution *PRISSMA* du cas 4 est représentée Fig. 3.44. Les gaz chauds autour de la flamme émettent visiblement une énergie importante.

Les profils de température et de terme source radiatif dans le plan  $h = 3m$  sont représentés Fig. 3.45. Le maximum des échanges se produit là où le terme source change de manière importante (entre 0,5 et 0,8m), c'est à dire dans une zone intermédiaire entre les gaz chauds et les gaz froids où les gradients de température sont maximums. Ce terme source est important autour des gaz rayonnants chauds et tend vers 0 vers les parois réfractaires où les gradients de température sont faibles. Le terme source devient négatif à cette hauteur entre 0,75 et 1m. Dans cet intervalle, les gaz sont de concentration et de température intermédiaire. Ils absorbent de l'énergie des gaz chauds au centre de la flamme, mais émettent moins d'énergie.

### Influence de la quadrature angulaire

Le choix de la quadrature spatiale est important, car celle-ci détermine le niveau de précision des résultats.

La Figure 3.46 illustre l'effet de rayon sur les flux radiatifs obtenus avec la quadrature  $S_8$ . Le problème étant axisymétrique, la valeur du flux radiatif devrait être indépendante de l'angle.

Pour en avoir une meilleure vision, ces flux sont extraits sur un cercle en ( $r = 1m$ ,  $h = 7m$ ) et tracé Fig. 3.47 pour trois quadratures testées. Le flux radiatif issu du calcul  $LC_{11}$  subit moins l'effet de rayon que les autres quadratures angulaires.

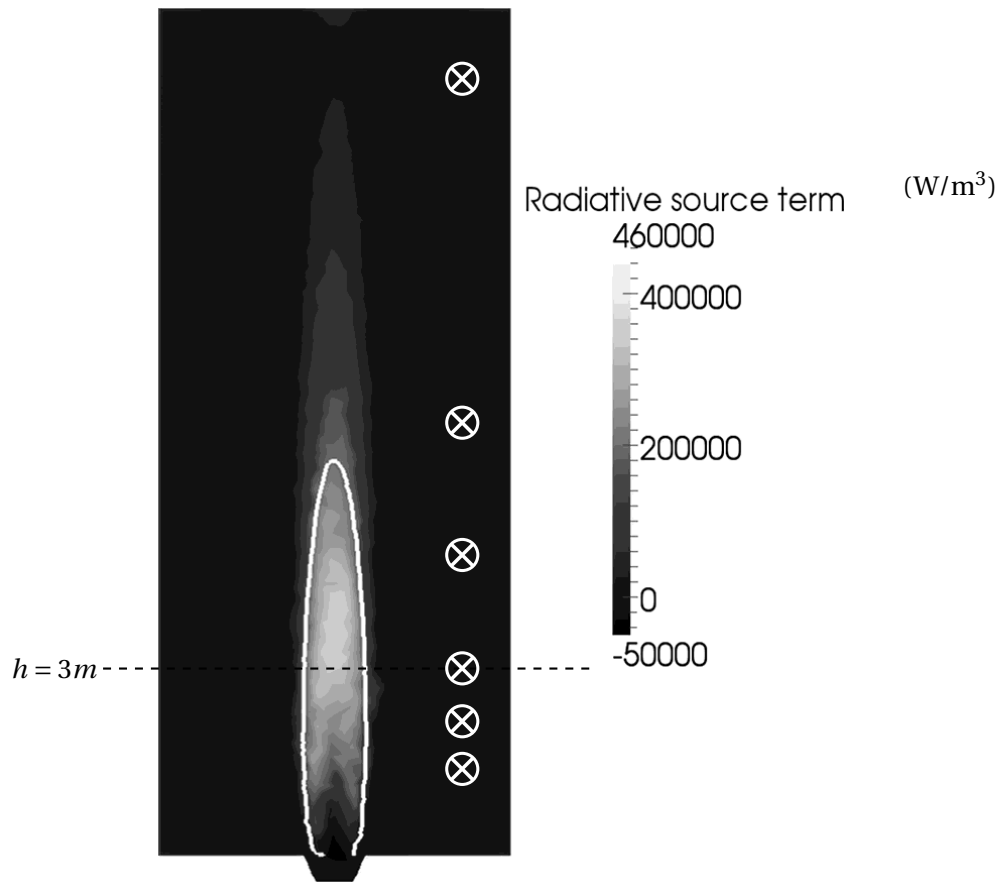


FIGURE 3.44: Champ du terme source radiatif  $S_r$  pour le cas 4 dans un plan vertical - Les symboles  $\otimes$  localisent les mesures de flux incidents effectuées sur site

En effet, la solution pour éviter ce problème est d'augmenter le nombre de directions angulaires [112].

Pour un nombre de directions relativement équivalent, et donc un effort numérique équivalent, la résolution est grandement améliorée pour la quadrature  $LC_{11}$  par rapport à  $S_8$ . Dans notre cas d'étude, la connaissance du flux radiatif pariétal est primordiale et explique le choix porté sur la quadrature  $LC_{11}$  dans les prochains calculs.

### Influence de la température des parois réfractaires

Afin de quantifier l'influence de la température du réfractaire sur le calcul radiatif, les résultats sont confrontés à des mesures de flux incident prises dans les conditions de fonctionnement. Les coordonnées des points de mesures sont rappelées dans Tab. 3.5. Les deux températures testées sont choisies proches des températures des tubes ( $\approx 750K$ ) et du réfractaire ( $\approx 1000K$ ).



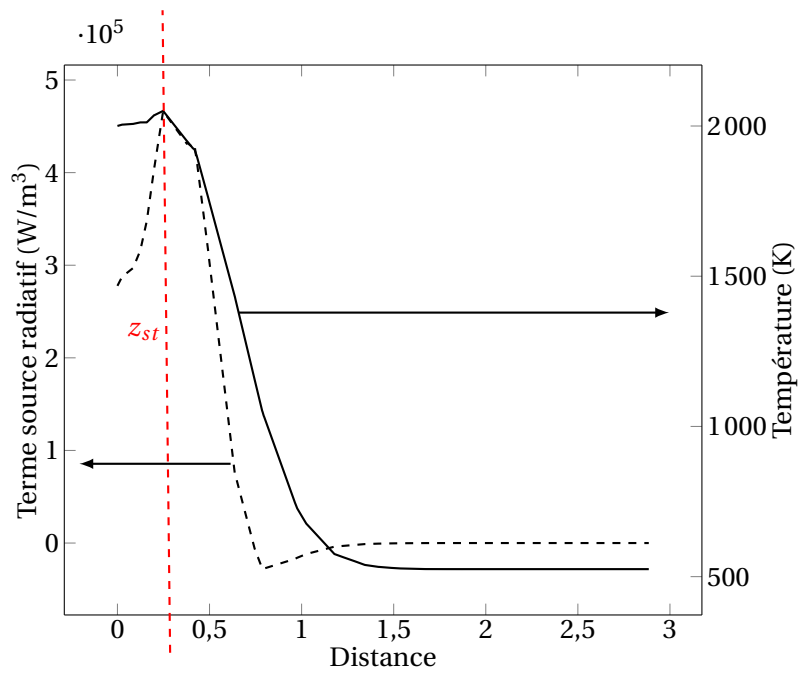


FIGURE 3.45: Profils de température et de terme source radiatif  $S_r$  à la hauteur de  $h = 3\text{m}$

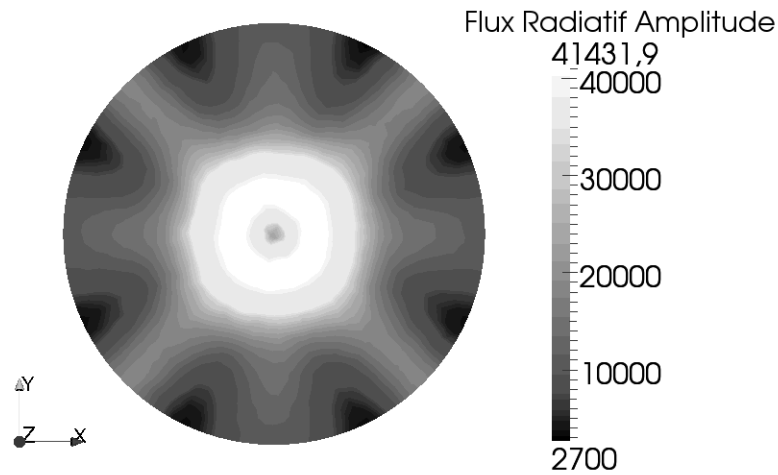


FIGURE 3.46: Amplitude du flux radiatif  $q^r$  dans une coupe horizontale à la hauteur  $h = 7\text{m}$  pour la quadrature angulaire  $S_8$

Numéro du point	1	2	3
Coordonnées (x;y;z) en (m)	(2,385;0,1;370)	(2,385;0;2)	(2,385;0;3)
Numéro du point	4	5	6
Coordonnées (x;y;z) en (m)	(2,385;0;4,5)	(2,385;0;7,6)	(2,385;0;13,6)

TABLE 3.5: Coordonnées des points de mesures des flux incidents

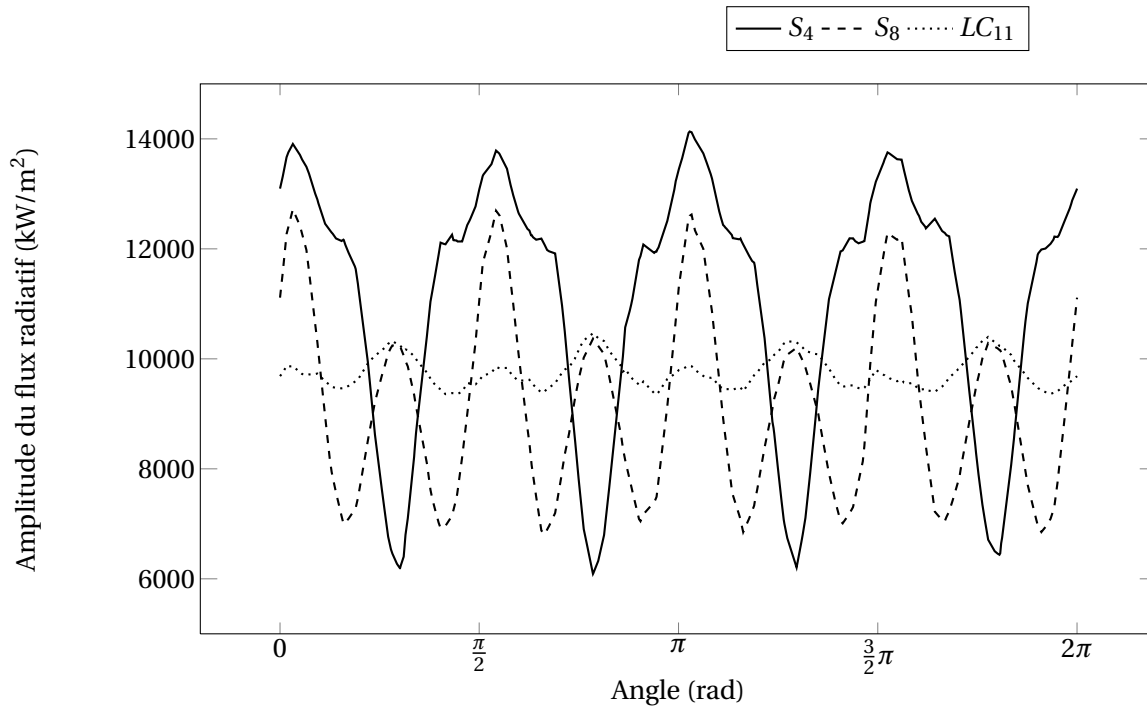


FIGURE 3.47: Comparaison des quadratures spatiales  $S_4$ ,  $S_8$  et  $LC_{11}$  sur des profils de l'amplitude du flux radiatif  $q^r$  sur un cercle de rayon  $r = 2\text{ m}$  à la hauteur de  $h = 7\text{ m}$

Les profils du terme source obtenus dans la direction radiale à  $h = 3\text{ m}$  pour les deux températures sont tracés Fig. 3.48. Il est intéressant de noter que le terme source radiatif est plus fort au centre de la flamme lorsque la température des parois réfractaires est plus faible (Cas 4). L'écart de température amène un plus fort échange d'énergie par rayonnement. Par ailleurs, le terme source devient négatif pour les gaz frais entourant la flamme. Ce terme source a une amplitude équivalente pour les deux températures de paroi. L'absorption de l'énergie par ces gaz froids y est donc du même ordre. L'émission étant plus forte dans le cas 4 où  $T = 750\text{ K}$ , l'énergie rayonnée sera globalement plus importante dans ce cas.

Ce résultat est également visible dans la Fig. 3.49 où le flux radiatif est tracé selon la distance à l'axe de révolution. Le flux est nul au centre du domaine par symétrie et augmente avec la distance à l'axe. Il atteint son maximum pour  $r = 5\text{ m}$  où la divergence du terme source est maximale. Ensuite, le flux diminue avec l'absorption des gaz froids entourant la flamme. Dans cette zone, les termes sources sont identiques pour les deux températures de paroi ce qui se traduit par des pentes identiques pour les flux radiatifs. Plus la température des parois est froide plus les échanges radiatifs sont importants.

Finalement, la Fig. 3.50 compare les flux incidents calculés et tracés selon la verticale aux mesures de Feyzin. Le maximum du flux incident calculé est localisé autour de  $h = 3\text{ m}$  tandis que dans les mesures le maximum est à  $h = 8\text{ m}$ . À partir de  $h = 4\text{ m}$ , le flux calculé décroît rapidement avec la hauteur : la température des gaz est plus faible, et toute l'énergie chimique a déjà été libérée.

En comparaisons aux mesures, le rayonnement calculé atteint un niveau correct pour les deux températures de paroi, avec une légère surestimation pour  $1000\text{ K}$  et sous-estimation pour  $750\text{ K}$  indiquant que la température réelle est probablement entre les deux. Une étude réalisée dans la suite viendra confirmer cette intuition.

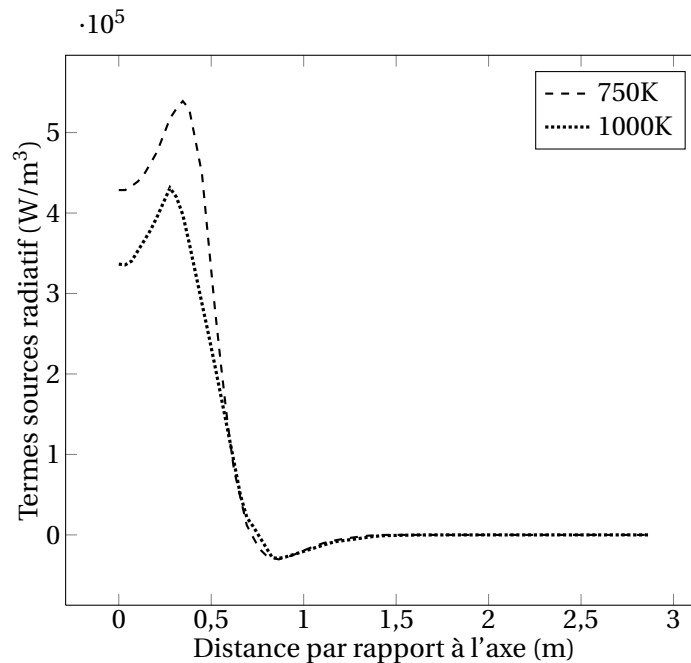


FIGURE 3.48: Profils de terme source radiatif à la hauteur de  $h = 3\text{m}$  pour une température de paroi de  $750\text{K}$  et  $1000\text{K}$

Le bon ordre de grandeur est obtenu et au vu de la simplicité de la solution de combustion, le résultat est tout à fait satisfaisant.

## IV Conclusions sur les transferts thermiques dans un four

Trois modes de transfert de chaleur résultent des inhomogénéités de température induites par la combustion. Nous avons constaté que le rayonnement se révèle être le mode de transfert dominant.

L'étude précédente a montré l'influence de la température des parois. La connaissance de celle-ci est un point clé pour la résolution des champs radiatifs. Deux températures caractéristiques ont été choisies pour représenter la température des murs : celle des tubes et celle du réfractaire. Le calcul des transferts radiatifs réalisés avec ces deux températures a montré qu'il était possible d'encadrer les mesures de flux incidents sur site. Néanmoins, les tubes ne sont pas homogènes en température pour deux raisons. La première, nous l'avons vu, est due à la présence de la flamme. La seconde vient de l'écoulement du fluide dans les tubes. Au fur et à mesure, le pétrole se réchauffe créant ainsi de fortes inhomogénéités sur la paroi intérieure des tubes. Il est nécessaire d'accéder à une meilleure connaissance de la température des tubes par un couplage de celle-ci avec le rayonnement.

Dans la suite, nous concentrerons les efforts numériques sur la bonne résolution conjointe de la conduction et du rayonnement. La capacité du code *PRISSMA* et du code *AVTP* à résoudre respectivement ces deux phénomènes vient d'être présentée. Une méthodologie de couplage de ces deux codes a été développée pour cela et sera présentée au chapitre 5

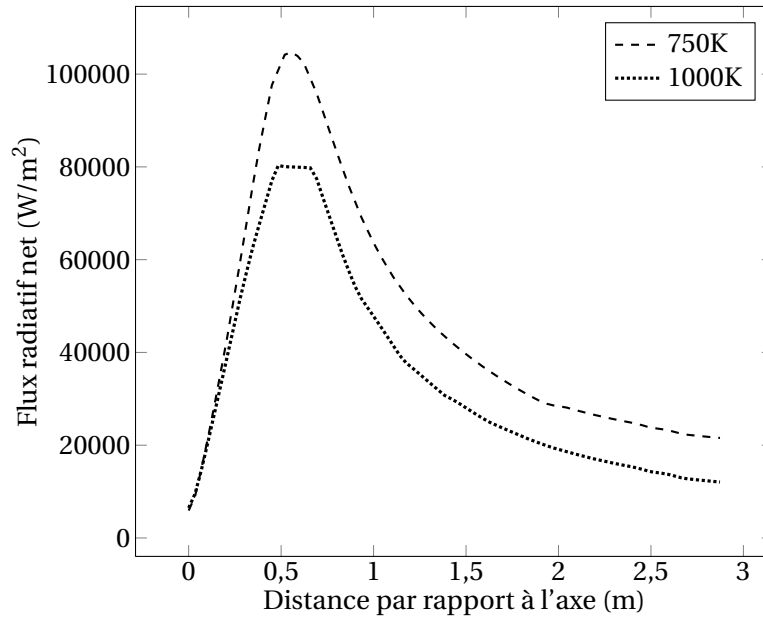


FIGURE 3.49: Profils de flux radiatif net pour une température de paroi à 750K et 1000K à la hauteur de  $h = 3\text{m}$

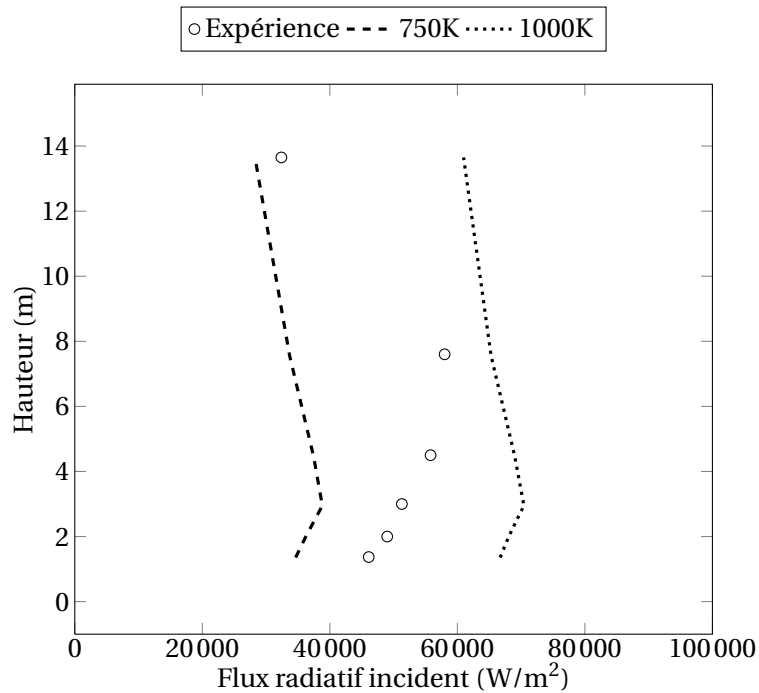


FIGURE 3.50: Influence de la température du réfractaire sur le calcul des flux radiatifs incidents simulés - Comparaison avec les mesures

## **Deuxième partie**

# **Analyse des modes de transferts thermiques couplés pour la prédiction du dépôt**



La description des phénomènes physiques intervenant dans notre système complet « Four » a été faite de manière indépendante dans les chapitres précédents, dans une approche où le problème d'encrassement des tubes dans un four est vu comme le résultat d'un ensemble de processus couplés (Fig. 9).

L'étude du problème préliminaire sur la physique du dépôt (Chap. 1) ainsi que l'étude thermique (Chap. 3) ont permis de montrer l'importance de la température des parois pour la prédiction du dépôts, contrôlée côté externe par le rayonnement thermique des gaz de combustion et côté interne par la production de dépôt.

Le modèle d'encrassement est également issu d'une analyse synthétisée au Chap. 1. La combustion est traitée au Chap. 2. La résolution des problèmes de rayonnement et de conduction thermique a été dérivée et validée sur des problèmes spécifiques au Chap. 3.

Nous pouvons maintenant définir deux sous-systèmes du système complet « Four » :

- la « Chambre de combustion » qui agit sur la paroi externe des tubes,
- le « Procédé » qui agit sur la paroi interne des tubes.

Le couplage va donc être réalisé en deux étapes : d'abord, les phénomènes dans chacun des deux sous-systèmes ci-dessus vont être couplés puis les deux sous-systèmes seront couplés entre eux. Le couplage, dans la « Chambre de combustion », de la conduction avec le rayonnement est réalisé dans le Chap. 5. Le couplage de la conduction au dépôt, dans le sous-système « Procédé », est fait dans le Chap. 6.

La dernière étape consiste à coupler les deux sous-systèmes. Tous les phénomènes sont ainsi présents (Chap. 7).





# 4

## Méthode de couplage des phénomènes thermiques et physico-chimiques

Une méthodologie du couplage a été élaborée pour résoudre spécifiquement le problème de dépôt dans un four et établir les interactions dans le système « Four » entre le « Procédé » (cokage) et la « Chambre de combustion » (chauffage). Le couplage de ces deux systèmes nécessite de définir la nature de l'interaction et de déterminer la stratégie à mettre en œuvre.

De nombreuses approches ont déjà été mises en place pour coupler les différents modes de transfert d'énergie dans les chambres de combustion aéronautiques [69, 100, 123]. Ces techniques sont fortement dépendantes des phénomènes physiques résolus et de leurs modes d'interaction. Par exemple, dans le cas des chambres de combustion aéronautiques, l'écoulement est résolu par Simulation aux Grandes Échelles (SGE), donnant accès à une valeur précise des flux thermiques convectifs, ce qui n'est pas le cas dans notre problème de four.

Le couplage a pour objectif d'intégrer les problèmes, jusque-là traités séparément, dans un problème global. Les conditions limites de chaque problème deviennent des variables internes pour le problème global. Ainsi, la température des tubes  $T_m$  et le flux radiatif  $\phi_{rad}$ , respectivement utiles aux calculs radiatifs et aux calculs de conduction thermique, deviennent des variables d'interaction.

### I Interaction entre la conduction dans le tube et le rayonnement dans la chambre de combustion

Dans la chambre de combustion, l'échange radiatif entre la flamme et les tubes dépend de la température de la surface extérieure des tubes. Un schéma représentant cette interaction est réalisé Fig. 4.1. Numériquement, le flux pariétal  $\phi_{rad}$  provenant de la flamme et la paroi du réfractaire du four est calculé et transmis au tube. Réciproquement, la température à la surface du tube  $T_m$  est calculée et intégrée comme condition limite dans le problème radiatif.

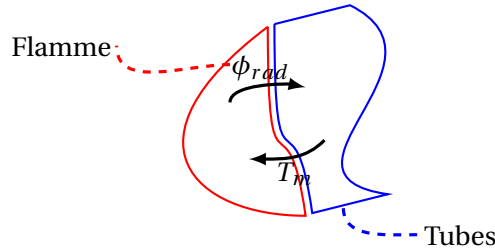


FIGURE 4.1: Schéma de couplage flamme/solide du système « Chambre de combustion »

Nous cherchons une solution stationnaire. Numériquement, une méthode itérative permet la recherche d'un « point fixe » qui assure l'équilibre thermique entre le solide et les gaz de combustion.

Le couplage des deux codes indépendants *AVTP* et *PRISSMA* est réalisé par transfert de données *via* les conditions limites. Les maillages n'étant pas coïncidents au niveau de la surface d'échange, les données doivent être interpolées d'un maillage source vers un maillage cible. Cette interpolation doit conserver deux propriétés des paramètres échangés :

- la continuité spatiale,
- la quantité d'énergie.

Dans le problème considéré, l'intégrale sur la surface d'échange des flux radiatifs doit donc être égale au flux reçu par *AVTP*. De même, la température doit rester continue dans les deux codes.

Une librairie d'interpolations développée par *S. Jauré* propose trois méthodes d'interpolation [124] :

- plus proche point,
- linéaire,
- conservative.

Les maillages utilisés sont non-structurés et rendent l'opération d'interpolation plus complexe que sur des maillages réguliers. L'interpolation se fait en deux étapes indépendantes. La première, la plus coûteuse, construit une matrice représentative de la transformation géométrique associée. La seconde applique cette transformation aux données à interpoler sur un maillage cible.

Les méthodes précédentes sont décrites de manière simplifiée dans ce manuscrit. Le lecteur se référera aux travaux de *S. Jauré* pour plus de détails [124].

Considérons un paramètre représenté par la fonction  $f(x)$  sur le maillage source (A). Ce paramètre doit être interpolé sur un maillage cible (B) (Fig. 4.2) ou (C) (Fig. 4.3).

### Interpolation au plus proche point

Cette méthode est la plus simple. À chaque point du maillage cible est associé la valeur de  $f$  prise au point du maillage source minimisant leur distance. Cette interpolation de la fonction  $f(x)$  induit un saut de température entre les maillages (A) et (B) (cf. 3<sup>ième</sup> maille du maillage (B) Fig. 4.2-(a)). Cette méthode est relativement efficace pour des maillages dont les mailles sont de taille équivalente. Dans le cas contraire, elle dégrade les champs interpolés et a tendance à augmenter les gradients, par ailleurs difficiles à gérer numériquement.

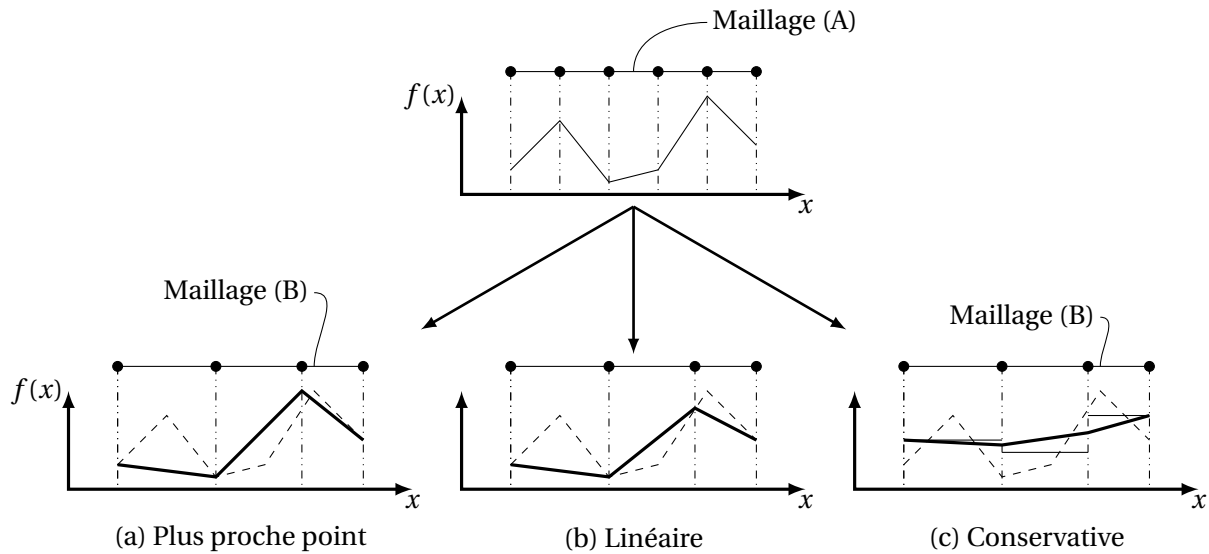


FIGURE 4.2: (a) interpolation « plus proche point », (b) interpolation linéaire et (c) interpolation conservative pour un maillage monodimensionnel - Les traits fins représentent les valeurs aux éléments - les traits épais représentent les valeurs aux noeuds

### Interpolation linéaire

Ce type d'interpolation projette le point source sur l'élément cible. La quantité à projeter est associée au barycentre de l'élément cible puis redistribuée sur les différents points de l'élément. Cette méthode se montre plus avantageuse que la méthode du plus proche point en réduisant l'effet de crénelage de la fonction interpolée lorsque le maillage cible possède moins de mailles que le maillage source Fig. 4.2-(b). Cependant, l'interpolation linéaire ne permet pas de conserver l'intégrale du signal.

### Interpolation conservative

La méthode conservative vise à conserver l'intégrale du signal entre le maillage source et le maillage cible. Elle pondère la quantité source par le rapport des surfaces élémentaires (Fig. 4.2-(c)) mais a tendance à moyennner les gradients sur un maillage cible plus raffiné que le maillage source Fig. 4.3-(a).

### Interpolation linéaire & conservative

Pour conserver les deux propriétés de linéarité et de conservativité, une quatrième méthode est utilisée.

La première étape consiste à projeter les éléments du maillage cible sur les éléments du maillage source. Chacun de ces éléments cibles est découpé en plusieurs polygones (des segments à une dimension). Ensuite, l'aire de ces polygones est calculée. La quantité cible est égale à la quantité source pondérée par le rapport entre l'aire du polygone cible et l'aire de l'élément source, ce qui assure la conservativité de la transformation. Enfin, la quantité cible obtenue sur les polygones est ramenée au

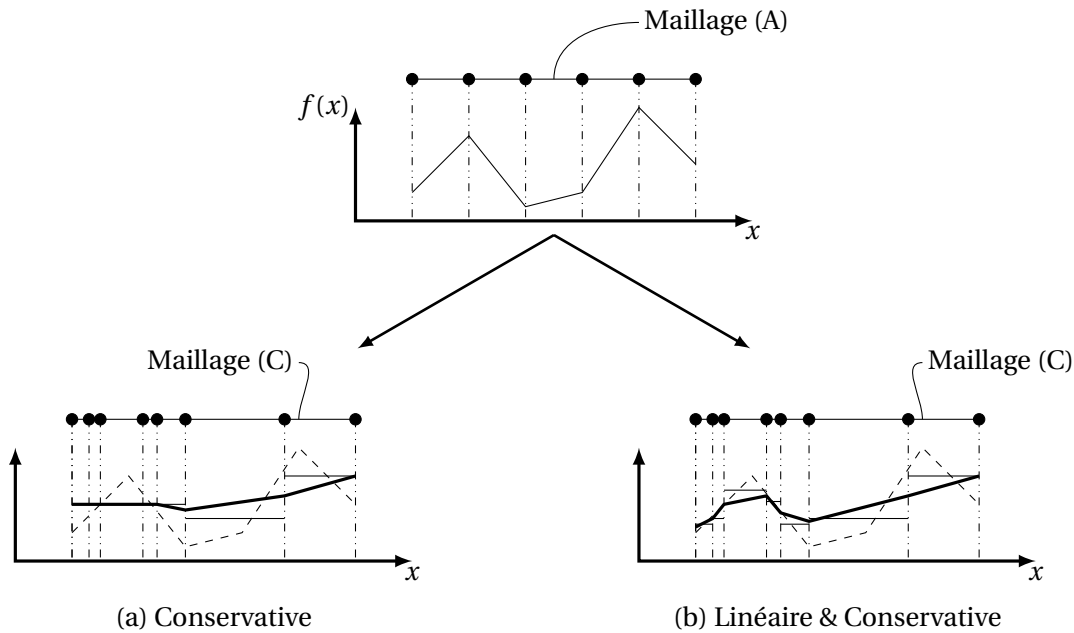


FIGURE 4.3: Comparaison de l'interpolation conservative et linéaire conservative sur un maillage monodimensionnel - Les traits fins représentent les valeurs aux éléments - Les traits épais représentent les valeurs aux noeuds

barycentre des éléments cibles et redistribuée sur les différents points de cet élément. Cette dernière étape assure la linéarité de l'opération.

Les gradients sont mieux conservés par rapport à l'interpolation conservative Fig. 4.3-(b).

C'est cette méthode qui est utilisée pour conserver l'énergie transférée par les flux de *PRISSMA* vers *AVTP* et transmettre la température de *AVTP* vers *PRISSMA*.

## II Interaction entre la conduction thermique et la formation du dépôt

La température de la paroi contrôle la quantité de solide déposée tandis que la résistance thermique induit une augmentation de cette température (Chap. 1). Le schéma Fig. 4.4 illustre la méthode de couplage et les variables transférées.

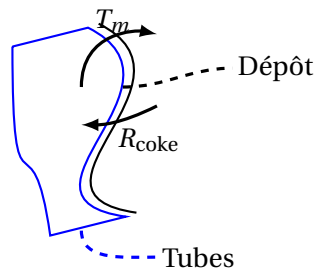


FIGURE 4.4: Schéma de couplage solide/dépôt du système « Procédé »

Le choix a été fait de considérer le dépôt comme une résistance thermique. Une épaisseur de coke supplémentaire équivaut à une augmentation de la résistance thermique. Pour rappel, ce lien est

défini par :

$$dR_{\text{coke}} = \frac{dm_{\text{coke}}}{\lambda_{\text{coke}}\rho_{\text{coke}}} = \frac{de_{\text{coke}}}{\lambda_{\text{coke}}} \quad (4.1)$$

L'évolution de la résistance thermique est une fonction de la température de paroi  $T_m$  donnée par une loi de la forme :

$$\frac{dR_{\text{coke}}}{dt}(t) = f(T_m) = A \exp\left(-\frac{Ea}{RT_m(t)}\right) \quad (4.2)$$

La résistance à l'instant  $t$  est connue par intégration de l'Eq. (4.2), qui nécessite la connaissance de  $T_m(t)$ .

La résistance  $R_{\text{coke}}$  est intégrée dans le code *AVTP* comme une condition limite du problème de conduction thermique. Dans *AVTP*, l'intégration de cette loi se fait par extension d'une condition limite de type *Neumann* de la forme :

$$T_m = qR_{\text{equ}} + T^{\text{ref}} \quad (4.3)$$

où  $q$  est le flux à la paroi,  $T^{\text{ref}}$  la température du fluide et  $R_{\text{equ}}$  définit une résistance thermique équivalente.

La Figure 4.5 illustre ce couplage dans le cas d'un tube soumis à un flux externe  $\mathbf{q}$  dont la paroi interne est couverte d'une couche de dépôt, elle-même soumise à un échange convectif. En régime stationnaire, par analogie électrique, les résistances thermiques associées en série s'additionnent :

$$R_{\text{equ}}(t) = R_{\text{conv}} + R_{\text{coke}}(t) = \frac{1}{h} + \int_0^t \frac{dR_{\text{coke}}}{dt} dt \quad (4.4)$$

D'un point de vue pratique, l'intégration temporelle de l'Eq. (4.4) est faite dans *AVTP* avec un pas de temps  $dt_{\text{cond}}$  qui assure la stabilité du schéma pour la résolution de l'équation de la chaleur. Chaque itération du calcul fournit la température de paroi  $T_m$  nécessaire à l'intégration de Eq. (4.4), intègre la nouvelle condition limite et la met à jour.

Un problème majeur de cette intégration est lié au coût des calculs. Le phénomène de cokage est un phénomène très lent, de quelques heures à quelques jours, comparé aux transferts thermiques dans le solide (d'instantanés à quelques secondes). Le calcul thermique est contrôlé par le pas de temps conductif et la résolution de la température devient coûteuse. Une stratégie pour accélérer les simulations sera exposée dans la suite (Chap. 4).

### III Interaction rayonnement, conduction et formation de dépôt

La solution du problème global n'est plus stationnaire. L'épaisseur de coke évolue en fonction du flux de chaleur transmis par la paroi. La température de ces tubes s'adapte et les flux réemis par ceux-ci changent. Le couplage du système « Four » se fait par l'union des deux méthodes évoquées précédemment Fig. 4.6.

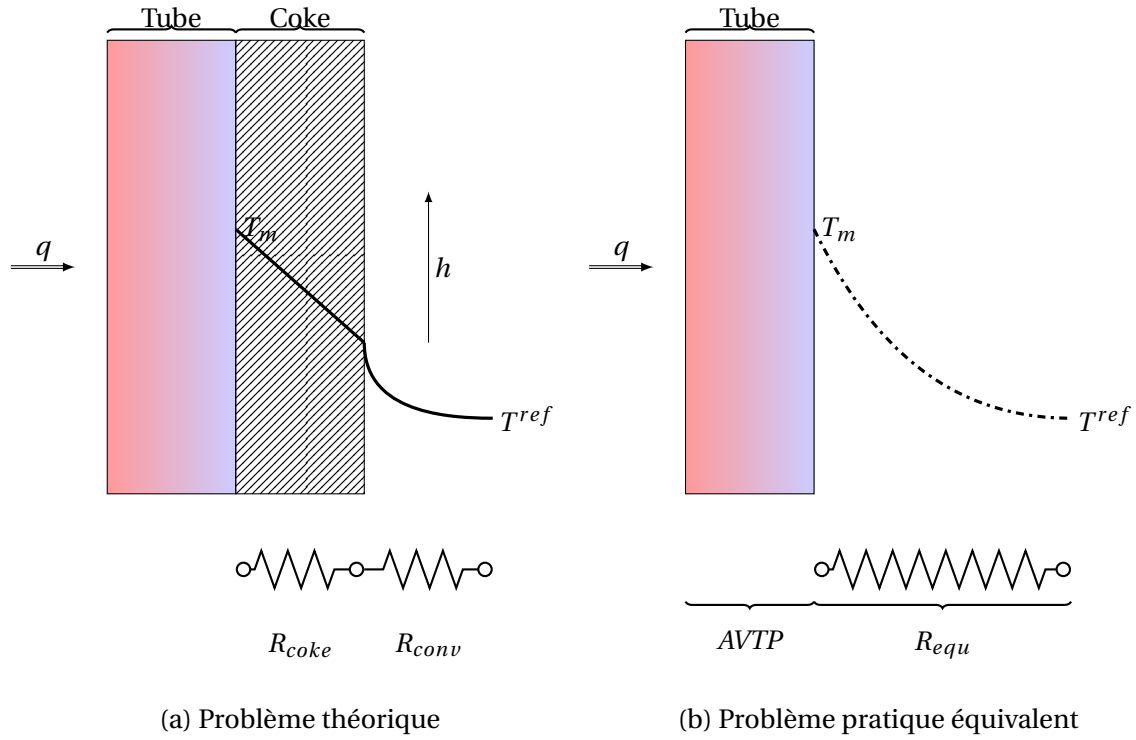


FIGURE 4.5: Analogie électrique d'une résistance thermique d'un tube encrassé dans un four

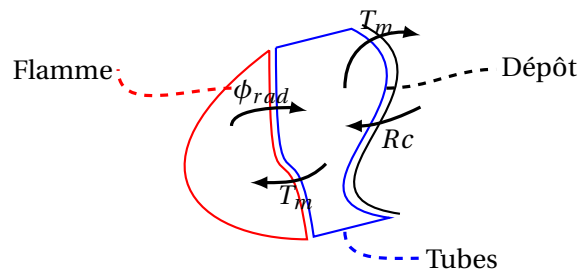


FIGURE 4.6: Schéma de couplage flamme/solide/dépôt du système « Four »

# 5

## Couplage thermique entre rayonnement et conduction dans un four

L'étude du couplage thermique entre le rayonnement de la flamme et les tubes a donné lieu à un article reproduit dans ce chapitre. La stratégie mise en place montre qu'un modèle de flamme analytique associé au couplage entre le rayonnement et la conduction dans les tubes permet de capturer des températures de tubes comparables à l'expérience ainsi que le bon ordre de grandeur pour les flux radiatifs.

Le calcul de la flamme et des flux radiatifs du système « Chambre de combustion » a été réalisé sur un maillage de 11,6 millions de cellules (2,3 millions de noeuds, Fig. 5.1). Les différents tubes sont visibles dans la coupe horizontale effectuée à 3 m. Pour s'assurer que le flux soit bien calculé, environ 50 mailles ont été placées entre deux tubes consécutifs.

Le maillage utilisé pour *AVTP* représente une des quatre passes (Fig. 5.2). Il est constitué de 27 millions de noeuds. Environ 4 noeuds de calcul sont placés dans l'épaisseur des tubes les plus fins.

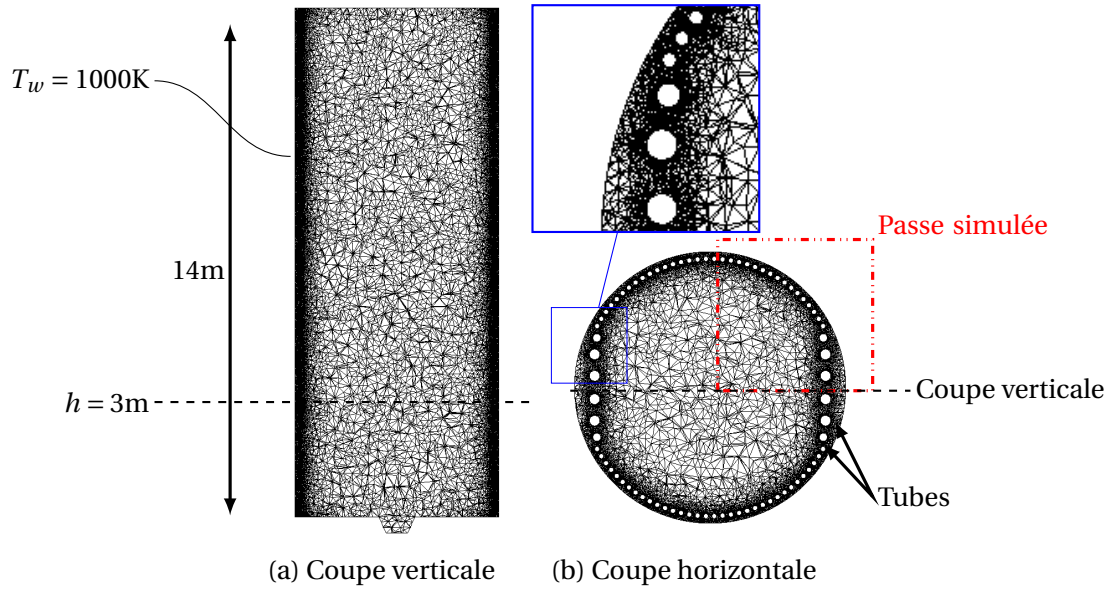


FIGURE 5.1: Coupes du maillage utilisé pour le calcul de la flamme de diffusion par CANDLE et PRISSMA dans le calcul couplé du système « Chambre combustion »

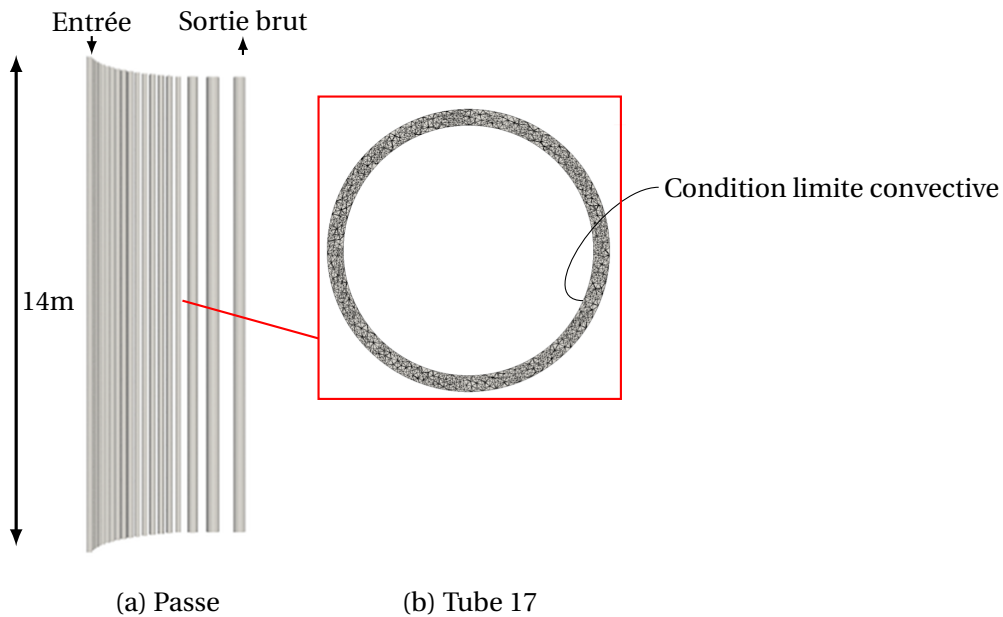


FIGURE 5.2: Maillage d'une passe utilisé pour le calcul conductif par AVTP dans le calcul couplé du système « Chambre combustion »



# Coupled heat transfers in a refinery furnace in view of fouling prediction

T. Pedot<sup>a,\*</sup>, E. Riber<sup>a</sup>, B. Cuenot<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*CERFACS, 4avenue G. Coriolis, 31057, Toulouse Cedex 01, France*

---

## Abstract

In industrial refinery furnaces, the efficiency of the thermal transfer to heat crude oil before distillation is often altered by coke deposition inside the fuel pipes. This leads to increased production and maintenance costs, and requires better understanding and control. Crude oil fouling is a chemical reaction that is, at first order, thermally controlled. In such large furnaces, the predominant heat transfer process is thermal radiation by the hot combustion products, which directly heats the pipes. As radiation fluxes depend on temperature differences, the pipe surface temperature also plays an important role and needs to be predicted with sufficient accuracy. This temperature results from the energy balance between thermal radiation and conduction in the solid material of the pipe, meaning that the thermal behavior of the whole system is a coupled radiation-conduction problem. In this work, this problem is solved in a cylindrical furnace, using the Discrete Ordinate Method (DOM) with accurate spectral models for the radiation of combustion gases, described by a complex chemistry flame model, and coupled to heat conduction in the pipe to predict its wall temperature. An energy balance confirms that heat transfers are effectively dominated by thermal radiation. Good agreement with available measurements on a real furnace shows that the proposed approach is able to predict the heat transfer to the pipe. The method gives an accurate prediction of the radiative source term and temperature fields in the furnace and on the pipe surface, which are key parameters for liquid fouling inside the pipe. Although reasonably accurate results are obtained with simple models, they still can be easily improved by more sophisticated models for turbulence, combustion and radiation.

---

## I. Introduction

Crude oils are complex mixtures of hydrocarbons ranging from methane to asphalt, with varying proportions of paraffins, naphthenes, and aromatics. The main objective of a crude distillation unit is to fractionate crude oil into light hydrocarbons, essences, diesel, kerosene,... Before entering the distillation process, the crude oil is heated in a tube-still furnace, in two stages: first in the radiant section, the oil flowing in pipes receives heat by thermal radiation of hot gases issued from diffusion flames; then in the convection section, at the top of the furnace, the oil flowing into a bank of tubes, recovers heat by convection from the hot gas leaving the radiant section.

Refinery furnaces are among the largest energy consumers in the chemical industry [1–4] and performing efficient heat transfer is crucial. However, one major difficulty appearing in such systems is fouling, which leads to increased energy consumption and maintenance costs [5, 6]. The furnace performance gradually decreases with the formation of deposits on the inner surface of the processing pipes and tubes, which oppose an increasing resistance to heat transfer. Cleaning the equipment is the only way to restore its performance. This process is very expensive and

is done only when the thermal efficiency has reached the minimum acceptable level.

Fouling is the result of complex chemical and heterogeneous reactions between the crude components, and are primarily triggered by high temperatures [7–11]. As a consequence, to control fouling one has to control the oil and pipes temperatures. These temperatures result from the balance of all heat transfer processes present in a furnace: thermal radiation, convection and conduction [12–14]. All those phenomena are fully coupled, and the detailed picture of net heat exchange at the pipe surface is not straightforward. This paper proposes a methodology to access the temperature at the pipe surface, including all important phenomena and their coupling. It will be shown that radiation in the furnace predominates over convection [15, 16], while conduction transfers heat through the pipe wall to the oil.

## II. State of the art

The flow in the furnace is usually turbulent, with Reynolds numbers of the order of 600000. The hot gases radiating to the pipes are then produced by turbulent diffusion flames. The detailed description of such flames usually requires complex and expensive simulations, involving turbulence and turbulent combustion models. An accurate simulation of the refinery furnace also required accurate prediction of

---

\*Corresponding author

*Email addresses:* pedot@cerfacs.fr (T. Pedot),  
riber@cerfacs.fr (E. Riber), cuenot@cerfacs.fr (B. Cuenot)

the tube and wall temperature as well as the radiative heat fluxes that are exchanged between the processed oil and the flue gas to predict coke formation.

Different approaches are used to compute gas temperature profiles to predict radiative heat transfers. CFD simulation that solves the three-dimensional Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) equations along with a two-equation turbulence model are extensively used in furnace. This model is generally combined with a detailed combustion model including combustion kinetics and turbulent mixing [17–21].

In order to capture the mixing effects of the cross-flow air jets, Large-Eddy Simulation (LES) is sometimes preferred over Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) simulation, because of its capability in describing turbulent mixing [22, 23]. Since turbulent fluctuations are of small scale, LES is computationally too expensive and only small furnace are able to be calculated directly [22].

High temperatures are reached in industrial furnace, radiative heat transfer plays a fundamental role. The natural approach to account for radiation in industrial furnaces is, therefore, to simplify the radiative transfer equation including the Discrete Transfer Method [24] (DTM), the Discrete Ordinates Method [20, 21, 25–27] (DOM), Finite Volume Methods[28]. Those different numerical methods are all capable of handle radiation in transparent and participating media and are generally coupled with Weighted-Sum-of-Gray-Gas model [20, 21] (WSGGM) when more extensive calculation with Spectral Narrow Band model (SNB) is used for combustion chamber or chanel [29–32].

For the present study, only the distribution of the hot products in the furnace are of interest, and a simpler approach is used. The fields of radiative species mean concentrations are reconstructed from a simplified analytical diffusion flame structure, based on the passive scalar variable, and complex chemistry one-dimensional flamelets [23, 33–36]

Radiation is a fully three-dimensional, non-local phenomenon difficult to simulate if the emission/absorption of gases are accounted for. The most accurate models are based on Monte-Carlo methods, allowing to calculate photon trajectories at each frequency. However these methods are still too expensive in terms of CPU-cost and simpler, but less accurate methods are preferred for the simulation of radiation in real systems. A complete evaluation of available methods has been done in [37], concluding that the Discrete Ordinate Methods (DOM) with tabulated spectral properties are a good compromise in terms of accuracy versus CPU cost for combustion applications. A DOM approach therefore used for the present study.

To obtain an accurate prediction of the pipe wall temperature, the coupling between thermal radiation and conduction is done at the pipe wall surface. The resulting fluid and solid temperatures are different from the results of non-coupled simulations and are closer to measurements.

Heat radiative fluxes are strong towards the processed tubes. A strong need for an appropriate radiation model

The paper is organized as follows. Section IV outlines the models for the flame and the three modes of transfer and constructs a methodology to couple them. Section VI describes the geometry, the operating points and the computational set-up. The reliability of this coupling methodology is checked by comparison of each thermal transfers estimations (Sec. VII). At last, further analysis draw a picture of flame/pipe interactions in terms of radiative heat transfer and temperature.

### III. Description of the problem

In the radiant section of the studied refinery furnace, a central burner fed by a mixture of fuel and air is used to heat crude oil in a tube-still heater. The power of the burner varies around 15 MW and the temperature of combustion gases goes up to 1400K. The burner and heater are housed in a cylindrical box laid on a steel structure. The inner surface of the walls of the furnace is covered with refractory lining to reflect most of the radiant heat generated by the flame. The tubes are arranged in the form of a vertical heating coil (Fig. 1).

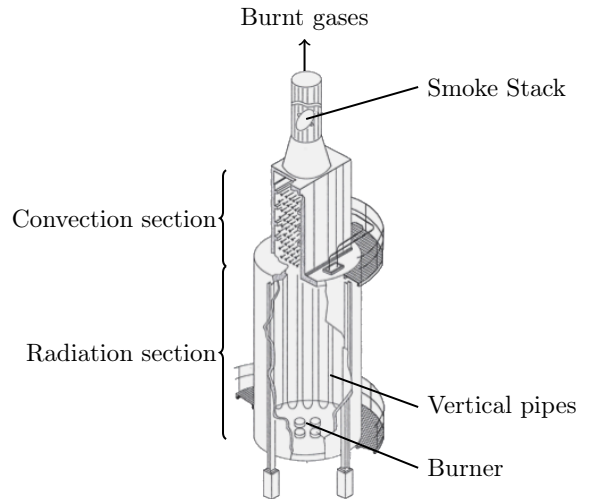


Figure 1: Sketch of a typical cylindrical furnace

The burner is used in a diffusion mode, in a coflowing preheated air stream to increase global efficiency. Oil heating results from the combination of three modes of heat transfer in the furnace: radiation between the hot gases and the solid walls, convection due to the flow along the heater and conduction through the solid pipe walls.

The energy balance received by the oil may be written from a global energy balance (Fig. 2) :

$$P_{pipes} = P_{comb} + P_{in,gases} - P_{out,gases} \quad (1)$$

where  $P_{comb}$  is the power released by combustion,  $P_{in,gases}$  the injected power by preheated air and  $P_{out,gases}$  the power of exhaust gases.

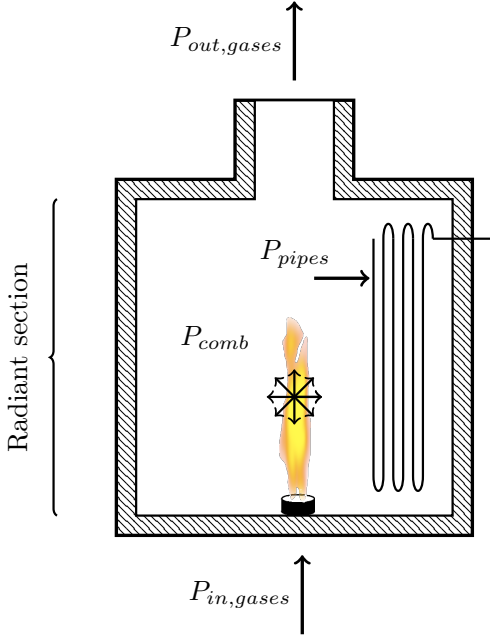


Figure 2: Sketch of the cylindrical furnace in a vertical cut

This energy is first transferred to the pipes through convection  $P_{conv,ext}$  and radiation of combustion products and refractory walls  $P_{rad}$  (Fig. 3). The power received

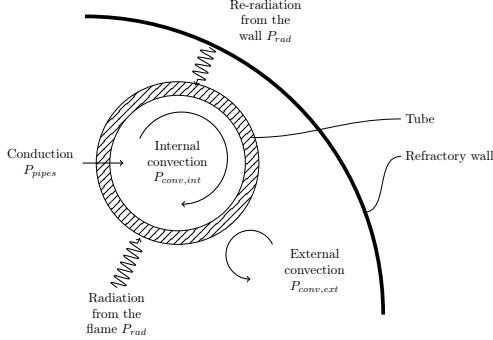


Figure 3: Sketch of heat fluxes budget to the pipes

on the external surfaces of the pipes is the sum of these two contributions:

$$P_{pipes} = P_{rad} + P_{conv,ext} \quad (2)$$

Then heat is conducted through the pipe walls and heats the flowing oil through convection:

$$P_{pipes} = P_{conv,int} \quad (3)$$

All these transfer processes are directly linked to the pipe wall temperature, which is a critical value for fouling and a coupling parameter for all heat transfers. As a consequence, in order to accurately predict the heat transfer in such systems, it is necessary to include all energy transfer mechanisms with their coupling.

## IV. Models

To evaluate all heat transfers, it is necessary to model the flame, the radiation of gases and walls, the convection and the conduction in solid parts. These models are described below.

### 1.. Modeling of the combustion process

The species and temperature fields in the furnace control the radiative fluxes to the walls, and result from complex flow patterns where turbulence and chemistry including many species and reactions make simulations difficult and expensive in terms of CPU cost. In the present study, the detailed description of the turbulent flame is not an objective and only the distribution of hot gases in the furnace is sought for. This can be obtained to first order with the simple model of steady diffusion jet flame, ie. a fuel jet located at the centre of a cylindrical enclosure surrounded by a coflowing air stream (Fig. 4). The main impact of turbulence is on the flame length, which is used as a parameter in the diffusion flame model.

The flame is solved as a two-dimensional axisymmetric problem, where a fuel jet (fuel mass fraction  $Y_F^0$ , density  $\rho_F^0$  and inlet velocity  $u_F^0$ ) is injected parallel to the  $x$  axis (Fig. 4) with an oxidizer co-flow (fuel mass fraction  $Y_O^0$ , density  $\rho_O^0$  and inlet velocity  $u_O^0$ ). The fuel orifice has a diameter of  $2e_0$ , the oxidizer orifice has a diameter of  $2e_1$

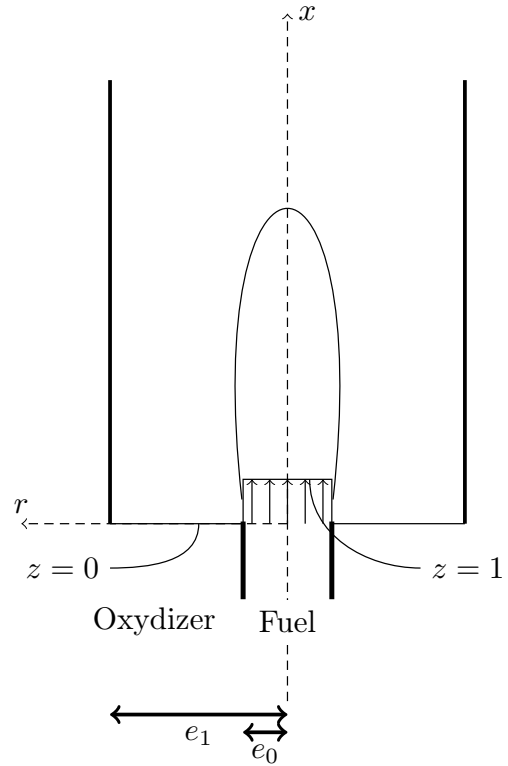


Figure 4: Axisymmetrical diffusion jet flame configuration

Instead of solving the PDE's describing such a reacting flows, an analytical solution is written, thanks to a series of hypothesis listed below:

- The thermodynamic pressure is considered constant and Mach number is small.
- The heat capacities of all chemical species are equal and independent of temperature.
- *Lewis'* numbers are all equal to 1, so that mass and heat have the same diffusion  $D$ , taken inversely proportional to the density  $\rho$  so that ( $\rho D = \text{constante} = \rho_O^0 D_O = \rho_F^0 D_F$ ).

Introducing the mixture fraction as a passive scalar  $z$ , its balance equation (with no source term) writes [38]:

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i z}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \quad (4)$$

Several definitions may be found for  $z$ . Here the definition of Bilger [23, 39] is adopted:

$$z_B = \frac{2(Y_C - Y_{C,2})/w_C + (Y_H - Y_{H,2})/2w_H - (Y_O - Y_{O,2})/w_O}{2(Y_{C,1} - Y_{C,2})/w_C + (Y_{H,1} - Y_{H,2})/2w_H - (Y_{O,1} - Y_{O,2})/w_O} \quad (5)$$

where  $Y_k$  are elemental mass fractions of carbon, hydrogen, and oxygen;  $w$  are atomic weights; and the subscripts (1) and (2) refer to the fuel stream and coflowing air stream.

Further simplifications have to be made to solve this equation analytically:

1. The flow is steady  $\frac{\partial \rho z}{\partial t} = 0$ .
2. The radial and tangential velocities are zero:  $u_r = u_t = 0$ .
3. Diffusion occurs mainly in the radial direction  $\frac{\partial Y_i}{\partial x} \ll \frac{\partial Y_i}{\partial r}$ .

With these assumptions, (Eq. 4) may be recast in cylindrical coordinates:

$$\frac{\partial z}{\partial x} = \alpha \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial z}{\partial r} \right) \quad (6)$$

with  $\alpha = D_F/u_F^0$ .

This equation is associated to boundary conditions represented by a Top-Hat profile at the inlet and an imposed value at the external boundary (Fig. 4):

$$z(0, r) = H(r - e_0) \quad (7)$$

$$z(x, r = e_1) = 0 \quad (8)$$

The solution is written with the *Green's* function as:

$$z(x, r) = \int_0^{e_1} G(x, r, \xi) d\xi \quad (9)$$

where

$$G(x, r, \xi) = \frac{2}{e_1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi}{J_1^2(Z_n)} J_0 \left( \frac{Z_n r}{e_1} \right) J_0 \left( \frac{Z_n \xi}{e_1} \right) \exp \left( -\frac{\alpha Z_n^2 x}{e_1^2} \right) \quad (10)$$

with  $Z_n$  the positive zeros of the zeroth-order *Bessel* function,  $J_0$  which are non-singular at the origin. These functions are often found in cylindrical problem.

The derivation formula for the *Bessel* functions gives [40]:

$$\int_0^{e_0} \xi J_0 \left( \frac{Z_n \xi}{e_1} \right) d\xi = \int_0^c e_1^2 \xi J_0(Z_n \xi) d\xi \quad (11)$$

$$= \frac{e_1^2 c}{Z_n} J_1(c Z_n) \quad (12)$$

with  $c = e_0/e_1$ . Assuming convergence of *Green's* function and commuting summation and integral, the integration of (Eq. 9) leads to the solution for the mixture fraction:

$$z(x, r) = 2c \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_1(c Z_n)}{Z_n J_1^2(Z_n)} J_0 \left( \frac{Z_n r}{e_1} \right) e^{-\frac{\alpha Z_n^2 x}{e_1^2}}. \quad (13)$$

In such flames, and for non-infinitely fast chemistry, the strain rate (i.e. velocity gradient) across the flame front is an important parameter and must be evaluated. In the literature many definitions of the strain rate  $a$  may be found [38, 39, 41], since this quantity strongly varies along the flame normal. In this study, the velocity field is not computed and the strain rate is approximated as:

$$a = \frac{|U_O| + |U_F|}{H} \quad (14)$$

where  $U_O$  (resp.  $U_F$ ) is the velocity of the oxidizer (resp. fuel) stream and  $H$  is the distance between the two stream injections.

All properties, temperature  $T$  and species mass fraction  $Y_k$  being uniquely related to the mixture fraction  $z$  for a given strain rate, the full flame structure may be now reconstructed from Eq. (13). Various chemical models may be used: equilibrium, one-step global chemistry or complex chemistry. In this work, one-dimensional steady stretched diffusion flames are calculated with full chemistry and full transport with *CANTERA* [42], and results are tabulated versus  $z$  to build the three-dimensional diffusion flame solution.

## 2.. Modeling of the radiation transfer

The radiation solver, called *PRISSMA*, has been specifically designed for combustion applications [43]. It solves the Radiative Transfer Equation *RTE* using the Discrete Ordinate Method *DOM* and neglecting scattering, in 3D structured and unstructured meshes. The *RTE* writes :

$$\frac{dL_\nu(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = \kappa_\nu [L_{b,\nu}(\vec{r}, \vec{s}) - L_\nu(\vec{r}, \vec{s})] \quad (15)$$

where  $L_\nu(\vec{r}, \vec{s})$  represents the local luminance at a point  $r$  in the domain. This luminance depends on the frequency  $\nu$  and the direction of propagation  $\vec{s}$ . In Eq. (15), the subscript  $b$  refers to black body properties.

Two integrations in space and frequency are needed to solve for the luminance. To avoid ray effects, the scheme of

highest accuracy ( $LC_{11}$  quadrature, i.e. ninety-six directions) is used to discretize the space [44], and the spectral model  $SNB - c\kappa$  is used for the spectral gas properties [31].

The radiant heat flux  $\vec{q}_{r,\nu}$ , incident heat flux  $\vec{q}_{r,inc,\nu}$  through  $\vec{n}$  direction and the radiant source term  $S_{r,\nu}$  are expressed from  $L_\nu(\vec{r}, \vec{s})$  as:

$$\vec{q}_{r,\nu}(\vec{r}, \vec{s}) = \int_{4\pi} L_\nu(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s} d\Omega \quad (16)$$

$$q_{r,inc,\nu}(\vec{r}, \vec{s}) = \int_{4\pi} L_\nu(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s} \times \vec{n} d\Omega \quad (17)$$

$$S_{r,\nu} = \vec{\nabla} \cdot \vec{q}_{r,\nu}(\vec{r}, \vec{s}) \quad (18)$$

### 3.. Modeling solid material conduction

The heat equation (Eq. 19) is solved with the code *AVTP* [45] on unstructured meshes, using a first-order explicit forward Euler scheme :

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (19)$$

where  $\rho$  is the solid density and  $C$  its heat capacity.

### 4.. Modeling of convective heat transfer

The convective heat transfer requires the evaluation of the transfer coefficient  $h$ . The convective heat transfer from a central flame surrounded by vertical tubes may be evaluated from the simple case of a flow along a vertical cylinder [46]. For large values of  $R/H$ , where  $R$  is the radius of the cylinder and  $H$  its height, the boundary layer thickness is small compared to  $R$ . The heat transfer can then be approximated by the heat transfer on an isothermal flat plate. The typical mean Nusselt number for this type of configuration is:

$$\bar{N}u = 0.029 Re^{0.8} G \quad (20)$$

with

$$G = \frac{Pr}{(0.029/Re)^{1/2} [5Pr + 5 \ln((1+5Pr)/6) - 5] + 1} \quad (21)$$

The convective coefficient  $\bar{h} = \lambda \bar{N}u / H$  can now be calculated and heat transfer by convection is finally evaluated as :

$$P_{conv,ext} = \bar{h} S (T_{burnt,out} - T_{surf}) \quad (22)$$

where  $T_{surf}$  (resp.  $T_{burnt,out}$ ) is the temperature of the surface (resp. the hot gases).

## V. Coupling methodology

All models presented above are coupled via the pipe wall temperature: the radiation and convective fluxes on the pipe external surface both depend on the temperature

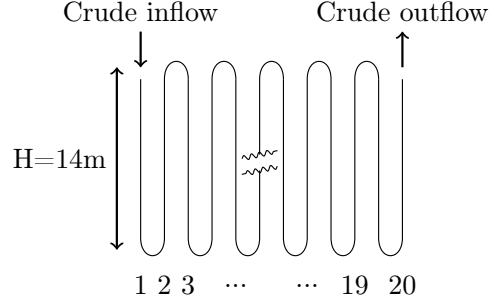


Figure 7: Sketch of the oil flow path in one quarter of the cylindrical furnace (vertical expanded view)

difference between the pipe wall and the hot gases, the conduction in the pipe wall depends on the temperature difference between the external and internal pipe surfaces, and the inner convective flux depends on the temperature difference between the internal pipe surface and the oil temperature. This strong coupling is sketched in Fig. 5. The coupling with convective fluxes is easy as these fluxes are proportional to the temperature difference. The coupling between radiation and conduction is more complex, and requires data exchange between the two solvers during the simulation. Figure 5 summarizes the methodology used to solve the coupled problem: the combustion solver produces the fields of temperature and gas composition, which are sent to the radiation solver, together with the pipe wall temperature calculated with the conduction solver, to compute the radiation source term and flux; this flux is then sent to the conduction solver to update the pipe wall temperature, so that radiation and conduction are fully coupled. In this coupling scheme, the convective heat fluxes may be added to the radiative fluxes on the external side and are used as a boundary condition on the internal side of the pipes. However external convective fluxes are small compared to radiation in the furnace, and are often neglected there [16]. A stationary solution is obtained when convergence is reached.

## VI. Application : Simulation of an industrial refinery furnace

### 1.. Geometry

A cross-sectional view of the *Feyzin* cylindrical furnace is given in Fig. 6. The dimensions are: radius  $r_{cyl} = 2.885\text{m}$ , height  $H = 14\text{m}$ . When entering the radiation section of the furnace, the crude oil flow is divided into four parallel paths, through vertical pipes along each quarter of the furnace. Each path is made of 20 bended tubes, aligned along the furnace wall at a distance of 30cm. An unfolded view of one path is drawn in Fig. 7, with the tube numbering.

Temperature and radiative heat fluxes measurements are available. An ellipsoidal radiometer measures the incident radiative transfer (see points  $\otimes$  in Fig. 9). Six probes

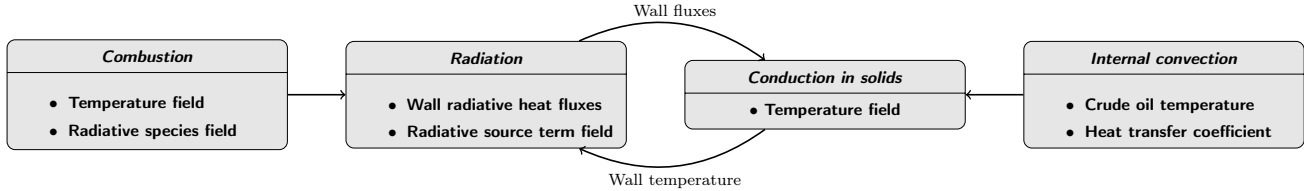


Figure 5: Coupling between combustion, thermal radiation heat conduction and internal convection

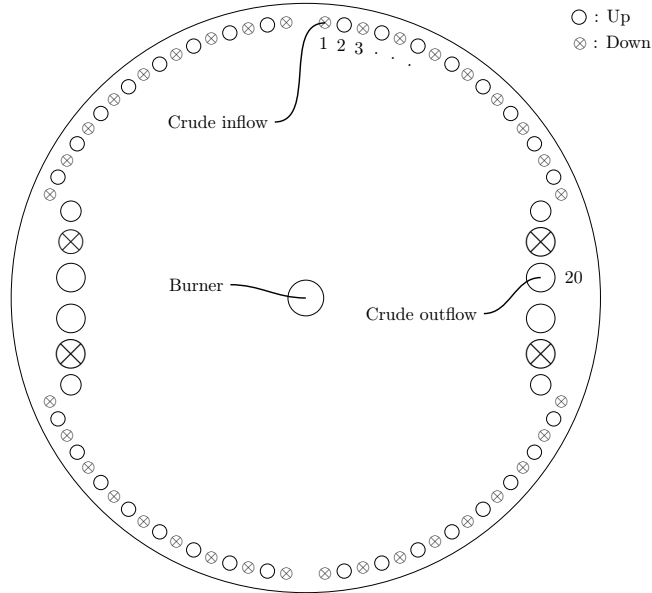


Figure 6: Sketch of the cylindrical furnace (Horizontal cut)

measure the incident radiative heat fluxes at 0.5m of distance from the refractory walls, i.e. between the flame and the pipes, and at different heights (1.37, 2, 3, 4.5, 7.6, and 13.65m).

### 2.. Operating point

The operating conditions of the furnace are summarized in Tab. 1.

<b>Inlet fuel</b>	<b>Injector diameter</b>	$D = 0.4$ m
	<b>Mass flow rate</b>	$\dot{m}_{fuel,in} = 0.27$ kg/s
	<b>Heat capacity</b>	$Cp_{fuel,in} = 1040$ J/kg·K
	<b>Temperature</b>	$T_{fuel,in} = 300$ K
<b>Air</b>	<b>Low Heat Value</b>	$LHV = 54486$ kJ/kg <sub>fuel</sub>
	<b>Mass flow rate</b>	$\dot{m}_{air,in} = 5.11$ kg/s
	<b>Heat capacity</b>	$Cp_{air,in} = 1040$ J/kg·K
	<b>Temperature</b>	$T_{air,in} = 525$ K
<b>Burnt gases</b>	<b>Mass flow rate</b>	$\dot{m}_{burnt,out} = 5.38$ kg/s
	<b>Heat capacity</b>	$Cp_{burnt,out} = 1400$ J/kg·K
	<b>Temperature</b>	$T_{burnt,out} = 1100$ K

Table 1: Operating conditions of the *Feyzin* furnace

The fuel is a complex mixture of different gases. Table 2 gives the composition (in molar fraction) of the surrogate mixture, where only species with less than four carbons of the real fuel have been kept. It has been verified that this surrogate has the same Low Heat Value than the real fuel.

$O_2$	$CO_2$	$N_2$	$C_2H_4$	$H_2$
0.1	0.2	6.65	6.44	29.24
$C_3H_8$	$CH_4$	$C_2H_6$	$CO$	$C_3H_7$
1.74	47.34	6.85	0.1	1.34

Table 2: Surrogate fuel mixture molar composition (in %)

The crude oil flow in the pipe is characterized by the parameters indicated in Table 3.

<b>Flow rate</b>	$\dot{m}_{crude} = 38.6$ kg/s
<b>Inlet temperature</b>	$T_{crude,in} = 590$ K
<b>Outlet temperature</b>	$T_{crude,out} = 664$ K
<b>Heat capacity</b>	$Cp_{crude} = 3500$ J/kg·K

Table 3: Crude oil characteristics in *Feyzin* furnace

The convective coefficient  $h$  can be calculated with the flow parameters compiled in (Tab. 4). The mean burnt gas temperature is estimated at  $T_{burnt,out} = 1100K$  (Tab. 1)

### 3.. Computational set-up

To solve this multi-physics problem, two computational domains are defined:

Pipe height $H$	14 m
Convection velocity	5 m/s
Burnt gases density	0.642 kg/m <sup>3</sup>
Burnt gases viscosity	2.76e <sup>-5</sup> Pa.s
Burnt gases conductivity	0.0404 W.m/K
Reynolds number $Re_H$	1.6e <sup>6</sup>
Prandtl number $Pr$	0.68
Nusselt number $Nu_H$	1800
Convective coefficient $h$	5W/K.m <sup>2</sup>

Table 4: External flow properties

- The combustion chamber, where hot and radiant gases are produced.
- The solid pipes, in which crude oil flows.

The two domains are separated by the pipe wall surface where data is exchanged. In the first domain, the *CANDLE* model and the *PRISSMA* solver are run on the same unstructured grid of 11 millions of elements. The flamelet table used by *CANDLE* is calculated with *CANTERA* [42], using the surrogate fuel of Table 2 and the operating conditions of Table 1. With the definition of Eq. (14), the strain rate is estimated here at  $a = 105 \text{ s}^{-1}$ . The refractory walls emit energy as a black body at the temperature  $T_w = 1000\text{K}$ , and the pipe wall emit as a gray surface  $\epsilon = 0.85$  at the unknown temperature  $T_{pipes}$ .

In the second domain, an unstructured mesh of 27 millions of nodes is used. The eighty pipes are made of *ASTM335*, a seamless ferritic alloy-steel adapted to high temperatures. Its properties are summarized in Tab. 5. The bulk temperature of the fluid  $T_{crude}$  is supposed to vary linearly from the entrance  $T_{crude,in}$  to the end  $T_{crude,out}$  (Tab. 3), which simply writes :

$$T_{crude} = T_{crude,in} + s \frac{(T_{crude,out} - T_{crude,in})}{L_{path}} \quad (23)$$

with  $L_{path}$  the path length and  $s$  the curvilinear abscissa along this path. In other words, the oil temperature increases at a constant rate. The convective heat coefficient is chosen constant equal to  $380\text{W/m}^2 \cdot \text{K}$ .

Conductivity	40 W/m.K
Density	7833 kg/m <sup>3</sup>
Heat capacity	460 J/kg.K
Emissivity	0.85

Table 5: Properties of ASTM A335

## VII. Results

### 1.. Temperature, species and radiative fields in the furnace

Figure 8 displays the structure of the opposed jet flame simulated with *CANTERA* in the conditions of the furnace

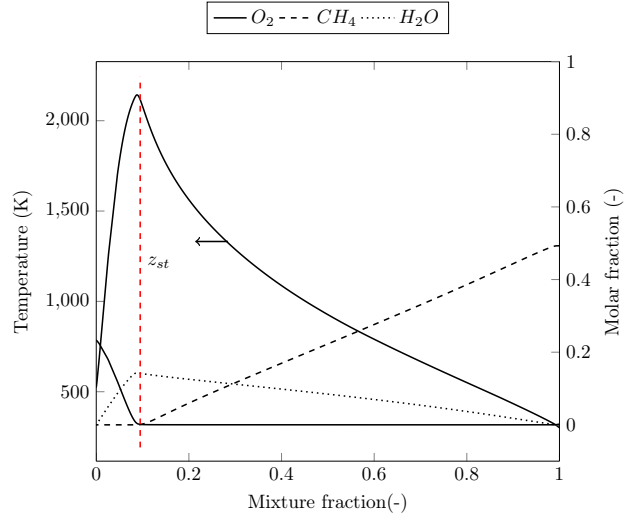


Figure 8: Structure of the diffusion flame at atmospheric pressure computed with GRIMEch 3.0 full chemistry and transport. Strain rate:  $105\text{s}^{-1}$  ; Dashed line marks the stoichiometric mixture fraction  $z_{st}$

and at 1bar (Tab. 1). As  $Le_k \neq 1$ , the temperature and species concentrations are not linear functions of  $z$  [47]. Moreover, it is interesting to note that maximum temperature is below the adiabatic stoichiometric temperature, being  $2225\text{K}$  for this mixture.

To illustrate the 3D flame structure, two vertical cuts of the computed field of temperature (Fig. 9) and radiant species  $\text{CO}_2$  (Fig. 10) are shown in false-color. The highest temperatures are located around the stoichiometric line  $z = z_{st}$ , where optically active species, such as  $\text{CO}_2$ , are also located. Then both the temperature and combustion products decrease when approaching the wall. The domain can be divided into three zones:

- a central zone, where  $\text{CO}_2$  and  $\text{H}_2\text{O}$  are concentrated and are hot,
- a lateral zone, where  $\text{CO}_2$  and  $\text{H}_2\text{O}$  have small values and are cold, i.e. the medium is transparent,
- a mixing/reaction zone, transition between the two previous zones, where all species (reactants and products) are present at an intermediate temperature between the fresh gas and the adiabatic flame temperature.

Figure 11 shows a vertical cut of the radiative source term obtained with *PRISSMA* and the above temperature and composition fields. At the center of the furnace, a positive radiative source term originates from the hot and radiative combustion products. Energy radiates from the central zone to colder regions in the furnace, as products are surrounded by colder gases, cold pipes and refractory walls. Only a small region at the center radiates, all surrounding gases tending to absorb energy from this small

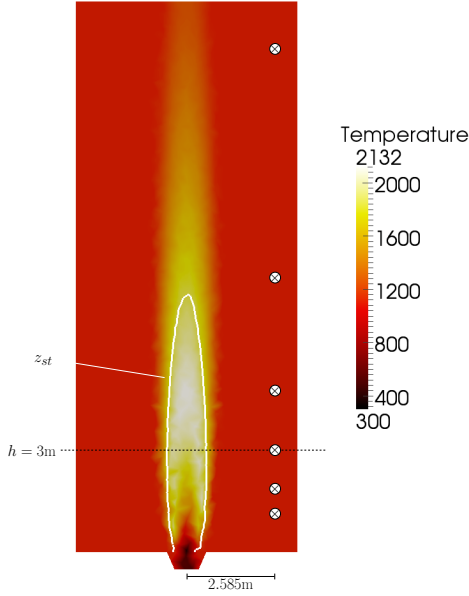


Figure 9: Temperature field of the jet flame computed with *CANDLE* in a vertical plane cut- Stoichiometric line is drawn in white -  $\otimes$  symbols locate incident radiative fluxes probes

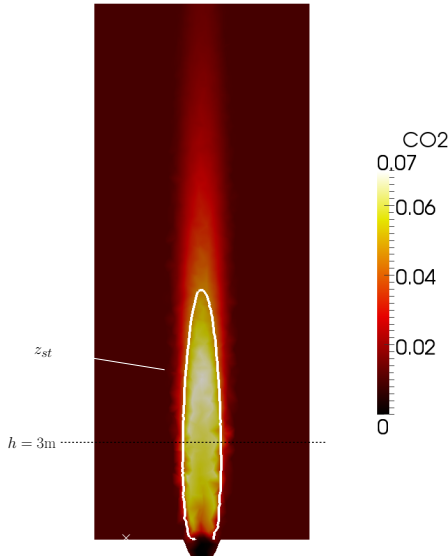


Figure 10: CO<sub>2</sub> field of the jet flame computed with *CANDLE* in a vertical plane cut- Stoichiometric line is drawn in white

region. It is worth noting that this zone of radiative emission is located between  $z = 1m$  and  $5m$ , and  $r = 0$  and  $1m$ . It will be shown later that this region emits a strong radiation towards the pipe surface.

Figure 12 shows the radial profiles of temperature, radiative flux and radiative source term in the horizontal plane situated at a height of  $3m$ . The sources term  $S_r$  is positive in the central region of the jet, where hot gases lose energy. As the maximum concentration of radiating

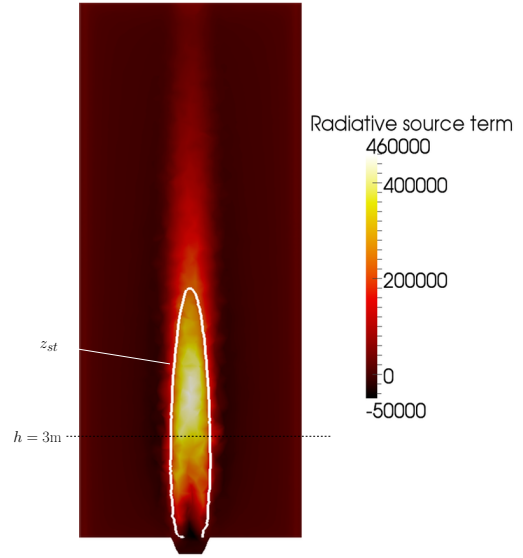


Figure 11: Radiative source field of the jet flame computed with *PRISSMA* in a vertical plane cut- Stoichiometric line is drawn in white

species is located in the hottest zone, a maximum amount of energy is emitted there. On the contrary, in the cold region, energy is absorbed by the gases and the source term is negative. Note that the maximum heat flux is located where the source term is null, which is consistent with the definition of the source term as the spatial derivative of the flux.

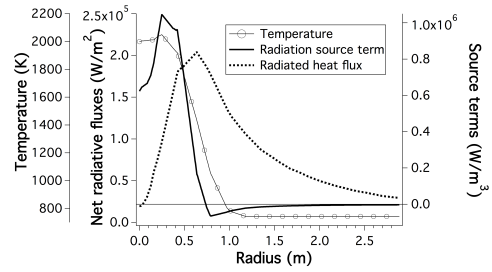


Figure 12: Radial profiles of temperature, radiative source term and flux at  $3m$  of height

## 2.. Evaluation of the incident heat flux on the pipe wall

Figure 13 compares the profile of the incident radiative flux measured *in situ* to the profiles obtained with the simulation described above. Measurements were done between the flame and the pipe, corresponding to the energy received by the pipe from the flame and the refractory walls. To first order, the simulated profile is in good agreement with the experiment. Integrated over the whole furnace, the average measured incident flux is  $52.0kW.m^{-2}$ , which compares well with the  $51.2kW.m^{-2}$  obtained in the simulation. The incident flux is highest in the region  $2 - 5m$ , i.e. closest to the flame. When approaching the



exhaust, gases cool down and radiate less, leading to a decreasing flux.

The maximum flux obtained in the simulation is located at a lower height compared to experiment but it has the correct level. ISO 13074 standards for Petroleum Industry defines the vertical distortion as the ratio between the maximum incident heat flux and the average  $\left| \frac{\bar{q}_{max,inc}}{\bar{q}_{mean,inc}} \right|$  and recommends a value below 1.2. The simulation gives a value of 1.098 while measurements give 1.1538.

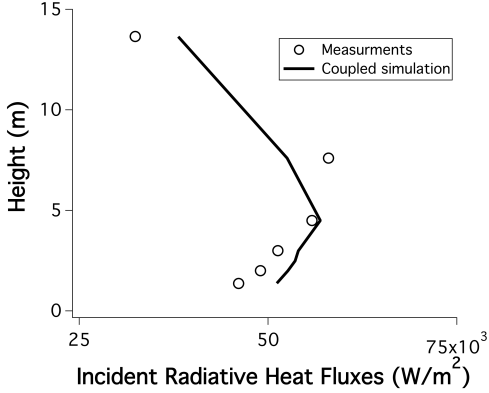


Figure 13: Incident radiative heat flux: simulation versus measurements

### 3.. Energy balance

Taking the pipe wall mean temperature equal to  $\bar{T}_{surf} = 730K$  (see Fig. 14), and the parameters of Tab. 1 and Tab. 4, the total external convective heat flux on the pipe surface  $S$  is equal to :

$$P_{conv,ext} = \bar{h}S\Delta T = \bar{h}S(T_{burnt,out} - \bar{T}_{surf}) = 0.68MW. \quad (24)$$

As expected this value is far below the radiating energy.

The energy transferred to the crude oil calculated with (Eq. 1) is found to be  $P_{pipes} = 9.24MW$ , with Tab.1 and :

$$\begin{aligned} P_{comb} &= \dot{m}_{fuel,in} \times LHV \\ P_{in,gases} &= \dot{m}_{air,in} \times C_{p,air,in} \times T_{air,in} \\ P_{out,gases} &= \dot{m}_{burnt,out} \times C_{p,burnt,out} \times T_{burnt,out} \end{aligned} \quad (25)$$

The energy balance made on crude (Eq. 3) gives  $P_{pipes} = 10.87MW$  :

$$P_{pipes} = \dot{m}_{crude}C_{p,crude}(T_{crude,out} - T_{crude,in}) \quad (26)$$

thanks to Tab.3. Those results are close considering that probing temperature of diphasic flow is difficult resulting from its intermittency.

The radiative energy transferred from the flame, and the refractory walls to the pipes is directly taken from the simulation and gives  $P_{rad,comb} = 10.25MW$ . Adding this to the convective heat transfer  $P_{conv,ext}$  in (Eq. 2) gives  $P_{pipes} = 10.93MW$ .

This energy balance indicates that the predicted amount of energy transferred to the crude oil is in good agreement with measurements, although the modeling approach is relatively simple. Final results show that convection is responsible for no more than 5% of the heat transfer.

### 4.. Pipe wall radiative heat flux and temperature

Figure 14 shows the variation of the mean external surface heat flux and mean internal surface temperature along a path line (20 tubes) obtained from the coupled simulation. Both quantities vary in the same way and are well synchronized, the pipe wall temperature being the direct consequence of the net heat flux on the surface. This temperature is controlled by the boundary conditions applied to the conduction solver, being the heat flux from the hot gas and the heat flux transferred to the oil, which are directly linked to the distance from the flame and the temperature of the crude oil. This leads to typical evolutions as shown in Fig. 14, where periodic peaks mark the influence of the flame, maximum at a height of about  $\approx 4m$ , and the global constant slope is the result of the linear evolution of the crude oil temperature and the constant convective coefficient (Eq. 23). This can be seen from the temperature mean increase rate calculated from the oil temperature reported on Fig. 14, which matches well the pipe wall temperature increase. This means that the present methodology would capture any complexity added to the internal pipe flow, by mean of a modified Nusselt number and temperature evolution.

Note that the mean heat flux is equal to  $22.9kW.m^{-2}$ , i.e. close to the mean heat flux  $23.8kW.m^{-2}$  calculated with the methodology of simple well-stirred furnace proposed by Hottel [48].

In order to better understand the heat transfer processes in such geometry, Fig. 15 details the net heat flux on a selected tube (tube 2) at four different horizontal sections. Almost all tubes have a similar behavior. The angular inhomogeneity induced by the surrounding.

Four major zones of influence may be identified in Fig. 15, depending on the exposure of the tube:

<b>Zone 1 : Flame</b>	$315^\circ < \theta < 45^\circ$
<b>Zone 2 : Tube 3</b>	$225^\circ < \theta < 315^\circ$
<b>Zone 3 : Refractory</b>	$135^\circ < \theta < 225^\circ$
<b>Zone 4 : Tube 1</b>	$45^\circ < \theta < 135^\circ$

Table 6: Zones of influence for tube 2

In the first zone around  $0^\circ$ , the flame is responsible of the highest flux. Zones (2), (3), and (4) correspond to solid to solid interactions. Gases do not absorb much energy in these areas. Fluxes captured in zone (3) are uniform, as they come from the uniform refractory black wall at  $1100K$ . Temperatures of tubes 1, 2 and 3 are close, so that energy transfer in the corresponding zones (2 and 4) are small compared to zones 1 and 3. Moreover, the radiative flux coming from tube 1 is smaller than the flux coming from tube 3 since tube 1 is colder. This picture

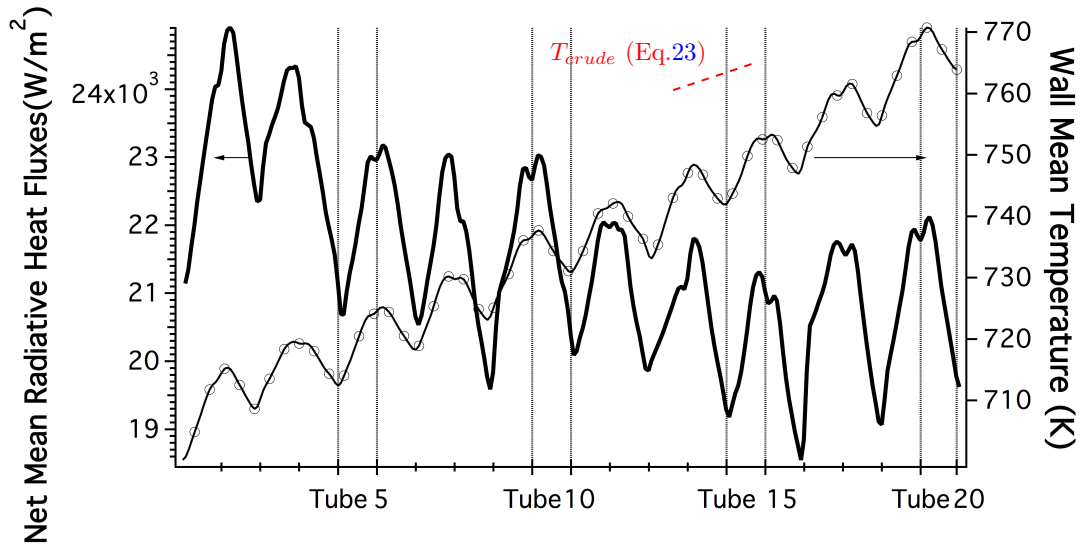


Figure 14: Net radiative flux and surface temperature along a pipe section (tubes 1 to 20)

clearly shows the strong three dimensional dependence of the radiative heat flux on the pipe surface.

Figure 16 shows the same series of horizontal cuts for tube 20, situated closer to the central zone and having a diameter more than twice the diameter of tube 2 (see Fig. 6). The same spatial dependence as for tube 2 is captured, but the received radiative fluxes are smaller as the temperature of the crude oil and of the wall surface are higher. Moreover, the irradiated surface is larger and closer to the flame. The radiative heat fluxes are bigger on this extended surface and lead to increased energy received by the crude in this section.

These results also show the important impact of the radiation from the refractory furnace wall, which provides almost half of the total energy transferred by re-radiating absorbed energy and can give a homogeneous flux to the pipes.

## VIII. Conclusions

A methodology for the coupling of thermal heat transfer processes in a cylindrical furnace was proposed. Focus was made on the resolution of thermal radiation coupled to conduction through the pipe walls, to obtain an accurate prediction of the pipe wall temperature which is a key parameter for fouling. All heat transfer processes were evaluated, showing that radiation predominates and controls the pipe temperature. The major source of radiative energy comes from combustion hot gases, which matches well the measured radiative energy.

The distribution of energy fluxes along and around the pipe was obtained, and revealed the complex 3D structure of the temperature distribution. In each tube a distortion of the heat flux is due to the flame and induces a similar

distortion of the wall temperature. This temperature distortion can lead to two major problems. The first one is related to mechanical constraints which arise with thermal expansion. The second problem depends on the nature of the fluid processed, which may cause coke deposition inside the pipe and increase the thermal resistance.

The crude oil flow inside the pipe is a complex, possibly two-phase flow and was much simplified in the present approach. Further work is needed to improve the modeling of this flow and the consequences in terms of coking. The next step is to couple the present calculation of the pipe temperature to a fouling model, to capture its effect on the thermal behaviour of the system and improve the prediction of fouling.

## IX. Acknowledgment

The authors wish to acknowledge TOTAL for its support.

- [1] Thackeray and P A. The cost of fouling in heat exchange plant. *Institution of Corrosion Science and Technology and Institution of Chemical Engineers Conference*, pages 1–9, May 1979.
- [2] B Garrett-Price. Fouling of heat exchangers: Characteristics, costs, prevention, control and removal. *Noyes Publications*, Jan 1985.
- [3] PA Pilavachi and JD Isdale. European community r&d strategy in the field of heat exchanger fouling: projects. *Heat Recovery Systems and CHP*, 13(2):133–138, 1993.
- [4] X Zhi-Ming, Z Zhong-Bin, and S Yang. Costs due to utility fouling in china. *ECI Conference on Heat Exchanger Fouling and Cleaning: Fundamentals and Applications*, Jan 2008.
- [5] AK Sheikh, SM Zubair, M Younas, and MO Budair. A risk based heat exchanger analysis subject to fouling:: Part ii: Economics of heat exchangers cleaning. *Energy*, 25(5):445–461, 2000.
- [6] E.M Ishiyama, W.R Paterson, and D.I Wilson. The effect of fouling on heat transfer, pressure drop and throughput in refinery preheat trains: Optimisation of cleaning schedules. *Heat Exchanger Fouling and Cleaning VII*, page 9, 2008.

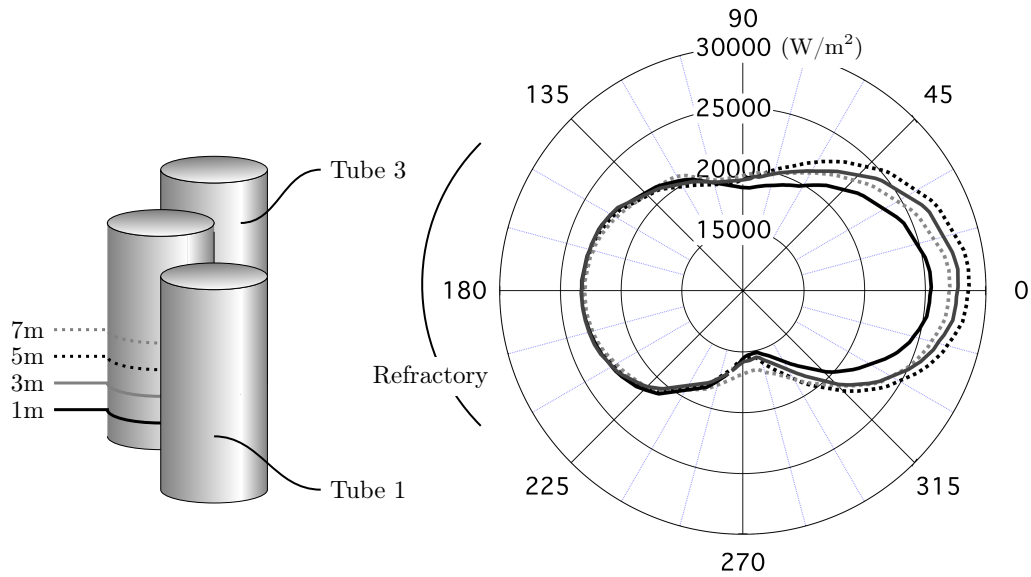


Figure 15: Net heat flux on a pipe section (tube 2) versus angle at 4 different heights;  $0^\circ$  (resp.  $180^\circ$ ) defines the highest exposure to the flame (resp. refractory furnace wall)

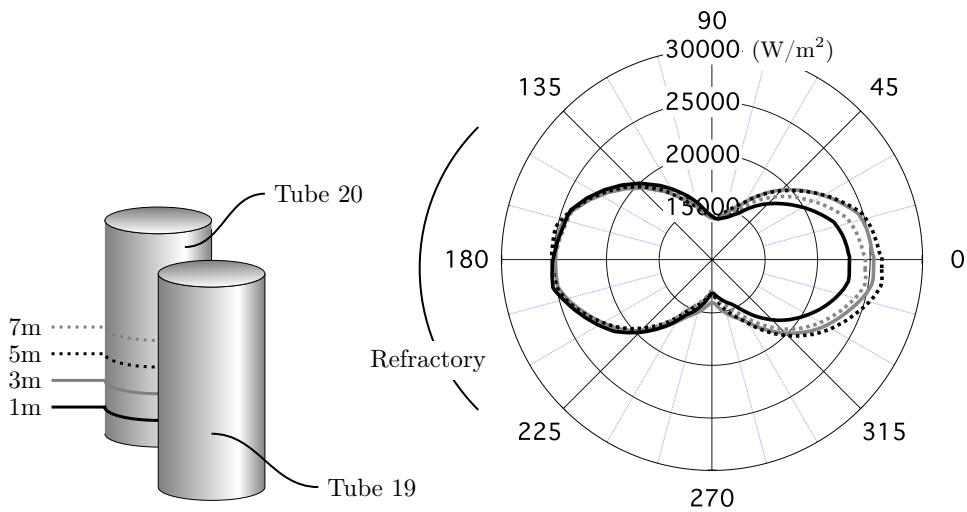


Figure 16: Net heat flux on a pipe section (tube 20) versus angle at 4 different heights;  $0^\circ$  (resp.  $180^\circ$ ) defines the highest exposure to the flame (resp. refractory wall)

- [7] N Epstein. Thinking about heat transfer fouling: A 5 x 5 matrix. *Heat transfer engineering*, 4(1):43–56, 1983.
- [8] S Asomaning. *Heat exchanger fouling by petroleum asphaltenes*. 1997.
- [9] Z Saleh, R Sheikholeslami, and A P Watkinson. Fouling characteristics of a light australian crude oil. *ECI Conference on Heat Exchanger Fouling and Cleaning: Fundamentals and Applications*, Jan 2004.
- [10] M Srinivasan and AP Watkinson. Fouling of some canadian crude oils. *Heat transfer engineering*, 26(1):7–14, 2005.
- [11] BD Crittenden, ST Kolaczowski, and IL Downey. Fouling of crude oil preheat exchangers. *Chemical engineering research & design*, 70(6):547–557, 1992.
- [12] SM Zubair, AK Sheikh, M Younas, and MO Budair. A risk based heat exchanger analysis subject to fouling:: Part i: Performance evaluation. *Energy*, 25(5):427–443, 2000.
- [13] A Niaei, J Towfighi, SM Sadrameli, and R Karimzadeh. The combined simulation of heat transfer and pyrolysis reactions in industrial cracking furnaces. *Applied Thermal Engineering*, 24(14-15):2251–2265, 2004.
- [14] Alireza Bahadori and Hari B Vuthaluru. Novel predictive tools for design of radiant and convective sections of direct fired heaters. *Applied Energy*, 87(7):2194–2202, Jul 2010.
- [15] H Enomoto, Y Tsai, and R Essenhigh. Heat transfer in a continuous model furnace. *ASME*, 1975.
- [16] R Viskanta and M P Mengüç. Radiation heat transfer in combustion systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, 13(2):97–160, 1987.
- [17] GD Stefanidis, B Merci, GJ Heynderickx, and GB Marin. Cfd simulations of steam cracking furnaces using detailed combustion mechanisms. *Computers & chemical engineering*, 30(4):635–649, 2006.
- [18] AJM Oprins and GJ Heynderickx. Calculation of three-dimensional flow and pressure fields in cracking furnaces. *Chemical engineering science*, 58(21):4883–4893, 2003.
- [19] Geraldine J Heynderickx, Arno J M Oprins, Guy B Marin, and Erik Dick. Three-dimensional flow patterns in cracking furnaces with long-flame burners. *AIChE Journal*, 47(2):388–400, 2001.
- [20] A Habibi, B Merci, and GJ Heynderickx. Impact of radiation models in cfd simulations of steam cracking furnaces. *Computers & chemical engineering*, 31(11):1389–1406, 2007.
- [21] X Lan, J Gao, C Xu, and H Zhang. Numerical simulation of transfer and reaction processes in ethylene furnaces. *Chemical Engineering Research and Design*, 85(12):1565–1579, 2007.
- [22] L Wang and H Pitsch. Large-eddy simulation of an industrial furnace with a cross-flow-jet combustion system. *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs*, pages 231–240, 2007.
- [23] R.W Bilger. A mixture fraction framework for the theory and modeling of droplets and sprays. *Combustion and Flame*, 2010.
- [24] PJ Coelho and MG Carvalho. A conservative formulation of the discrete transfer method. *Journal of Heat Transfer*, 119:118, 1997.
- [25] R Koch, W Krebs, S Wittig, and R Viskanta. Discrete ordinates quadrature schemes for multidimensional radiative transfer. *J. Quant Spectrosc. Radiat. Transfer*, 53(4):353–372, 1995.
- [26] W Fiveland. Discrete-ordinates solutions of the radiative transport equation for rectangular enclosures. *Journal of Heat Transfer*, Jan 1984.
- [27] W A Fiveland. *Discrete ordinate methods for radiative heat transfer in isotropically and anisotropically scattering media*. 1987.
- [28] GD Raithby. A finite-volume method for predicting a radiant heat transfer in enclosures with participating media. *Journal of Heat Transfer*, Jan 1990.
- [29] J Amaya, O Cabrit, D Poitou, B Cuenot, and M El Hafi. Unsteady coupling of navier-stokes and radiative heat transfer solvers applied to an anisothermal multicomponent turbulent channel flow. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 111(2):295–301, Jan 2010.
- [30] D Joseph, P Perez, M El Hafi, and B Cuenot. Discrete ordinates and monte carlo methods for radiative transfer simulation applied to computational fluid dynamics combustion modeling. *Journal of Heat Transfer*, Jan 2009.
- [31] F Liu, H Becker, and Y Bindar. A comparative study of radiative heat transfer modelling in gas-fired furnaces using the simple grey gas and the weighted-sum-of-grey-gases models. *International journal of heat and mass transfer*, 41:3357–3371, 1998.
- [32] J.Amaya, E Collado, B.Cuenot, and T.Poinsot. Coupling les, radiation and structure in gas turbine simulations.
- [33] K Claramunt, R Consul, D Carbonell, and CD Perez-Segarra. Analysis of the laminar flamelet concept for nonpremixed laminar flames. *Combustion and Flame*, 145(4):845–862, 2006.
- [34] B Fiorina, O Gicquel, L Vervisch, S Carpentier, and N Darabiha. Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using fpi flamelet tabulation. *Combustion and Flame*, 140(3):147–160, 2005.
- [35] F Liu, H Guo, and G.J Smallwood. Evaluation of the laminar diffusion flamelet model in the calculation of an axisymmetric coflow laminar ethylene-air diffusion flame. *Combustion and Flame*, 144(3):605–618, 2006.
- [36] RW Bilger, SH Starner, and RJ Kee. On reduced mechanisms for methane—air combustion in nonpremixed flames. *Combustion and Flame*, 80(2):135 – 149, 1990.
- [37] D Poitou. Modélisation du rayonnement dans la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente. *ethesis.inp-toulouse.fr*, Jan 2009.
- [38] Thierry Poinsot and Denis Veynante. Theoretical and numerical combustion. page 522, Jan 2005.
- [39] R.W Bilger. The structure of turbulent nonpremixed flames. *Symposium (International) on Combustion*, 22(1):475 – 488, 1989.
- [40] M Abramowitz and I.A Stegun. Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables. national bureau of standards applied mathematics series 55. tenth printing. 1972.
- [41] R S Barlow, JH Franck, AN Karpetsis, and J-Y Chen. Piloted methane/air jet flames: Transport effects and aspects of scalar structure. *Combustion and Flame*, (143):433–449, 2005.
- [42] David G Goodwin. Cantera code site, Jul 2009.
- [43] D Joseph, M El Hafi, R Fournier, and B Cuenot. Comparison of three spatial differencing schemes in discrete ordinates method using three-dimensional unstructured meshes. *Int. J. of Therm. Sci.*, 44(9):851–864, Sep 2005.
- [44] R Koch and R Becker. Evaluation of quadrature schemes for the discrete ordinates method. *J. Quant Spectrosc. Radiat. Transfer*, 84:423–435, 2004.
- [45] F Duchaine, A Corpron, L Pons, V Moureau, F Nicoud, and T Poinsot. Development and assessment of a coupled strategy for conjugate heat transfer with large eddy simulation. application to a cooled turbine blade. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 30(6):Pages 1129–1141, 2009.
- [46] A Bejan and AD Kraus. *Heat transfer handbook*. 2003.
- [47] RS Barlow, JH Frank, AN Karpetsis, and J.Y Chen. Piloted methane/air jet flames: Transport effects and aspects of scalar structure. *Combustion and Flame*, 143(4):433–449, 2005.
- [48] H Hottel and Adel F Sarofim. Hottel and sarofim radiative transfer. *McGraw-Hill Book Compagny*, Jan 1967.

# 6

## Couplage entre conduction thermique et loi de dépôt

Ce chapitre propose une méthodologie de couplage pour calculer le transfert conductif dans un tube soumis à de fortes températures et un dépôt de coke. Les produits traités dans les fours de raffinerie étant de natures très différentes et sans cesse renouvelés, la modélisation de la chimie du dépôt est difficile et une loi de dépôt issue de la littérature, basée sur des considérations globales de l'écoulement, a été choisie.

Dans un premier temps, le calcul couplé d'une expérience de laboratoire reproduisant le dépôt de coke à la surface d'un tube soumis à un flux de chaleur est réalisé. Parallèlement à la validation de la méthodologie de calcul, une première méthode d'extraction des paramètres physico-chimique de la loi de dépôt est détaillée.

Dans un deuxième temps, une tentative d'extraction des paramètres de la loi de dépôt sur le système « Four » complet est proposée. Le développement de cette méthode repose sur l'utilisation exclusive de paramètres de contrôle des installations : les températures de tubes et du pétrole qui est procédé, les débits... La grande variabilité de ces paramètres conduit à évaluer leur impact sur la loi de dépôt reconstruite, par une étude de sensibilité qui permet d'évaluer la confiance que l'on peut accorder à ces résultats.

### I Expérience de Marteney & Spadaccini

Dans le chapitre 1, nous avons vu que l'encrassement des fours de raffinerie est difficile à évaluer pour deux raisons principales : la composition du brut est mal connue et les bruts traités par les raffineries changent de manière journalière. Nous nous sommes intéressés dans cette thèse uniquement à l'impact thermique du dépôt dans les fours. La loi de dépôt utilisée permet de caractériser un brut encrassant de ce point de vue.

Néanmoins, les expériences de laboratoire qui permettent de modéliser l'encrassement sont difficiles à réaliser et concernent généralement des produits raffinés dont la composition est mieux connue. Les carburants aéronautiques sont comptés parmi ces produits raffinés. Le dépôt de coke dans les lignes d'injection de carburant pose des problèmes thermiques et mécaniques majeurs qui peuvent nuire au fonctionnement des moteurs (par ex. mauvaise atomisation du carburant due à l'obstruction de l'injecteur). C'est pourquoi la littérature étudie en détail leur stabilité thermique en fonction de leur composition (teneur en oxygène, en asphaltènes,...).

Cette section décrit la méthode employée pour calibrer la loi de dépôt d'un carburant aéronautique dans l'expérience de *Martenev & Spadaccini* [125]. Le but de cette méthode est de montrer qu'il est possible de caractériser un fluide encrassant en s'attachant au problème thermique uniquement.

L'objectif de cette expérience est de déterminer la stabilité thermique d'un carburant aéronautique saturé en oxygène en le soumettant à des températures proches de celles rencontrées dans les conditions de vol [125]. Cette expérience permet de relier le taux de dépôt à de la température de paroi.

Le carburant s'écoule dans des tubes minces alimentés électriquement et isolés de l'environnement extérieur [126]. Le tube agit alors comme une résistance thermique en transformant cette énergie électrique en chaleur. La puissance électrique est ajustée de manière à obtenir une température constante en sortie. Plusieurs thermocouples viennent relever la température à la surface. Les températures d'entrée et de sortie du carburant sont également connues.

Ainsi, cette expérience permet de soumettre le carburant à des conditions qui provoquent sa décomposition thermique. Au cours du temps, un dépôt se forme et provoque une augmentation de la température du tube. Cette augmentation de température est mesurée.

À la fin de l'expérience, la quantité de carbone déposée dans chaque tube est mesurée par oxydation du produit. Les échantillons sont séchés sous vide à 400K pendant un minimum de 16 heures afin d'enlever tout résidu liquide de carburant. Les sections des tubes sont ensuite installées dans un four à haute température (environ 850K) pour faire réagir ce dépôt avec l'oxygène. Enfin, la masse totale de carbone est déterminée par pesée. Avec cette seconde mesure, le taux de dépôt par unité de surface est obtenu avec une précision d'une dizaine de  $\mu\text{g}/\text{cm}^2$  [125].

Nous proposons de modéliser le dépôt comme une résistance thermique qui vient s'ajouter à une résistance convective liée à l'écoulement du carburant dans le tube. Un couplage thermique se fait alors entre la température du tube, qui agit sur la résistance du tube et le coke qui vient bloquer le transfert d'énergie et par conséquent faire augmenter la température dans le solide (Fig. 6.1).

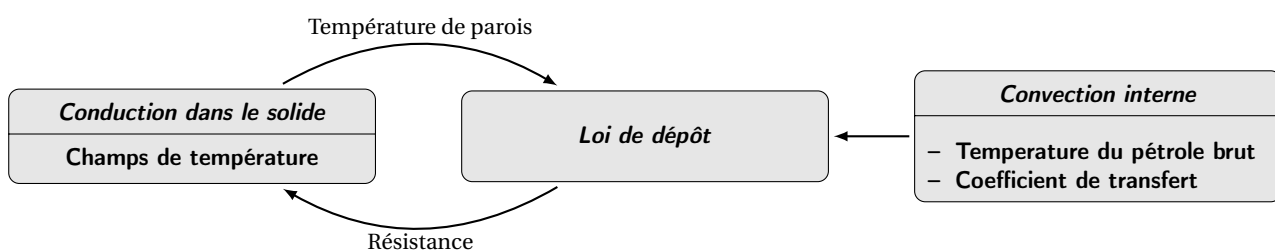


FIGURE 6.1: Couplage entre la conduction dans le solide et la loi de dépôt

## **1. Prédiction du dépôt de coke pour un carburant liquide**

L'étude de l'expérience de *Marteney & Spadaccini* a conduit à la rédaction d'un article, reproduit ici intégralement.

# New methodology to predict coke deposition in liquid oil

T. Pedot<sup>a,\*</sup>, E. Riber<sup>a</sup>, B. Cuenot<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*CERFACS, 4avenue G. Coriolis, 31057, Toulouse Cedex 01, France*

---

## Abstract

In industrial refinery furnaces, the efficiency of the thermal transfer to heat crude oil before distillation is often altered by coke deposition inside the fuel pipes. This leads to increased production and maintenance costs, and requires better understanding and control. Since exact composition of crude oil is not available, one need to model coke deposition with simple fouling law. Crude oil fouling is a chemical reaction that is, at first order, thermally controlled.

The idea is to model the deposition rate by a thermal resistance added to the heated pipe and allows to couple the calculation of the pipe temperature to a fouling law. A simple chemical model is used, and validated against a lab-scale experiment. Comparing the temperature obtained with the simulation to the temperature measured by thermal probes at selected locations shows that the simulation is able to capture the temperature variation at these points. It is shown that coking occurs when the temperature has remained high on both sides of the pipe for a sufficient length.

This paper explains how to extract a fouling law in controlled condition when the deposit is induced by thermal stressing of the crude.

---

## I. Introduction

Thermal instability of liquid fuels refers as fuels subject to thermal degradation. Fuels is a complex mixture of hydrocarbons. Thermal stress results in a complex chemical reactions which depends on many factors such as temperature,  $O_2$  concentration, pressure and contact material [1–3]. Different penalties arise from this deposition process. Performance of aircraft engines, cost of furnace runs are exemple showing the need to understand how to stop fouling.

Many studies denote the complexity of deposition process and are summerized in the  $5 \times 5$  matrix of *Epstein* [4]. Global model for thermal stability have been mainly developed for fouling of jet fuels. The earlier deposition rate models are directly linked to surface temperature (or fluxes transfered through this surface) [5]. As the understanding of this process grew, the number of reactions kept on growing from 1 to 10, trying to capture global chemical behaviour such as  $O_2$  consumption and deposit formation [3, 6, 7].

In industrial furnaces, the process efficiency is controlled by the temperature of the pipes. The thermal resistance caused by coke deposition is strongly damaging the performance of the facility. The presence of hundreds of chemical components, like olefins and parfins, makes each crude oil difficult to model compared to jet fuel.

Lack of developments exists for crude oil deposit models. The model, developed in this paper, allows to capture

the temperature raise regardless of the flow dynamics. All information on flow dynamics is included implicitly in the model parameters. This leads to a new efficient methodology to extract characteristic parameters for crude oil.

## II. Coking

Coking refers in general to all kind of material deposits sticking to the surface. Whatever the circumstances and the nature of this deposit a thermal resistance is created at the surface. This reduces efficiency of operations and global performance of systems.

The fouling of heat exchangers is a serious chronic malfunction. Economical and environmental sanctions are due to under-utilization of facilities, increased pressure drop and increased maintenance costs with significant downtime [8]. The environmental aspect is directly related to the consumption of extra energy trying to overcome or mitigate the economic impacts induced.

Fuels, such as Jet fuel or diesel, originate from refinery process and contain a complex mixture of hundreds of hydrocarbons. The molecular composition of fuels determines their physical properties, engine performance, and thermal stability characteristics. In general, production of fuels meet the needs of industrial specification and do not achieve a specific distribution of hydrocarbons.

The literature relying on thermal decomposition reveals that the characterisation of such petroleum in terms of thermal decomposition is not an easy task [1, 3, 7, 9–11].

Several models have been developed ranging from simple global model to semi-detailed model [6, 12]. From process industry furnaces to aeronautical injector rigs, these

---

\*Corresponding author

Email addresses: pedot@cerfacs.fr (T. Pedot), riber@cerfacs.fr (E. Riber), cuenot@cerfacs.fr (B. Cuenot)



deposits are resistant to high heat transfer. Fouling is a complex phenomenon and different types of fouling have been classified by *Epstein* according to the following mechanisms [4]: crystallization, the formation of aggregates of particles, chemicals, corrosion, biological. Complex numerical investigations were conducted involving complex reaction scheme coupled with flow velocity field [3, 7, 13, 14]. Table 1 identifies common models. Despite this complexity, single step mechanism are heavily used in petroleum industry. The reason of this success is that these models catch the first dependence of coking phenomenon, e.g. temperature and velocity dependences and subsequently describe a "threshold condition" below which no fouling occurs.

Heated-tube apparatus are a commonly used methodology to evaluate oil thermal stability and determine the effect fuel deposits on the heat transfer characteristics of aircraft gas turbine fuel systems [1, 11, 16, 17].

It is proposed here to develop a model for coke prediction and validate by comparison to experiment.

### III. Experiment description

The experiment of *Martenev et al.* is chosen for comparison to the numerical simulation. The method to determine thermal stability of jet fuel is described in detail in [1, 17]

An air-saturated fuel is thermally stressed by an heated pipe close to engine operating conditions. A sketch of this experiment is shown in Fig. 1. The fuel flows through the apparatus at constant flow rate. The tube is insulated from outside to minimize heat losses. It is made of stainless steel (Tab. 2) and acts as a resistance heater to transfer a constant energy to the fluid. Measurements of the fuel flow rates combined to the knowledge of inlet and outlet temperatures allows to compute the energy transferred to the fluid. Table 2-3 list respectively the values of tube parameters and of the *JP5* jet fuel used in this experiment.

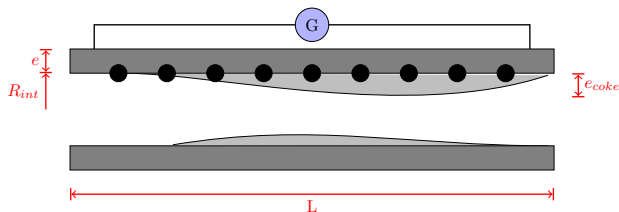


Figure 1: *Martenev & Spadaccini experimental apparatus* [1]

At high temperature, decomposition of the fuel occurs and deposit accumulates at the surface. This deposit opposes thermal resistance. Since electrical power is held constant, the fuel outlet temperature remains also constant and wall temperature increases. Measurements of this temperature is done thanks to thermocouples located at the wall surface.

After the test, the tube is cut into pieces. Deposit is removed, dried and mass of carbon after burn-off is weighted

Parameter	Notation	Value
Tube outer radius	$R_{in}$ (cm)	0.1185
Tube wall thickness	$e$ (cm)	0.04
Tube length	$L$ (m)	2.4
Heat Capacity	$C$ (J/kg·K)	460
Density	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	7800
Conductivity	$\lambda$ (W/m·K)	40

Table 2: *Values of the Stainless Steel grade 316 Parameters*

Parameter	Notation	Value
Heat Capacity	$C_F$ (J/kg·K)	1920
Density	$\rho_F$ (kg/m <sup>3</sup> )	838
Pressure	$P$ (atm)	17
Velocity	$v$ (m/s)	2.1
Flow rate	$\dot{m}$ (kg/s)	$7.77e^{-3}$
Inlet temperature	$T_{int}$ (K)	280
Outlet temperature	$T_{out}$ (K)	520

Table 3: *Values of Jet Fuel JP5 Parameters*

[1]. A correlation between coke deposit and wall temperature is then possible.

### IV. Modelling of convective heat transfer

Convective heat transfer plays a major role in heat transfer to the fuel. This heat transfer is modeled by a convective resistance equal to  $R_{conv} = \frac{1}{h_{conv}}$ . The heat transfer coefficient  $h_{conv}$  characteristic of the *JP5* jet fuel is correlated by the simple *Dittus-Boeher* relation [1]:

$$Nu = 0.023Re^{0.8}Pr^{0.4} \quad (1)$$

where  $Nu$  is the *Nusselt* number,  $Re$  is the *Reynolds* number and  $Pr$  is the *Prandtl* number.

### V. Modelling of coke

The insulating effect of coke is modelled here by a thermal resistance, proportional to the thickness of the coke deposit.

Model	Authors
Watkinson & Epstein [12]	$dR_f/dt = a \exp(-Ea/RT)/V^n$
Epstein [4]	$dR_f/dt = C_b/[a/V + bV^2 \exp(-Ea/RT)]$
Ebert & Panchal [11]	$dR_f/dt = a \exp(-Ea/RT)/Re^n - bV^2$
Yeap [15]	$dR_f/dt = 1/[a/VT^{2/3} + bV^2 \exp(-Ea/RT)] - cV^{0.8}$

Table 1: One-step chemistry models for crude oil fouling [5]

The first models of deposit, summarized in [6], are based on the idea that the amount of carbon deposited on the metal wall is related to its temperature. The mechanism of deposition is reduced to a single overall reaction:



with an *Arrhenius* reaction rate [12] :

$$\frac{dD}{dt} = A \exp\left(-\frac{Ea}{RT}\right) = \dot{\omega} \quad (3)$$

where  $D$  is the deposited mass per unit area. The activation energy  $Ea$  and the pre-exponential constant  $A$  are characteristic of the fuel.

*Martney et al.* gives the deposition rate as a function of wall temperature (Fig. 2) [1]. In this experiment, the deposition rate shows three behaviours of the fluid with temperature. Up to the breakpoint temperature  $T_{BP} = 531\text{K}$ , the fluid cokes moderately. This will be characterized by the overall reaction *Reaction 1*. The first part of the curve often suggests a heterogeneous mechanism occurring at the interface between the solid and the liquid phase. Between 531K and 600K, the deposition rate *Reaction 2* increases fast with temperature. This region is dominated by homogeneous reactions in the liquid phase. Finally, above 600K, hydrocarbons pyrolysis occurs and the deposition rate decreases from lack of oxygen in fuel [18]. These reactions are written according to Eq. 3.

The continuity of deposition rate and its slope is conserved at the break point temperature. In order to keep this continuity, the following relation should be imposed :

$$\dot{\omega}_1|_{T=T_{BP}} = \dot{\omega}_2|_{T=T_{BP}} \quad (4)$$

which gives a relation between the pre-exponential *Arrhenius* constants :

$$A_1 \exp\left(-\frac{Ea_1}{RT_{BP}}\right) = A_2 \exp\left(-\frac{Ea_2}{RT_{BP}}\right) \quad (5)$$

where  $Ea_1$  and  $Ea_2$  are activation energies extracted directly by reading the slope of the graph Fig. 3.

A second relation is obtained by evaluating the slope at the break point temperature  $T_{BP}$  Fig. 3. Derivation of

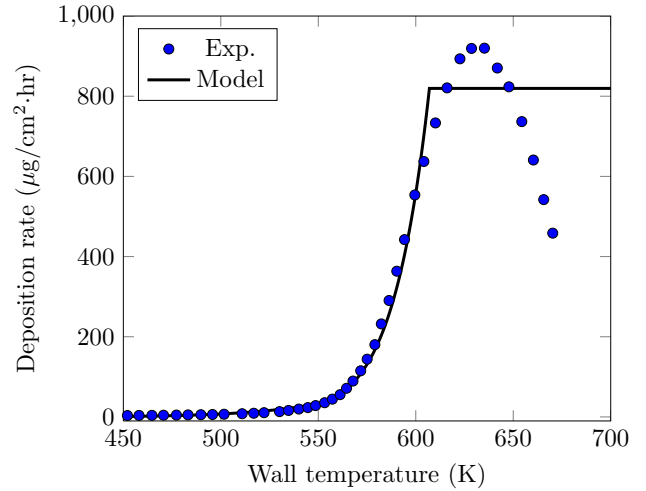


Figure 2: Coke deposit dependence against wall temperature [1]

the deposition rate versus the temperature gives:

$$\frac{d\dot{\omega}}{dT} = \frac{AEa}{RT^2} \exp\left(-\frac{Ea}{RT}\right) \quad (6)$$

$A_2$  can be extracted by applying this relation to the second reaction at the breakpoint temperature:

$$A_2 = \frac{RT_{BP}^2}{Ea_2} \exp\left(\frac{Ea_2}{RT_{BP}}\right) \cdot \left. \frac{d\dot{\omega}_2}{dT} \right|_{T=T_{BP}} \quad (7)$$

The values are summarized in Tab. 4. The resulting curve is plotted in Fig. 2. The deposit rate is well reproduced up to  $T \approx 650\text{K}$ . The fall of the deposition rate at high temperature can not be modelled with this approach. The activation energy must remain positive and another form of deposit rates should be used for this regime. However, this model is sufficient to capture the temperature increase in the experiment and to locate the coke deposit.

The structure of coke can change during the experiment. Compactness can impact both density and conductivity. *Te Velde* [17] conducted a similar experiment and found a linear dependency between coke deposition rate and coke resistance rate versus time. Thus, the conductivity and the density are considered constant and the change

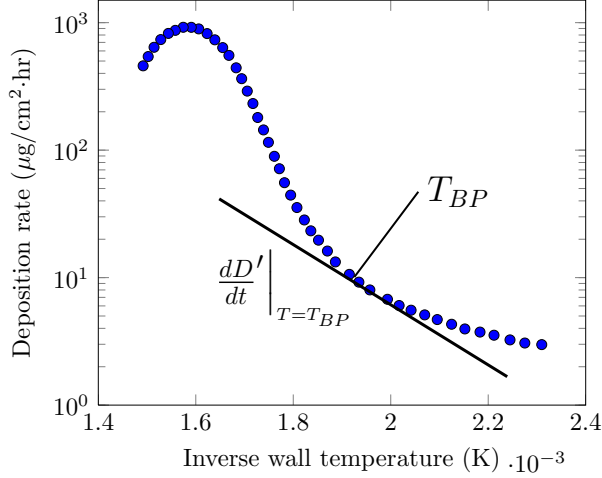


Figure 3: Deposition rate versus inverse wall temperature [1]

	Temperature range	$Ea$ (kJ/mol)	$A$ ( $\mu\text{g}/\text{cm}^2\cdot\text{hr}$ )
Reaction 1	$T < 531\text{K}$	46	$7.72e^5$
Reaction 2	$531\text{K} < T < 600\text{K}$	163.18	$1.38e^{17}$
Reaction 3	$T > 600\text{K}$	-	857.6

Table 4: Kinetic parameters for Jet Fuel JP5 coking

in resistance associated to the deposit is given by:

$$\frac{dR_{coke}}{dt} = \frac{1}{\lambda_c \rho_c} \frac{dD}{dt} \quad (8)$$

where  $R_{coke}$  represents the thermal resistance induced by the coke deposit.  $\lambda_c$  and  $\rho_c$  are respectively the conductivity  $\lambda_c = 0.55\text{W}/\text{K}\cdot\text{m}^2$  and the density of coke  $\rho_c = 1000\text{kg}/\text{m}^3$ .  $R_{coke}$  is finally obtained by integration of Eq. 8.

## VI. Numerical setup

The configuration is simulated with the code *AVTP*, which solves Heat Transfer Equation in solids [19]. A source term is added to reproduce electrical heating :

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = S_T \quad (9)$$

where  $C$  is the heat capacity of the solid and  $\rho$  its density.  $S_T$  is evaluated from the experiment, writting the heat balance between solid and fluid in a permanent regime :

$$S_T V_{tube} = \dot{m} C_F \Delta T \quad (10)$$

where  $V_{tube}$  represents the tube volume,  $\Delta T$  the temperature difference between inlet and outlet and  $C_F$  is the heat capacity of the fluid. The source term is found equal to  $S_T = 4.28 \times 10^8\text{W}/\text{m}^3$  with the values of (Tab. 2-3).

The computational domain is represented in Fig. 4, with adiabatic and *Neumann* conditions. The deposit is viewed as a boundary condition, imposing a flux  $\phi = \frac{T_{wall} - T_{fuel}}{R}$  where the thermal resistance  $R$  is the sum of the convective resistance  $R_{conv}$  and the coke resistance  $R_{coke}$  :

$$R = R_{conv} + R_{coke}(t) = \frac{1}{h} + \int_0^t dR_{coke}(t) \quad (11)$$

To reproduce the behavior at the pipe ends, it is prolonged on both sides, with  $S_T = 0$  in this prolongation.

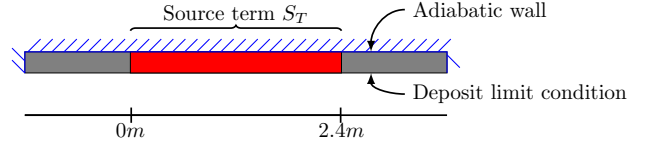


Figure 4: Two dimensionnal axisymmetrical sketch of the Marteney experiment [1]

## VII. Results

An example of the wall temperature profile obtained throughout the duration of the test conducted by *Marteney & Spadaccini* is presented in Fig. 5. The initial rise and subsequent decrease in wall temperature at the tube entrance is believed to be due to the developing thermal boundary layer. At this location, the parameter  $h$  does not reproduce the temperature of the wall. However, this region is not important for deposit prediction. Where the flow is fully developed, i.e. after 0.5m, the initial temperature is well represented and the source term  $S_T$  gives the right amount of power at first instant.

Downstream, the thermal decomposition of the fuel and subsequent deposit become visible effects on the inner wall temperature increases. The power produced inside the pipe is not well transmitted to the fuel due to the added thermal resistance of the deposit, it is stored in the pipe inducing temperature rise.

The numerical results shown in Fig. 5 are in good agreement for 8hr to 24hr. The deposit model reproduces the experiment in terms of resistance and confirms that the deposit is first thermally controlled.

After 32 hours, the model of coke deposition induces high temperatures at the end of the pipe. This is due to the deposit model, which leads to overprediction of temperature above 600K.

This clearly shows the limit of the present method, when no removal terms are included. In reality, the deposition rate decreases over 600K. First, deposit obstructs the pipe and can increase the velocity, which removes some deposit. Secondly, at higher temperature, other reactions are involved that cannot be accounted in a one-step mechanism.

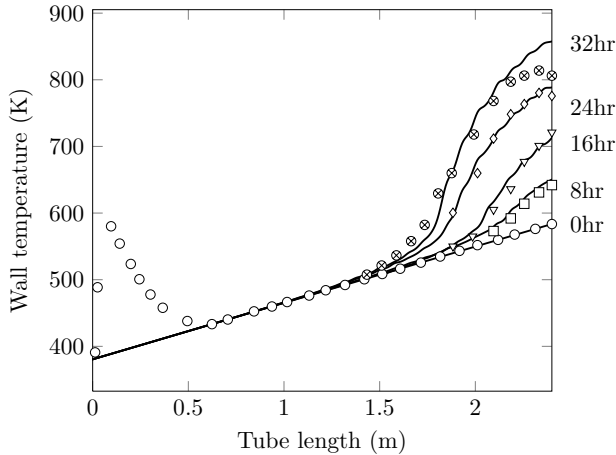


Figure 5: Temperature profiles along the wall pipe at the initial time, 8hr, 16hr, 24hr and 32hr - Symbols are experiments and lines represents the simulation

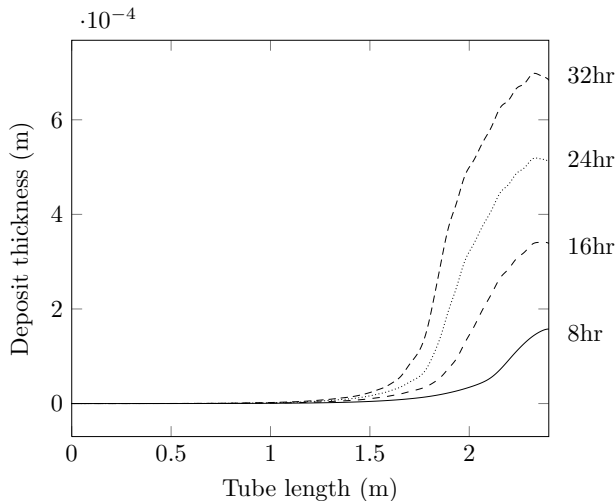


Figure 6: Deposit thickness along the wall pipe at 8hr, 16hr, 24hr and 32hr

Figure 6 plots the deposit thickness along the axial line. After 32hr, the maximum thickness is more than half of the tube radius (Fig. 5).

## VIII. Conclusions

Thermal stability characteristics of fouling of JP5 liquid jet fuel has been evaluated using a simple deposition model on a heated apparatus. This methodology was elaborated on a system widely used in the laboratory. The effect of deposit on temperature of the system is directly linked to heat transfer and the prediction of the temperature is done without considering the flow influence.

The results demonstrate the applicability of the model to capture and evaluate fuel thermal stability. This methodology can be transposed to crude oil for coking furnace.

An evaluation of coke deposit thickness leads to the conclusion that this model at later times must include coke removal. The thickness of the tube is reduced by almost half which makes this removal important.

The model implicitly includes velocity effects. Further work should be done to find a methodology to add explicitly this effect.

- [1] P.J Marteney and L.J Spadaccini. Thermal decomposition of aircraft fuel. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 1986.
- [2] Coordinating Research Council. Aviation Group on Oxidation Stability of Gas Turbine Fuels. Literature Survey Panel. Crc literature survey on the thermal oxidation stability of jet fuel. page 141, Jan 1979.
- [3] J Ervin and S Zabarnick. Computational fluid dynamics simulations of jet fuel oxidation incorporating pseudo-detailed chemical kinetics. *Energy & Fuels*, 12(2):344–352, 1998.
- [4] N Epstein. Thinking about heat transfer fouling: A 5 x 5 matrix. *Heat transfer engineering*, 4(1):43–56, 1983.
- [5] A Watkinson. Fouling of some canadian crude oils. *Heat transfer engineering*, Jan 2005.
- [6] V R Katta and W M Roquemore. Modeling of deposition process in liquid fuels. *Combustion Sciences and Technologies*, 139, 1998.
- [7] J S Ervin, S Zabarnick, and T F Williams. One-dimensional simulations of jet fuel thermal-oxidative degradation and deposit formation within cylindrical passages. *Journal of Energy Resources Technology*, 122(4):229–238, 2000. TP.
- [8] E.M Ishiyama, W.R Paterson, and D.I Wilson. The effect of fouling on heat transfer, pressure drop and throughput in refinery preheat trains: Optimisation of cleaning schedules. *Heat Exchanger Fouling and Cleaning VII*, page 9, 2008.
- [9] O Altin. Carbon deposit formation from thermal stressing of petroleum fuels. *Prepr. Pap.-Am. Chem. Soc.*, Jan 2004.
- [10] U Deshannavar, MS Rafeen, M Ramasamy, and D Subbarao. Crude oil fouling: A review. *Journal of Applied ...*, Jan 2010.
- [11] W.A Ebert and CB Panchal. Analysis of Exxon crude oil slipstream coking data. *Fouling Mitigation of Industrial Heat-Exchange Equipment*, 1997.
- [12] AP Watkinson and DI Wilson. Chemical reaction fouling: A review. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 14(4):361–374, 1997.
- [13] Puneet Goel and Andre L Boehman. Numerical simulation of jet fuel degradation in flow reactors. *Energy & Fuels*, 14(5):953–962, 2000.
- [14] D Sileri, K Sahu, H Ding, and OK Matar. Mathematical modelling of asphaltenes deposition and removal in crude distillation units. *International Conference on Heat Exchanger Fouling and Cleaning VIII*, pages 245–251, 2011.
- [15] BL Yeap, DI Wilson, GT Polley, and SJ Pugh. Retrofitting crude oil refinery heat exchanger networks to minimize fouling while maximizing heat recovery. *Heat transfer engineering*, 26(1):23–34, 2005.
- [16] M Srinivasan. Heat exchanger fouling of some canadian crude oils. 2008.
- [17] J TeVelde, LJ Spadaccini, EJ Szetela, and MR Glickstein. Thermal stability of alternative aircraft fuels. *AIAA, SAE, and ASME, Joint Propulsion Conference, 19 th, Seattle, WA*, 1983.
- [18] R Hazlett, JM Hall, and Martha Matson. Reactions of aerated n-dodecane liquid flowing over heated metal tubes. *Industrial & Engineering Chemistry Product Research and Development*, Jan 1977.
- [19] F Duchaine, A Corpron, L Pons, V Moureau, F Nicoud, and T Poinsot. Development and assessment of a coupled strategy for conjugate heat transfer with large eddy simulation. application to a cooled turbine blade. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 30(6):Pages 1129–1141, 2009.

## 2. Stratégie d'accélération du couplage entre conduction et loi de dépôt

L'objectif de cette section est de proposer une méthode d'accélération de la loi de dépôt afin d'assurer un retour rapide de solution sans perte de prédictibilité sur l'évolution de la température de paroi. Cette stratégie repose sur deux constats : le phénomène de conduction thermique est beaucoup plus rapide que le phénomène de dépôt et la vitesse de dépôt est majorée. La stratégie développée ici permet de désynchroniser ces deux phénomènes et d'accélérer le dépôt afin de réduire le temps de restitution du calcul.

En effet, la vitesse de dépôt du coke est bornée, comme avancée dans la théorie de *Ebert & Panchal* avec la condition de seuil d'encrassement [1] et d'après *Marteney & Spadaccini*. Il existe donc une température  $T_{\max}$  pour laquelle le taux d'évolution de la résistance de dépôt (Eq. (4.2)) est maximum :

$$\frac{dR_{\text{coke}}}{dt} = A \exp\left(-\frac{Ea}{RT}\right) < \frac{dR_{\text{coke,max}}}{dt} = A \exp\left(-\frac{Ea}{RT_{\max}}\right) \quad (6.1)$$

Par exemple, dans un problème unidimensionnel où un tube reçoit un flux  $\phi$  engendrant un dépôt, le transfert par conduction s'installe rapidement et le problème thermique est quasi-stationnaire. A chaque instant à la surface du tube, la résistance thermique et le flux thermique sont liés par :

$$\Delta T_m = \phi R_{eq} \quad (6.2)$$

où la résistance équivalente est la somme des résistances  $R_{eq} = R_{\text{tube}} + R_{\text{coke}}$ .

La quasi-stationnarité du flux permet de relier la variation de température au taux de dépôt à la paroi par dérivation temporelle de l'Eq. (6.2) :

$$\frac{d}{dt} \Delta T_m = \phi \frac{d}{dt} R_{eq} + R_{eq} \frac{d}{dt} \phi \quad (6.3)$$

Dans le cas où le flux et la résistance thermique du tube sont constants, la variation de température est directement proportionnelle à la variation de la résistance du dépôt  $R_{\text{coke}}$  :

$$d\Delta T_m = \phi dR_{\text{coke}} + R_{eq} d\phi < d\Delta T_{m,\max} \quad (6.4)$$

avec  $d\Delta T_{m,\max}$  l'augmentation maximale de température correspondant au dépôt de coke maximale possible  $dR_{\text{coke,max}}$ .

En utilisant Eq. (6.4), il existe un coefficient  $\alpha_c = \frac{dt_{\text{coke}}}{dt_{\text{cond}}}$  tel que :

$$\alpha_c \cdot d\Delta T_m < d\Delta T_{m,\max} \quad (6.5)$$

avec  $dt_{\text{cond}}$  le temps caractéristique de la conduction dans le solide (égal au pas de temps imposé par le nombre de *Fourier*) et  $dt_{\text{coke}}$  le temps chimique du dépôt de coke.

Il est possible de choisir un coefficient  $\alpha_c$  maximal qui autorisera une variation de température maximale, c'est-à-dire qui contrôlera la quantité maximale de dépôt à chaque itération. Cette limite imposée par  $\alpha_c$  sur la variation de la température, permet de réduire considérablement les temps de calcul nécessaires tout en assurant une stabilité au calcul.

Voici les différentes étapes du calcul illustrées sur le schéma de la Fig. 6.2 :

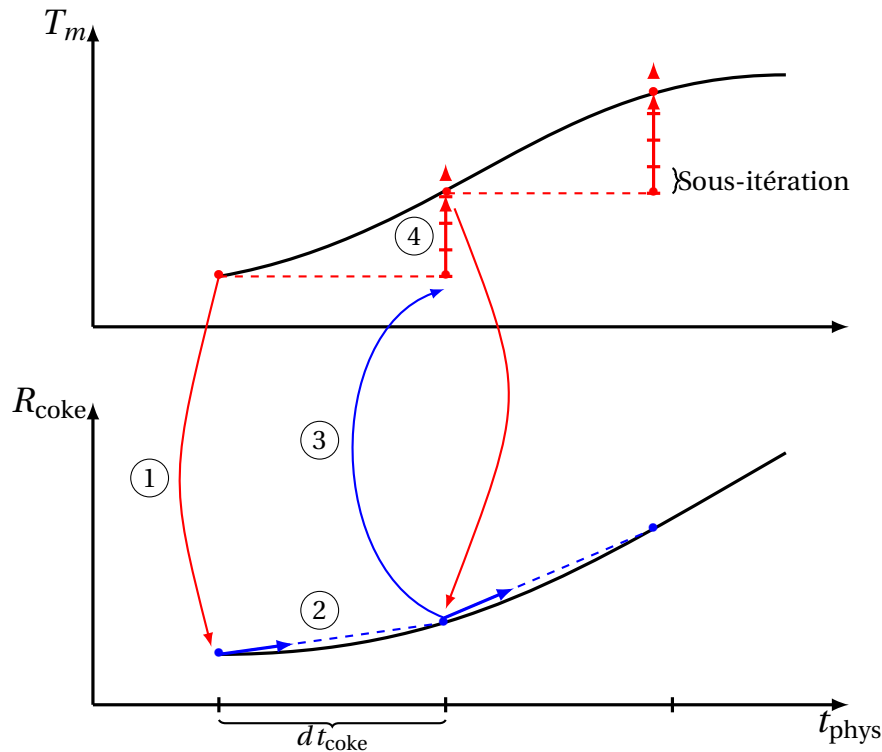


FIGURE 6.2: Schéma de principe du couplage thermique entre la température de la paroi et la loi de dépôt

Étape 1 : Envoi de la température du mur  $T_m$  à la loi de coke,

Étape 2 : Intégration de la loi de dépôt  $\frac{d}{dt}R_{\text{coke}}$  entre  $t_{\text{phys}}$  et  $t_{\text{phys}} + dt_{\text{coke}}$ ,

Étape 3 : Mise à jour des conditions limites dans le code thermique à  $t_{\text{phys}} + dt_{\text{coke}}$ ,

Étape 4 : Convergence du calcul thermique en assurant sa stabilité numérique (sous-itérations).

Le choix de la valeur de  $\alpha_c$  est primordial car il conditionne l'erreur sur la prédiction de la température. L'objectif est de déterminer un optimum qui assure un retour rapide de solution sans perte de qualité.

La méthode de couplage énoncée précédemment a été testée pour accélérer le calcul sur l'expérience de *Marteny & Spadaccini*. Les mêmes paramètres numériques ont été utilisés. Une valeur de  $\alpha_c$  a été choisie égale à 200 pour autoriser une variation maximale de température de 1K.

L'erreur entre les calculs synchronisé ( $\alpha_c = 1$ ) et désynchronisé ( $\alpha_c = 200$ ) est négligeable (Fig. 6.3). Cette erreur est d'autant plus forte que la vitesse de dépôt augmente. Le calcul a pu être accéléré d'un facteur 200.

## II Extraction de données sur site

Nous avons vu précédemment comment modéliser le dépôt de coke uniquement par des considérations thermiques. Cette loi a été établie sur une expérience de laboratoire dans laquelle un carburant aéronautique est utilisé, dans des conditions laminaires et monophasiques. Dans les tubes de four, l'écoulement est diphasique et turbulent (Chap. 3), le flux surfacique reçu par les tubes n'est pas

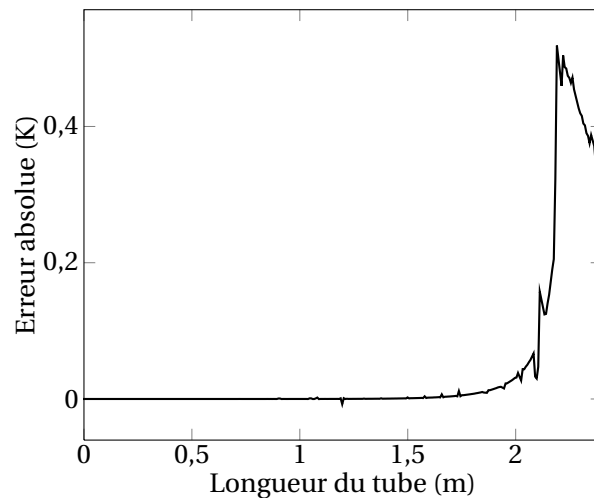


FIGURE 6.3: Erreur absolue sur la température du mur entre couplages synchronisé ( $\alpha_c = 1$ ) et désynchronisé ( $\alpha_c = 200$ ) dans l'expérience de Marteney & Spadaccini

constant du fait de la présence de la flamme. Pour ces raisons, le passage des conditions expérimentales aux conditions réelles sur site n'est pas aisé. Compléxifier la loi de dépôt pour qu'elle prenne en compte tous les phénomènes présents est une tâche qui dépasse le cadre de ce travail. A la place, une seconde méthode pour extraire cette loi à l'aide de données *in situ* est proposée. La calibration prendra implicitement en compte les changements de mode opératoire dans les contraintes physiques.

Le modèle de dépôt de coke est directement lié à la température de paroi. Afin d'extraire une loi de dépôt il est nécessaire, comme dans l'expérience de *Marteney & Spadaccini*, de se placer dans des conditions où la puissance transférée, la température et le débit d'entrée du brut sont considérés constants. L'augmentation de la température de paroi ne sera alors liée qu'à la présence d'un dépôt de coke sur la paroi interne et non à un changement de fonctionnement de l'installation.

Afin d'extraire aisément une loi de dépôt un certain nombre d'hypothèses sont donc nécessaires :

- l'écoulement de brut est monophasique,
- le flux d'énergie transmis au pétrole brut est stationnaire,
- les débits de combustibles, de R.AT. et d'air sont stationnaires,
- les températures d'entrée de combustibles, de R.AT. et d'air sont constantes,
- la capacité thermique du brut  $C_p$  est indépendante de la température,
- le coefficient conducto-convectif  $h$  est constant quel que soit l'état de surface du tube,
- la vitesse de mise à l'équilibre thermique est rapide comparée à la vitesse de dépôt.

Les grandeurs considérées stationnaires (qui ne le sont pas dans la réalité) représentent en fait une moyenne sur l'ensemble du four pris sur une plage de fonctionnement donnée. Nous obtenons ainsi de bons ordres de grandeurs pour les paramètres de cokage.

## 1. Bilan thermique sur un tube

La figure 6.4 schématise le bilan d'énergie à la paroi d'un tube de rayon  $R$ . Localement, un flux  $\delta\dot{Q}$  est transmis au tube par la flamme. La température externe du tube vaut  $T_m$  localement,  $T_{e,m}$  en entrée

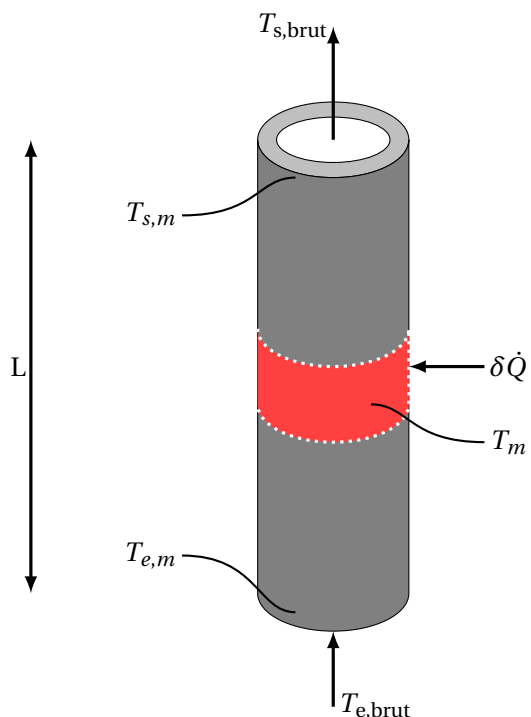


FIGURE 6.4: Bilan d'énergie sur un tube

et  $T_{s,m}$  en sortie. Le débit du brut dans ces tubes est  $\dot{m}$ . Le brut est amené de la température  $T_{e,brut}$  à  $T_{s,brut}$ .

Le profil axial de température dans le brut est stationnaire. Un bilan sur une tranche de longueur  $dL$  (Fig. 6.4) :

$$\delta\dot{Q} = \dot{m}C_p dT_{brut} \quad (6.6)$$

où  $dT_{brut}$  est la variation de température et  $\delta\dot{Q}$  l'énergie reçue.

Le transfert de puissance à l'élément de fluide à la température  $T_{brut}$  se fait par convection sur la surface élémentaire  $dS = 2\pi r dL$  à la température  $T_m$ , et vaut :

$$\delta\dot{Q} = \delta U dS (T_{brut} - T_m) \quad (6.7)$$

où  $\delta U$  est le coefficient d'échange thermique convectif local.

L'égalisation de Eq. (6.6) et Eq. (6.7) donne :

$$\dot{m}C_p dT_{brut} = \delta U dS (T_{brut} - T_m) \quad (6.8)$$

Après réorganisation des deux membres, nous trouvons :

$$\frac{dT_{brut}}{T_{brut} - T_m} = \frac{\delta U}{\dot{m}C_p} dS \quad (6.9)$$



En intégrant sur toutes la longueur du tube  $L$ , le bilan global s'écrit (Fig. 6.4) :

$$\int_{T_{e,\text{brut}}}^{T_{s,\text{brut}}} \frac{dT_{\text{brut}}}{T_{\text{brut}} - T_m} = \int_0^L \frac{\delta U}{\dot{m}C_p} dS \quad (6.10)$$

En posant  $\Delta T_i = T_{i,m} - T_{i,\text{brut}}$ , où  $i$  désigne l'entrée ou la sortie du tube, le bilan thermique s'écrit :

$$\ln \frac{\Delta T_e}{\Delta T_s} = - \frac{US}{\dot{m}C_p} \quad (6.11)$$

ou

$$U(t) = - \frac{\dot{m}C_p}{S} \ln \frac{\Delta T_e}{\Delta T_s} \quad (6.12)$$

Ici, la température du mur  $T_m$  a été implicitement considérée comme constante. En réalité celle-ci est inhomogène. Il s'agit d'une première approximation que l'on peut éventuellement améliorer en notant que ce qui nous interesse est la variation de la différence de température  $d\Delta T_i$ .

La différence de température moyenne effective (moyenne logarithmique) s'écrit :

$$\Delta T_{LMTD} = \frac{\Delta T_e - \Delta T_s}{\ln \frac{\Delta T_e}{\Delta T_s}} \quad (6.13)$$

le coefficient de transfert global sous condition d'encrassement s'écrit :

$$U(t) = \frac{\dot{Q}}{S\Delta T_{LMTD}} \quad (6.14)$$

## 2. Mesure du dépôt par bilan thermique

Pour mesurer la résistance thermique induite par le dépôt de coke, le coefficient de transfert global initial  $U(t=0) = U_p$  (condition propre sans dépôt) est comparé avec le coefficient thermique  $U(t) = U$  au cours du temps. Le coefficient de transfert global peut être vu comme l'inverse d'une résistance thermique :

$$R(t) = \frac{1}{U(t)} \quad (6.15)$$

où  $R_{\text{coke}}$  est la résistance due au dépôt.

Par associativité des résistances thermiques, on a :

$$R(t) = R(t=0) + R_{\text{coke}}(t) \quad (6.16)$$

La résistance thermique par convection est considérée comme constante et égale à  $R(t=0) = \frac{1}{h} = \frac{1}{U_p}$ . La résistance thermique due au dépôt  $R_{\text{coke}}$  est donc donnée par :

$$R_{\text{coke}}(t) = \frac{1}{U(t)} - \frac{1}{U_p} = \frac{S\Delta T_{LMTD}}{\dot{Q}} - \frac{1}{U_p} \quad (6.17)$$

Il est à noter que cette relation peut conduire à une résistance négative. En effet, la rugosité de la surface de transfert permet un transfert plus important d'énergie dans une condition encrassée par rapport à une condition propre, car elle augmente les transferts convectifs par augmentation de la rugosité. Si la couche de dépôt est suffisamment faible, le transfert induit peut être plus fort en condition encrassée. Ce problème peut être corrigé en évaluant le transfert conducto-convectif initial à l'aide d'une corrélation.

En réalité, seule l'information sur la variation de cette quantité au cours du temps est importante pour la résolution de notre problème. Il ne nous est donc pas nécessaire de connaître la valeur absolue de cette variable mais seulement sa dérivée temporelle :

$$\begin{aligned} \frac{dR_{\text{coke}}}{dt} &= \frac{d[1/U(t)]}{dt} = S \frac{d}{dt} \left[ \frac{\Delta T_{LMTD}}{\dot{Q}} \right] \\ &= A \exp\left(-\frac{Ea}{RT}\right) \end{aligned} \quad (6.18)$$

### 3. Construction de la loi de coke dans le Feyzin

Les données utiles sont représentées Fig. 6.5. Toutes sont considérées comme stationnaires sauf la température de paroi  $T_{s,m}$  en sortie. Les mesures extraites sont :

- les débits d'entrée du combustible, de l'air et du R.AT. dans les tubes,
- les températures d'entrée et de sortie du brut,
- les températures des parois côté flamme,
- les températures d'entrée et de sortie des gaz dans le four.

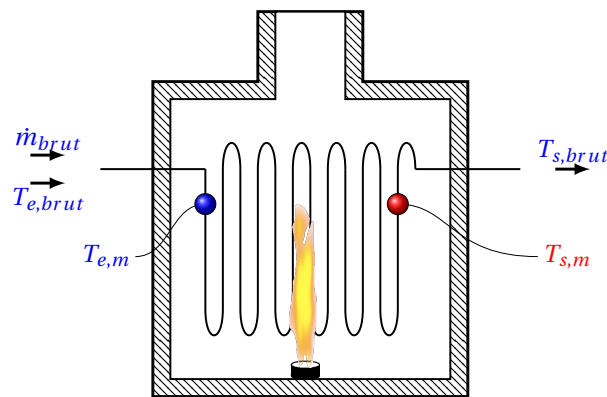


FIGURE 6.5: Données extraites du four de Feyzin

Les données brutes issues directement des mesures bruitées. Pour réduire ce bruit, une approche consiste à remplacer la série de données temporelles par la valeur obtenue à partir d'un polynôme. Pour extraire la loi de dépôt, la méthode de filtrage doit permettre de conserver au mieux l'amplitude et l'allure du signal. *Savitzky & Golay* ont montré qu'une méthode polynomiale glissante pouvait donner un résultat identique à une méthode des moyennes pondérées car les coefficients restent constant pour chaque valeur. Elle a également l'avantage d'être simple. Cette méthode est détaillée dans *Numerical Recipes* [127].

Les températures du brut sont représentées Fig. 6.5 et 6.6 et le débit du brut Fig. 6.7, où sont reportées les mesures directes et les mesures filtrées.

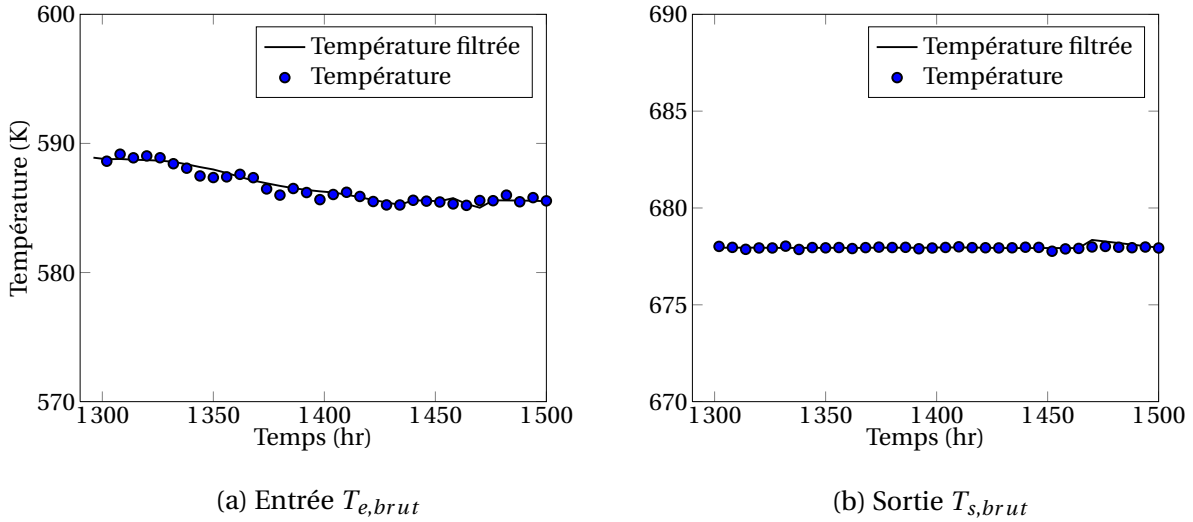
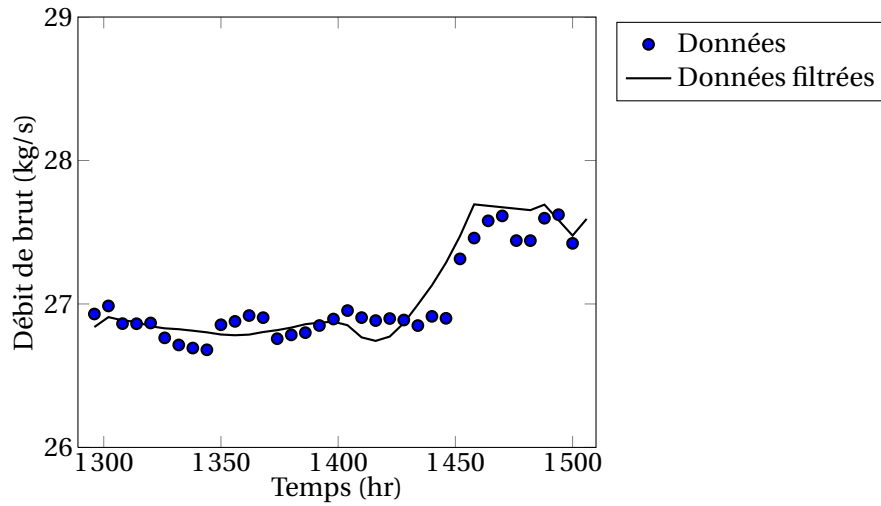


FIGURE 6.6: Évolution temporelle de la température du pétrole

FIGURE 6.7: Évolution temporelle du débit de pétrole brut  $\dot{m}$ 

Elles sont quasi-constantes, la puissance transférée  $\dot{Q}$  varie seulement avec le débit Eq. (6.6). Les valeurs obtenues, avec  $C_{p,brut} = 3500 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$ , sont tracées Fig. 6.8. Des variations sont observées, mais restent dans un intervalle rétreint [8,5 – 10MW].

La température de la paroi du tube en sortie est tracée Fig. 6.9. Cette valeur augmente au cours du temps et témoigne de la présence d'un dépôt à l'intérieur du tube. Après 1480 heures de fonctionnement, la température de la paroi et la puissance transférée au brut chutent brusquement : le débit de combustible a été diminué pour diminuer la puissance dégagée par combustion et ainsi éviter une trop forte contrainte thermique sur les parois des tubes.

A partir de ces données, et en utilisant Eq. (6.18). L'extraction de l'énergie d'activation de la loi est illustrée sur la Fig. 6.10, où on a tracé  $\frac{dR_{coke}}{dt}$  en fonction de  $1000/T_m$ . D'après Eq. (6.18) :

$$\ln\left(\frac{dR_{coke}}{dt}\right) \propto -\frac{Ea}{RT_m} \quad (6.19)$$

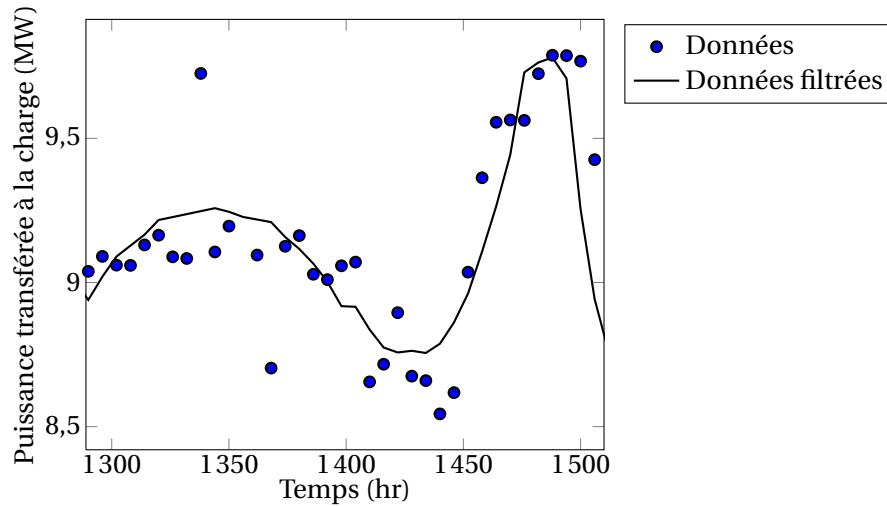


FIGURE 6.8: Évolution temporelle de la puissance échangée entre la flamme et le pétrole brut

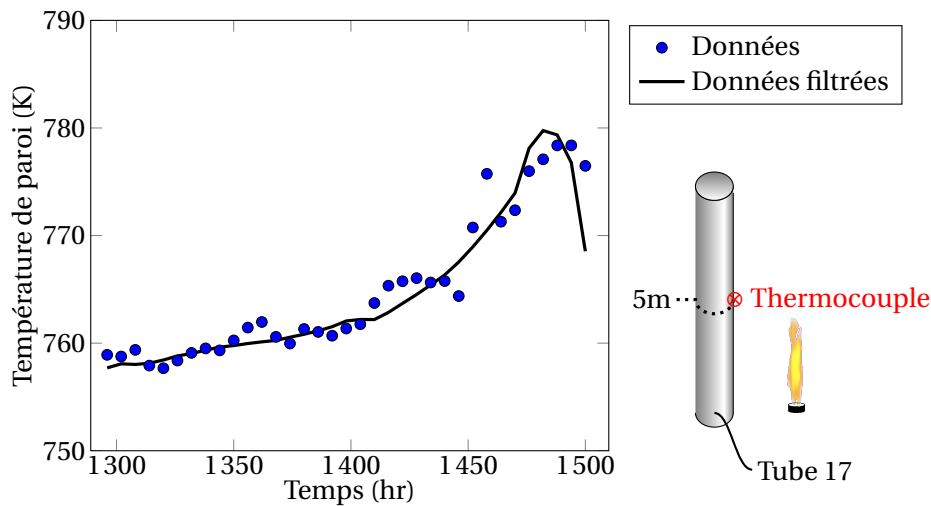


FIGURE 6.9: Température de la paroi du tube 17 à 5m en fonction du temps

donc la pente de la courbe donne directement  $Ea = 297\text{kJ/mol}$ . La constante préexponentielle peut également être obtenue et est égale à  $A = 5 \cdot 10^{16}$ . Cette valeur est moins élevée que dans l'expérience de *Marteny & Spadaccini* et s'explique par le fait que les effets de la vitesse sont inclus dans la constante préexponentielle et dans l'énergie d'activation.

La vitesse du dépôt est beaucoup plus faible que celle obtenue dans l'expérience de laboratoire où l'écoulement est laminaire. En effet, l'arrachement du dépôt dans cette dernière est beaucoup plus faible que dans l'écoulement diphasique du brut s'écoulant dans les tubes du four.

Il est intéressant de noter que la plupart des points de mesures se situent entre 760K et 770K (1000/1,315 et 1000/1,295). Cette plage peut être interprétée comme une plage de confiance donnée à la loi de coke. Au-delà, la validité de la loi de dépôt n'est plus garantie. Nous pouvons d'ores et déjà prédire que le dépôt surviendra pour des températures supérieures à 760K (1000/1,315).

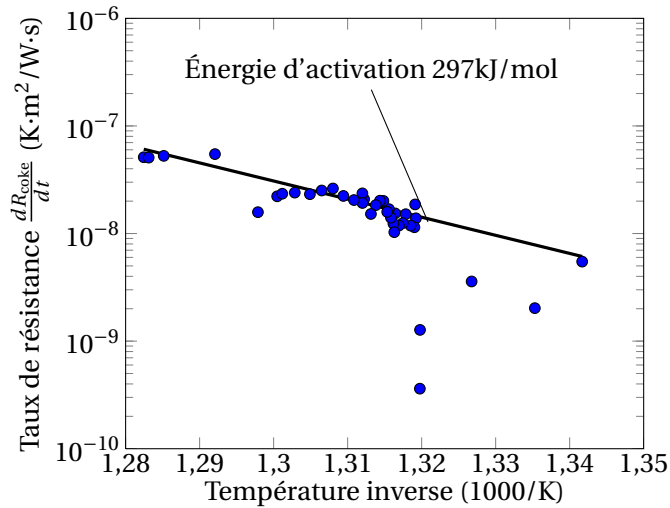


FIGURE 6.10: Variation du taux de résistance  $\frac{dR_{\text{coke}}}{dt}$  en fonction de  $1000/T_m$

### III Étude de sensibilité

Les données précédentes ont été extraites de mesures effectuées sur site. Afin d'extraire les quantités souhaitées, des hypothèses simplificatrices ont été effectuées. Une hypothèse forte est que le coefficient de transfert de chaleur  $h$  ne change pas au cours des mesures. Dans le chapitre 3, nous avons vu que ce coefficient balaye une plage très importante de valeurs. La valeur de  $h$  varie également fortement avec l'état de surface du tube : le dépôt vient changer la rugosité et peut améliorer temporairement le transfert de chaleur par convection ; l'écoulement est turbulent et le changement d'état du fluide est important. De plus, les données ont été extraites sur une période relativement longue, dans laquelle le pétrole traité et la composition du combustible brûlé ont sûrement changé.

Afin d'évaluer la confiance à accorder à la loi de coke extraite, trois erreurs possibles sont étudiées :

- l'erreur sur la puissance transférée au fluide  $\dot{Q}$ ,
- l'erreur sur le coefficient de transfert global  $U$ ,
- l'erreur sur la résistance thermique « coke »  $R_{\text{coke}}$ .

#### 1. Erreur sur la puissance transférée au fluide

L'énergie transférée peut-être évaluée de deux manières différentes : soit par un bilan d'énergie sur le pétrole brut Eq. (6.6), soit par un bilan sur l'énergie perdue par les gaz brûlés.

Le bilan d'énergie sur la charge du brut est donné par l'Eq. (6.6). La quantité d'énergie dépend de la bonne évaluation du débit de la charge  $\dot{m}$ , de la capacité thermique  $C_p$  et de la différence de température  $\Delta T_{\text{brut}}$ . L'erreur sur  $C_p$  est considérée comme nulle comparée aux erreurs liées à la mesure.

Par différentiation de  $\dot{Q}$ , on obtient :

$$d\dot{Q} = \frac{\partial \dot{Q}}{\partial \dot{m}} d\dot{m} + \frac{\partial \dot{Q}}{\partial \Delta T_{\text{brut}}} d\Delta T_{\text{brut}} \quad (6.20)$$

avec la relation Eq. (6.6) :

$$\frac{\partial \dot{Q}}{\partial \dot{m}} = C_p \Delta T_{\text{brut}} \quad (6.21)$$

$$\frac{\partial \dot{Q}}{\partial \Delta T_{\text{brut}}} = \dot{m} C_p \quad (6.22)$$

L'erreur relative sur la puissance reçue par le brut est donc :

$$\frac{\delta \dot{Q}}{\dot{Q}} = \left| \frac{\delta \dot{m}}{\dot{m}} \right| + \left| \frac{\delta \Delta T_{\text{brut}}}{\Delta T_{\text{brut}}} \right| \quad (6.23)$$

## 2. Erreur sur le coefficient d'échange

Par une analyse similaire, la dérivation de l'équation Eq. (6.14) donne l'erreur sur le coefficient d'échange global :

$$\delta U_e = \left| \frac{\partial U_e}{\partial \dot{Q}} \right| \delta \dot{Q} + \left| \frac{\partial U_e}{\partial \Delta T_e} \right| \delta \Delta T_e + \left| \frac{\partial U_e}{\partial \Delta T_s} \right| \delta \Delta T_s \quad (6.24)$$

L'erreur relative donne :

$$\frac{\delta U_e}{U_e} = \frac{\delta \dot{Q}}{\dot{Q}} + A \left[ \left| \frac{1}{AB \Delta T_s} - 1 \right| \delta \Delta T_s + \left| \frac{1}{AB \Delta T_e} - 1 \right| \delta \Delta T_e \right] \quad (6.25)$$

avec  $A = 1 / (\Delta T_e - \Delta T_s)$  et  $B = \ln \Delta T_s / \Delta T_e$

## 3. Erreur sur la résistance thermique due au dépôt

Enfin, l'erreur sur la quantité  $R_{\text{coke}}$  Eq. (6.17) dépend des deux paramètres  $U(t=0) = U_p$  et  $U(t) = U_e$  calculés précédemment.

L'erreur maximale sur  $R_{\text{coke}}$  est donnée par :

$$\delta R_{\text{coke}} = \left| \frac{\partial R_{\text{coke}}}{\partial U_p} \right| \delta U_p + \left| \frac{\partial R_{\text{coke}}}{\partial U_e} \right| \delta U_e \quad (6.26)$$

Chacun des termes est calculé avec la relation Eq. (6.17) :

$$\frac{\partial R_{\text{coke}}}{\partial U_p} = \frac{1}{U_p^2} \quad (6.27)$$

$$\frac{\partial R_{\text{coke}}}{\partial U_e} = -\frac{1}{U_e^2} \quad (6.28)$$

La combinaison des deux équations précédentes Eq. (6.26)-6.28 donne :

$$\delta R_{\text{coke}} = \frac{\delta U_p}{U_p^2} + \frac{\delta U_e}{U_e^2} \quad (6.29)$$

#### 4. Évaluation des erreurs sur les données du four du DSV *Feyzin*

Considérons une erreur de 5K sur la mesure de température et une erreur de 1kg/s sur le débit massique de la charge de pétrole brut :

$$\frac{\delta \dot{m}}{\dot{m}} = \frac{1}{27} = 0,037 \quad (6.30)$$

$$\frac{\delta \Delta T_{\text{brut}}}{\Delta T_{\text{brut}}} = \frac{5}{87} = 0,057 \quad (6.31)$$

où la valeur moyenne du débit mesurée est  $\overline{\dot{m}} = 27\text{kg/s}$  et la valeur de la différence de température moyenne du brut  $\overline{\Delta T_{\text{brut}}} = 87\text{K}$ .

L'erreur relative commise sur la puissance reçue est alors égale à :

$$\frac{\delta \dot{Q}}{\dot{Q}} = 0,037 + 0,057 = 0,094 \quad (6.32)$$

L'erreur relative de 9.4% est équivalente à la fluctuation du signal autour de la valeur moyenne du graphique Fig. 6.8 et confirme la confiance donnée aux données utilisées.

L'Eq. (6.25) donne l'erreur faite sur le coefficient de transfert dépôt. Les valeurs moyennes de  $\Delta T_e$  et  $\Delta T_s$  sont égales respectivement à 29K et 78K. Les paramètres valent  $A = 0,022$  et  $B = 0,878$ .

$$\frac{\delta U_e}{U_e} = 0,116 + 0,022 \times [0,334 \times 5 + 0,654 \times 5] = 0,203 \quad (6.33)$$

Une erreur relative de 20,3% est obtenue sur le coefficient de transfert global  $U_e$ . Enfin, l'erreur totale sur la résistance thermique vaut :

$$\delta R_{\text{coke}} = 2 \times 0,203 / 68 = 0,006 \quad (6.34)$$

avec une valeur moyenne de  $U = 68\text{W/K}$  pour le coefficient de transfert global.

En considérant un niveau moyen typique de  $R_{\text{coke}} = 5e^{-4} \text{ Km}^2/\text{W}$ , l'erreur relative vaut à :

$$\frac{\delta R_{\text{coke}}}{R_{\text{coke}}} = \frac{0,006}{5e^{-4}} = 0,12 \quad (6.35)$$

Une erreur de 12% est évaluée avec ces données extraites.

## IV Conclusions

Deux méthodologies d'extraction des données pour la loi de coke à partir de mesures de laboratoire et sur site ont été présentées. La première permet d'extraire des informations sur le dépôt dans des conditions plus facilement reproductibles et permet par exemple de comparer quantitativement les pétroles brutes entre eux. La seconde méthodologie est spécifique aux conditions rencontrées dans le four *Feyzin*. Une analyse d'erreur montre qu'un intervalle de confiance raisonnable est obtenu, malgré les incertitudes importantes sur les mesures.

Cette loi de coke sera utilisé dans la suite pour l'étude du four *Feyzin*.





# 7

## Couplage thermique entre rayonnement, conduction et dépôt : application à la prédiction de l'encrassement dans le four *Feyzin*

Cette partie présente les résultats obtenus par couplage du rayonnement de la flamme avec la thermique des tubes en présence de coke.

Le problème a été abordé en deux problèmes. D'une part, les transferts radiatifs induits par la flamme ont été couplés avec la conduction dans le tube (Chap. 5). D'autre part, une loi de dépôt a été mise en place conjointement à la résolution d'un problème conductif (Chap. 6). Le système global *Four* résulte du couplage de ces deux sous-systèmes (Fig. 7.1), réalisé dans ce chapitre sur la configuration du four *Feyzin*.

La configuration et le point de fonctionnement de l'installation simulée lors du couplage entre le rayonnement de la flamme et la thermique dans les tubes ont été présentés dans l'article du chapitre 5. Un bref descriptif de cette configuration est rappelé ici.

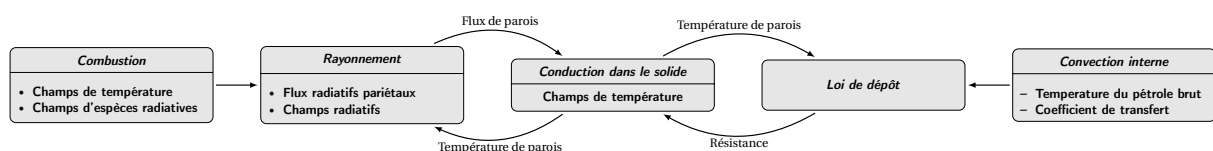


FIGURE 7.1: Couplage global entre la combustion, le rayonnement, la conduction dans le solide et la loi de dépôt

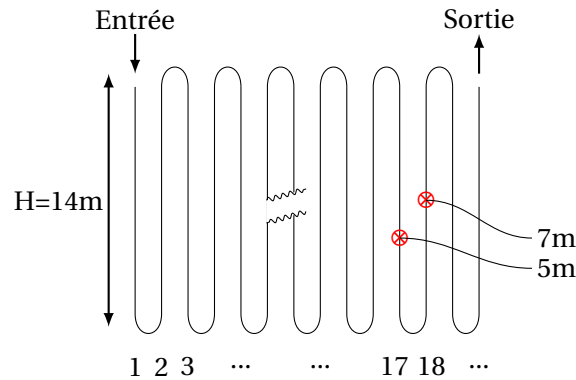


FIGURE 7.2: Schéma d'une passe du four Feyzin (Vue dépliée verticale). Les symboles  $\otimes$  indiquent la position des thermocouples

## I Configuration

La coupe transversale de la zone radiative du four cylindrique de *Feyzin* est présentée Fig. 5.1. Ce four a un rayon  $r_{cyl} = 2.885\text{m}$  et une hauteur  $H = 14\text{m}$ . Le pétrole brut circule au travers de 4 passes identiques qui occupent chacune un quart du cylindre. Chaque passe est composée de 20 tubes verticaux pliés, alignés le long de la paroi du four à une distance de 30 cm. Une vue dépliée des tubes est proposée Fig. 7.2 sur laquelle la position des thermocouples (tubes 17 et 18) est reportée. Le maillage associé est représenté Fig. 5.1.

## II Point de fonctionnement

Le point de fonctionnement est identique à celui au Chap. 3 et 5 (Tab. 2.4). Le combustible utilisé pour la combustion est toujours le mélange *TOTAL-TP1* dont la composition en fraction molaire est décrite dans Tab. 2.1. L'écoulement de pétrole brut qui circule dans les tubes est caractérisé par les paramètres indiqués dans Tab. 7.1. Ces données ont été fournies par *TOTAL*.

Donnée	Unité	Valeur
Température d'entrée $T_{e,brut}$	(K)	590
Température de sortie $T_{s,brut}$	(K)	677
Densité $\rho$	( $\text{kg}/\text{m}^3$ )	1,6
Capacité thermique $C_{p,crude}$	( $\text{J}/\text{kg}\cdot\text{K}$ )	3500
Débit massique $\dot{m}_{brut}$	( $\text{kg}/\text{s}$ )	0,27

TABLE 7.1: Caractéristiques de l'écoulement de pétrole brut dans les tubes du four Feyzin

## III Mise en place du calcul

Pour résoudre ce problème multiphysiques, deux sous-systèmes de calcul ont été définis :

- la chambre de combustion où les gaz chauds rayonnants sont produits (Fig. 5.1),

– les tubes solides, dans lesquels s'écoule le pétrole brut (Fig. 5.2).

La surface des tubes est la partie commune aux deux systèmes. Cette surface est le lieu d'échange des données selon la méthode exposée au Chap. 4 (Fig. 4.1).

## 1. Chambre de combustion

Le modèle *CANDLE* et le solveur *PRISSMA* résolvent la flamme et le rayonnement sur le maillage non structuré de 11 millions d'éléments (Fig. 5.1). La chimie utilisée pour le combustible *TOTAL-TPI* est la chimie non-infiniment rapide avec un taux d'étirement de  $a = 105s^{-1}$  (Tab. 2.1). Les parois réfractaires sont assimilées à un corps noir à la température  $T_m = 1000K$ , tandis que la paroi des tubes émet comme une surface grise  $\epsilon = 0,85$  à la température des tubes.

## 2. Tubes solides

Le maillage non structuré de 27 millions de nœuds est utilisé (Fig. 5.2) pour le calcul de la conduction dans *AVTP*. Les quatre-vingts tubes sont fabriqués en *ASTM335*, un alliage d'acier adapté aux fortes températures. Ses propriétés sont résumées dans Tab. 7.2. Dans la mesure où seules les températures d'entrée et de sortie sont connues, nous supposons que la température du brut  $T_{brut}$  varie linéairement entre l'entrée ( $T_{e,brut}$ ) et la sortie ( $T_{s,brut}$ ) :

$$T_{brut} = sT_{e,brut} + \frac{(T_{s,brut} - T_{e,brut})}{L_{passe}} \quad (7.1)$$

avec  $L_{passe}$  la longueur d'une passe et  $s$  l'abscisse curviligne le long de celle-ci.

Donnée	Unité	Valeur
Conductivité	(W/m·K)	40
Densité	(kg/m <sup>3</sup> )	7833
Capacité thermique	(J/kg·K)	460
Emissivité	(-)	0,85

TABLE 7.2: Propriétés des tubes ASTM A335

Le coefficient de transfert convectif de chaleur est choisi constant à l'aide d'une corrélation, égal à 380 W/ m<sup>2</sup>·K (cf. Chap. 5).

La loi de dépôt de coke, de la forme  $dR_{coke}/dt = A \exp(-Ea/RT_m)$  (Chap. 7), s'additionne à la résistance thermique convective selon la méthodologie exposée au Chapitre 4.

Les paramètres extraits selon la méthodologie exposée au Chap. 6 sont :

Donnée	Unité	Valeur
Constante préexponentielle	(K·m <sup>2</sup> /W·s)	$A = 5e^{16}$
Énergie d'activation	(kJ/mol)	$Ea = 297$

TABLE 7.3: Paramètres de la loi de dépôt

La condition initiale du calcul couplé instationnaire correspond au résultat du calcul stationnaire sans dépôt de coke analysé au Chapitre 5. Six heures de temps physique ont été simulées. Le calcul du champ radiatif est effectué toutes les heures. Afin d'accélérer la loi de coke, la constante d'accélération est choisie égale à  $\alpha_c = 1800$  (cf. Chap. 6). Dans ce calcul, le flux radiatif net échangée sur les tubes n'est pas homogène et constant. Cependant, nous considérons que la variation locale du flux est assez faible pour satisfaire une hypothèse de flux constant.

La simulation est arrêtée après 6 heures car les conditions opératoires ont changé pour éviter une forte contrainte thermique sur les parois.

#### IV Analyse de l'évolution temporelle de la température sur les thermocouples

Pour valider la méthodologie de couplage, l'évolution temporelle de la température au niveau des deux thermocouples est donnée Fig. 7.3-7.4. Les mesures y sont représentées par les cercles et la simulation par les losanges.

L'augmentation de la température sur une sonde est le résultat d'une accumulation de dépôt sur la surface intérieure. Elle est un bon indicateur de la qualité des résultats numériques sur le dépôt.

L'instant initial de la simulation peut être choisi de manière arbitraire. Afin de comparer la simulation à l'expérience, cet instant est choisi pour avoir une température de paroi mesurée, sur la sonde du tube numéro 18, identique à la température dans la simulation au même endroit. Nous pouvons d'ores et déjà constater que les conditions sont très favorables à la formation de coke. La température est supérieure à  $T = 760\text{K}$  et augmente de l'ordre de  $2\text{K/jr}$ .

Les températures simulées sont globalement du même ordre de grandeur que dans le cas réel. Pour le thermocouple du tube 18, la température prédite est en très bon accord avec la température réelle. La variation de la température de paroi est proche de  $2\text{K/jr}$ . La variation de dépôt est localement correctement estimée avec la loi de dépôt proposée.

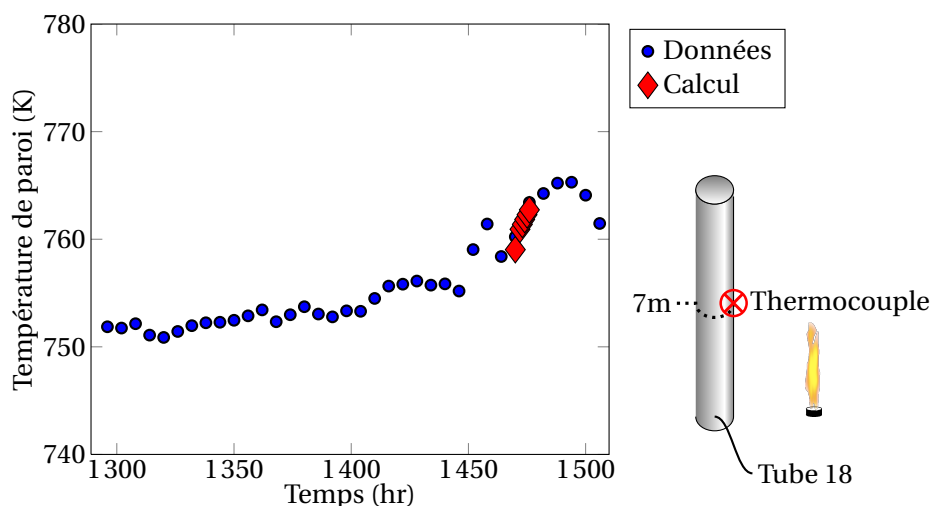


FIGURE 7.3: Évolution temporelle de la température de paroi au niveau du thermocouple situé sur le tube numéro 18 - Comparaison entre les données TOTAL et les calculs

Pour le tube 17 (Fig. 7.4), la température initiale dans la simulation est proche de celle extraite du

thermocouple. Cependant, la variation de la température simulée au cours du temps est deux fois plus importante que celle dans la réalité. La loi de dépôt est ici trop rapide.

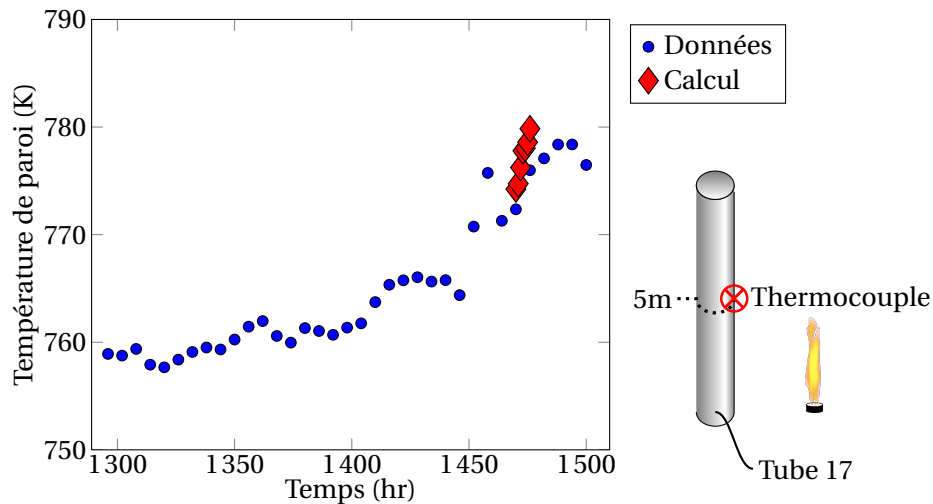


FIGURE 7.4: Évolution temporelle de la température de paroi au niveau du thermocouple situé sur le tube numéro 17 - Comparaison entre les données TOTAL et les calculs

Ces différences de précision entre le tube 18 et le tube 17 peuvent s'expliquer en notant que la température de paroi de la sonde du tube 18 se situe sur la plage de confiance de la loi de coke contrairement à la température de la sonde 17 ( $T > 770\text{K}$ , cf. Chap. 7) et Fig. 7.3-7.4). La simulation est capable de capturer correctement l'augmentation de température lorsqu'elle reste dans cette plage de confiance. Ce résultat confirme que nous sommes capables d'anticiper le comportement thermique du coke par l'utilisation d'une loi de coke simple et dans sa plage de validité.

Cependant, nous voyons que cette plage de validité peut être trop restreinte pour l'ensemble du four. Il faut donc étendre cette plage de validité en incluant plus de phénomènes, tel que l'écoulement turbulent diphasique dans les tubes, avec prise en compte des changements de phase et de régime. Cette étape est loin d'être immédiate et demande des études poussées.

La plage de temps de comparaison des températures est assez réduite. Les calculs sont très long à mettre en place. Des propositions d'amélioration sont faites dans la conclusion générale de la thèse afin de réduire le temps de calcul sans réduire massivement la précision de ceux-ci.

## V Profils moyens le long des tubes

### 1. Température moyenne le long des tubes

La Figure 7.5 montre l'évolution de la température moyenne sur la surface intérieure le long d'une passe après 6 heures de temps physique. Cette température est contrôlée par les échanges de chaleur avec les gaz chauds à l'extérieur des tubes et avec le brut à l'intérieur des tubes. Ils sont directement liés respectivement à la distance entre la flamme et les tubes et à la température du pétrole brut.

Ainsi, nous pouvons constater à nouveau (cf. Chap. 5) que la température moyenne le long de la passe présente une pente moyenne liée à l'évolution linéaire de la température du brut et du coefficient de

convection (constant), à laquelle s'ajoutent des pics périodiques marquant la proximité de la flamme. Le changement de température moyenne n'est lié qu'à l'ajout d'une résistance thermique à l'intérieur des tubes.

Le dépôt change la résistance thermique et son effet devient visible sur les cinq derniers tubes. L'augmentation moyenne de température est de l'ordre de 2K. Ces points chauds sont situés entre 3 et 4 m au plus proche de la flamme.

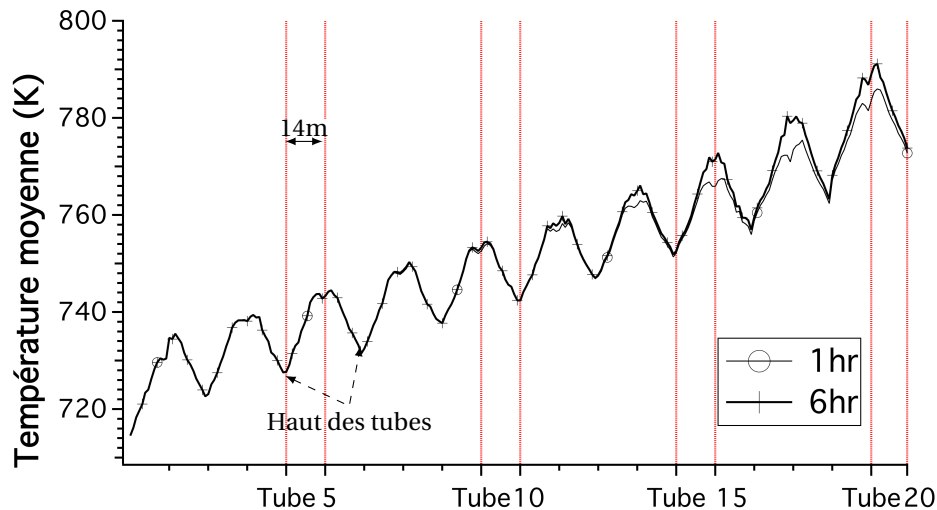


FIGURE 7.5: Température moyenne le long de la passe - Comparaison entre le profil à 1 heure et à 6 heures de temps physique

Les comparaisons des profils à 1 heure et 6 heures montrent une variation négligeable de température pour les tubes les plus froids (1 – 13). Une température moyenne supérieure à 760K observée à 1 heure entraîne une forte augmentation de la température à 6 heures. Cette observation est vérifiée pour les tubes 14 à 20. Au-dessus de cette température, nous pouvons supposer que la couche de coke grossit très rapidement.

## 2. Épaisseur moyenne du dépôt

L'épaisseur moyenne de coke déposée sur la paroi le long d'une passe est présentée Fig. 7.6 après une heure et six heures de temps physique.

L'épaisseur de coke augmente en moyenne le long des tubes. Les pics observés coïncident avec les pics de température moyenne. Le dépôt de coke est conséquent pour des températures moyennes supérieures à 760K (au-delà du tube 13). Ce constat confirme l'observation précédente qui montrait une augmentation forte de la température au-delà du seuil  $T > 760\text{K}$ .

L'évolution de l'épaisseur augmente de manière exponentielle avec le numéro du tube. La tendance observée n'est pas linéaire le long de la passe et ceci pour deux raisons. La première est que la loi de dépôt est une loi chimique : la vitesse de réaction varie de manière exponentielle avec la température. La seconde raison est due à l'emballement du couplage. Le dépôt de coke est couplé de manière instable avec la température puisque l'augmentation du premier conduit à l'augmentation de la seconde.

Pour chaque tube, le maximum de dépôt correspond à un maximum de température. La proximité de la flamme provoque un encrassement visible important.

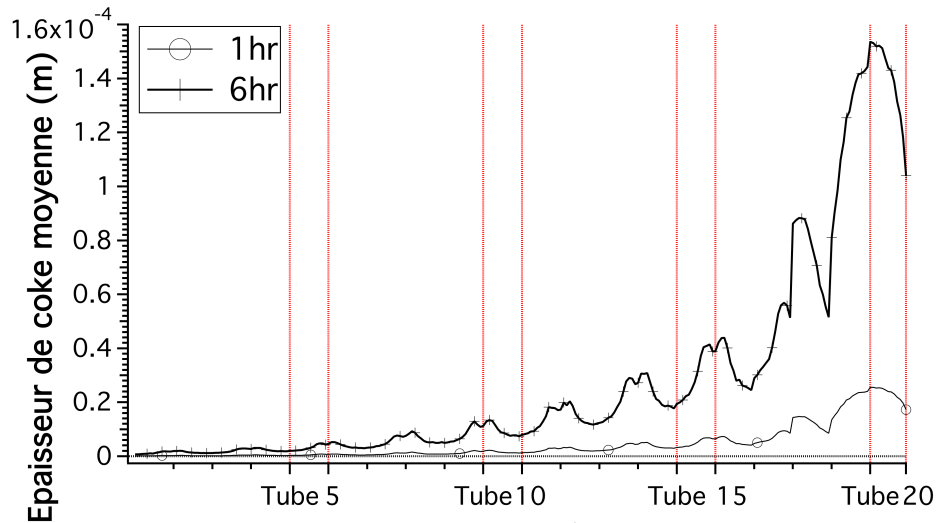


FIGURE 7.6: Épaisseur moyenne de coke le long de la passe

Le dépôt ne permet pas d'augmenter notablement les températures des tubes 1 à 13 dans les 6 premières heures et le dépôt y reste faible. À l'inverse, les derniers tubes s'encrassent de manière critique. À titre de comparaison, les tubes 17 à 20 ont une épaisseur de dépôt comprise entre 6 et 8 mm, alors que l'épaisseur du dépôt est de l'ordre de 0,1 mm dans les premiers tubes. La résistance thermique du coke est de l'ordre de  $2 \cdot 10^{-4} \text{ K} \cdot \text{m}^2 / \text{W}$  pour les dépôts les plus épais, est du même ordre de grandeur que la résistance thermique du tube. Ainsi, en seulement 6 heures, la résistance thermique moyenne a été multipliée par deux dans cette zone.

### 3. Flux radiatifs nets moyens le long des tubes

La Figure 7.7 compare les flux radiatifs nets sur la surface extérieure des tubes au bout d'une et six heures.

Ces flux sont influencés par trois températures :

- la température de la paroi réfractaire du four et des tubes voisins,
- la température des gaz,
- la température du brut.

Les flux radiatifs sont plus importants lorsque les différences entre ces trois températures sont élevées, ce qui est visible sur toute la longueur des tubes.

D'un côté, la flamme augmente localement le flux reçu par le tube dû aux températures élevées des gaz brûlés. Ainsi, les maximums des flux radiatifs nets moyens le long des tubes coïncident avec les maximums de températures de parois constatés entre 3 et 5 m (Fig. 7.5).

D'un autre côté, le chauffage du fluide diminue le flux radiatif. La température du fluide augmente le long du tube, l'échange radiatif devient plus faible et explique la diminution du flux reçu par un tube

comparé au suivant lorsqu'ils possèdent le même diamètre et voient la flamme à la même distance (tube 1 à 17).

Nous observons également un effet géométrique. Les derniers tubes ont une surface exposée plus grande et sont plus proches de la flamme. Les tubes 18 à 20 reçoivent ainsi plus d'énergie que les précédents.

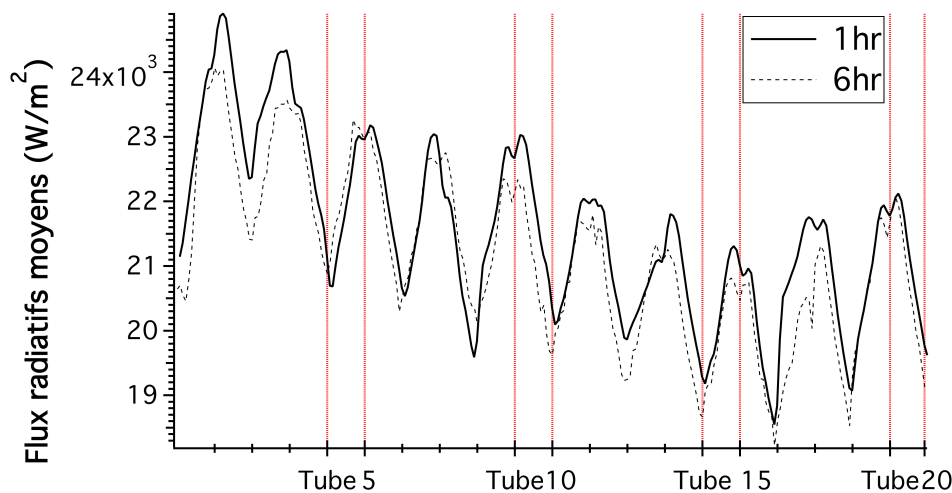


FIGURE 7.7: Comparaison des flux radiatif moyen le long de la passe à 1 heure et à 6 heures

La présence d'un dépôt augmente fortement la température et conduit à diminuer les échanges radiatifs avec la paroi des tubes. La résistance thermique appliquée à la conduction se répercute sur le rayonnement. Un « bloquage » thermique empêche un échange efficace avec la paroi. L'énergie ne peut plus être transférée de la même manière et doit être évacuée vers la zone de convection dans les gaz brûlés ou rayonner vers les parties les plus froides du four. Malgré tout, il est difficile de voir sur les résultats une répartition différente des flux dans le four. Les flux nets moyens diminuent qualitativement de la même manière partout dans le four.

Le flux net moyen a perdu en six heures  $0,390\text{kW/m}^2$ . Ceci réduit la puissance transférée de  $22,65\text{kW/h}$ . Cette perte de puissance doit être compensée par une augmentation de la puissance injectée par combustion. Sans cette compensation, le fluide n'atteindrait pas la température attendue en sortie du four.

En pratique, la puissance dégagée par combustion est augmentée afin d'assurer une température constante du brut en sortie. La résistance induite par la présence de coke augmente la température des parois qui, à son tour, favorise le dépôt de coke. Dans ces conditions, les températures des tubes vont inexorablement augmenter, détériorer ces tubes et diminuer le rendement. Un changement de conditions opératoires est effectué lorsque des températures critiques sont atteintes et les pertes de charge sont jugées pénalisantes. Le changement de brut traité par un autre moins encrassant ou une augmentation des débits de brut peuvent éviter l'arrêt du four.



## VI Analyse des coupes transversales dans un tube

Une coupe du tube 17 est effectuée à la hauteur du thermocouple (5m) pour analyser les résultats du calcul à deux temps différents. Cette zone est sensible car les températures atteintes sont élevées (autour de 780K Fig. 7.5), et sont donc sujettes à une forte formation de coke et par conséquent à des augmentations de température encore plus importantes. Par ailleurs, ce tube est entouré d'un tube de même diamètre (tube 16) et d'un tube de diamètre supérieur (tube 18)

### 1. Coupe transversale de température

Le Figure 7.8 présente l'évolution angulaire de la température externe du tube 17. Tout d'abord, la température augmente de 3K en moyenne et cette augmentation est relativement homogène sur la circonférence du tube. On observe par ailleurs quatre grandes zones d'influence selon l'exposition du tube (Tab. 7.4).

<b>Zone 1 : Flamme</b>	$315^\circ < \theta < 45^\circ$
<b>Zone 2 : Tube 18</b>	$225^\circ < \theta < 315^\circ$
<b>Zone 3 : Réfractaire</b>	$135^\circ < \theta < 225^\circ$
<b>Zone 4 : Tube 16</b>	$45^\circ < \theta < 135^\circ$

TABLE 7.4: Zones d'influence pour le tube 17

Dans la Zone 1, la flamme est responsable de la hausse de la température. Les zones 2, 3, et 4 correspondent aux interactions tube 16-tube 17, tube 17-réfractaire et tube 17-tube 18. La température du point localisé face à la flamme ( $\theta = 0^\circ$ ) est aussi élevée que celle du point situé face au réfractaire ( $\theta = 180^\circ$ ). Une forte inhomogénéité est observée entre ces points les plus chauds et les points face aux tubes 16 et 18 ( $\theta = 270^\circ$  et  $90^\circ$ ). Le tube subit aussi une différence de température de l'ordre de 30 K entre ces points extrêmes ce qui conduit à des flux conductifs orthoradiaux élevés.

Nous notons par ailleurs que la hausse de température entre 1 et 6 heures se fait de manière homogène dans la section du tube malgré une répartition inhomogène du coke sur la surface interne (Fig. 7.9).

La température du côté de la flamme est plus faible que celle du côté réfractaire malgré la présence de coke plus importante (Fig. 7.9) et des flux radiatifs supérieurs (Fig. 7.8). Nous avons vu que la température des tubes, du côté de la flamme, est fortement inhomogène le long des tubes (Fig. 7.5 et Chap. 5). Le réfractaire possède une température homogène. Les flux radiatifs reçus par les tubes de ce côté sont relativement homogènes et n'induisent que très peu de flux conductifs verticalement. Ainsi, des flux conductifs verticaux évacuent plus d'énergie du côté de la flamme que du côté du réfractaire. Cela explique pourquoi les températures peuvent être plus faibles du côté de la flamme malgré un plus fort rayonnement.

### 2. Coupe transversale de dépôt de coke

La Figure 7.9 propose l'évolution angulaire de l'épaisseur de coke à  $t = 1$  heure et  $t = 6$  heures. La section du tube réduit au fur et à mesure du temps. Le dépôt se développe autour des températures chaudes à  $\theta = 0^\circ$  et  $180^\circ$ . Nous avons vu précédemment que la température augmente deux fois plus

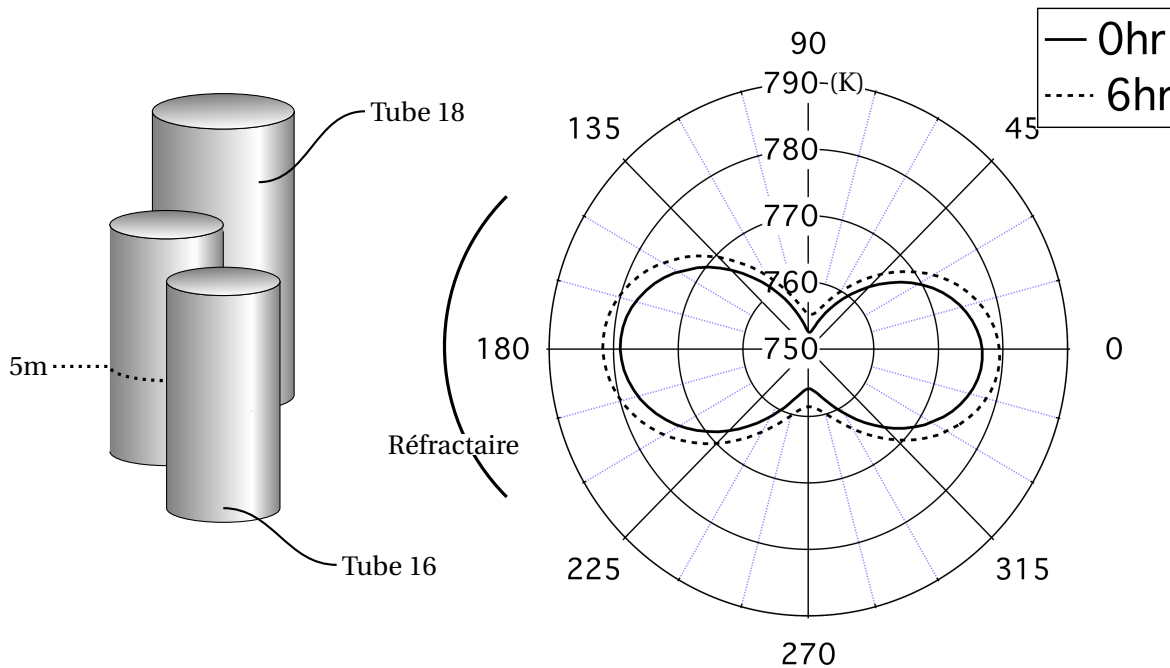


FIGURE 7.8: Évolution angulaire de la température sur le tube 17 à 5m à l'instant initial et à 6hr

rapidement dans la simulation par rapport à la réalité (Fig. 7.5). Par conséquent, l'épaisseur de coke est surévaluée à cet endroit ( $\theta = 0^\circ$ ).

Sur la période considérée, le débit de brut traité est constant. Cette réduction de section peut à long terme augmenter les pertes de charge et augmenter l'arrachement. Dans notre modélisation, l'arrachement n'est pas pris en compte dans la loi de dépôt mais pourrait améliorer le résultat obtenu en ralentissant la production de coke.

La coupe réalisée pourrait être comparée qualitativement avec les épaisseurs de coke observées Fig. 8. La photographie est prise après découpage du tube. L'épaisseur observée est le résultat de plusieurs mois d'exploitation. Nous constatons que la couche de coke est équivalente à l'épaisseur du tube (environ 5 mm). Un constat similaire est fait dans la simulation de 6 heures et confirme que l'épaisseur est surévaluée dans la simulation.

A titre de comparaison, une seconde coupe est proposée dans le tube 2 (Fig. 7.10) à la même hauteur qui n'atteint pas des températures critiques pour le coke. L'épaisseur de coke simulée est beaucoup plus faible bien qu'on observe un léger développement de cette couche aux extrémités (flamme et réfractaire). Ceci explique pourquoi la température n'augmente pas au cours du temps dans cette zone.

### 3. Coupe transversale de flux radiatifs nets

Le flux radiatif net est extrait du solveur radiatif sur la surface extérieure du tube 17 à la hauteur  $h = 5\text{m}$  Fig. 7.8. Ce flux est fortement inhomogène. La présence de la flamme est visible dans la zone 1. La température du réfractaire étant homogène et indépendante du temps, les flux radiatifs nets échangés

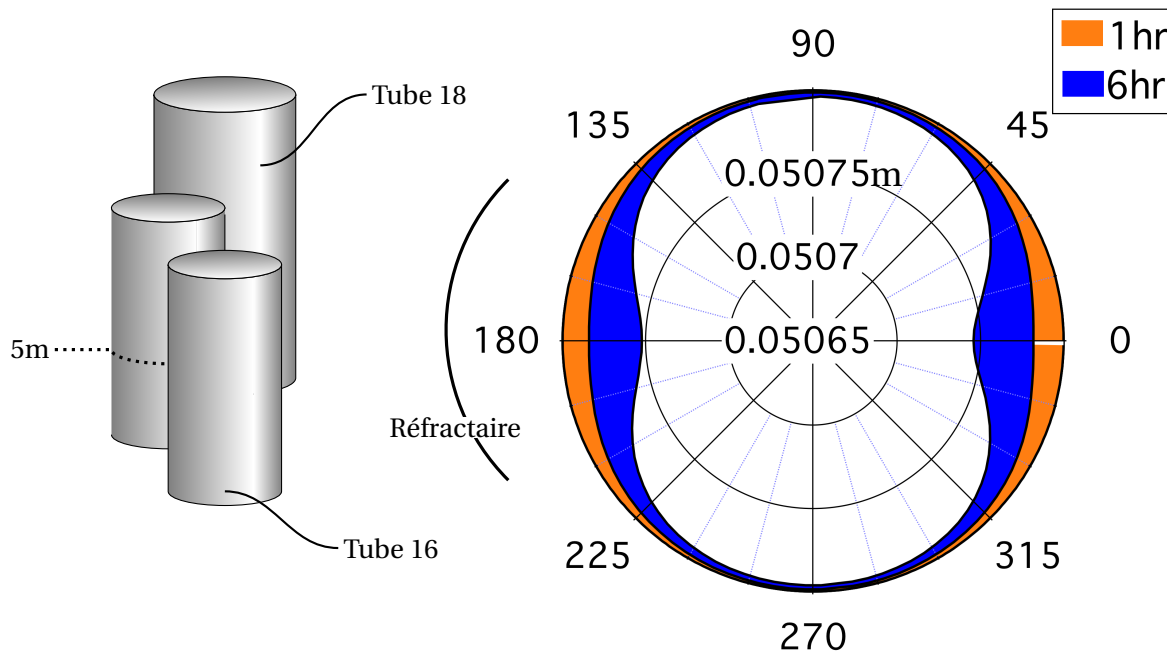


FIGURE 7.9: Évolution angulaire de l'épaisseur du dépôt dans le tube 17 à 5m à  $t = 1\text{hr}$  et  $t = 6\text{hr}$

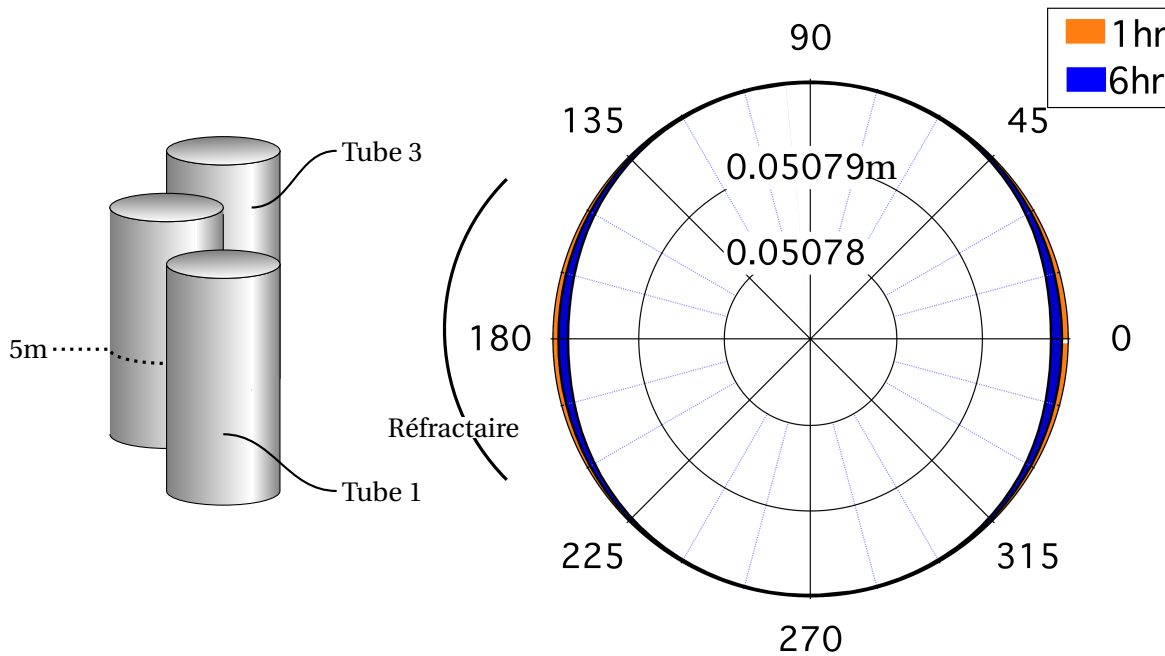
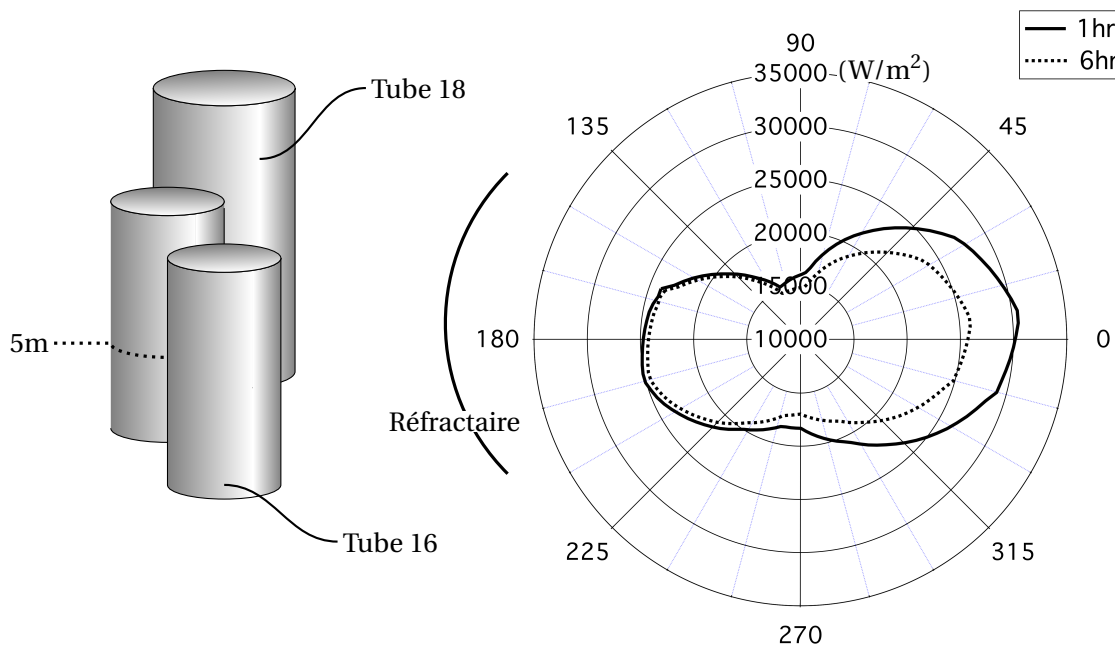
entre cette paroi réfractaire et le tube sont pratiquement inchangés au cours du temps (entre  $135^\circ$  et  $225^\circ$ ). L'augmentation de la température du tube est induite par la présence du coke. En revanche, du côté de la flamme, le flux diminue notablement (15%).

## VII Conclusions

Une méthodologie pour le couplage des phénomènes thermiques dans un four cylindrique a été proposée. L'accent a été mis sur la résolution du rayonnement thermique couplé à la conduction à travers la paroi du tube et à une loi de dépôt pour reproduire l'évolution de la température de paroi dans les tubes.

La comparaison des résultats de la simulation couplée et des mesures *in situ* par thermocouple a montré un accord correct en termes de température moyenne le long d'une passe. L'analyse de la répartition des flux d'énergie le long et autour des tubes a montré une structure complexe tridimensionnelle de la distribution de température. La conduction dans les sens transverses et orthoradiaux est forte. L'impact du dépôt de coke sur la surface interne a révélé être la source de la forte hausse de la température des tubes. Cette augmentation imposée par la flamme et par l'élévation de la température du brut conduit à la production importante de coke sur les derniers tubes, comme on a pu l'observer par des mesures thermographiques sur site. Proche de la flamme, l'épaisseur de coke révèle une distorsion similaire à la température de la paroi des tubes. L'épaisseur de coke est néanmoins très importante du côté du réfractaire.

Le développement d'une couche de coke est également à l'origine d'une diminution significative des flux d'énergie à la paroi. Au fur et à mesure que le solide se dépose, la température des tubes aug-


 FIGURE 7.10: Évolution angulaire de l'épaisseur du dépôt dans le tube 2 à 5m à  $t = 1\text{ hr}$  et  $t = 6\text{ hr}$ 

 FIGURE 7.11: Comparaison des flux radiatifs sur le tube 17 à 5m à  $1\text{ hr}$  et à  $6\text{ hr}$ 

mente. Les transferts radiatifs sont donc globalement moins efficaces. L'énergie chimique dégagée par la flamme doit donc être évacuée dans la zone de convection. La température des gaz d'échappement plus élevée diminue alors l'efficacité du four.

Ce constat montre qu'un emballement est inévitable. En augmentant la puissance chimique dégagée par la flamme pour améliorer les transferts, l'épaisseur de coke entraîne inévitablement une hausse de la température de paroi. Sans un mécanisme de retrait du dépôt de coke, ce système verrait sa température augmenter continuellement.



## **Troisième partie**

# **Conclusions générales et perspectives**





## Conclusions

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à la représentation des transferts de chaleur dans un four de raffinerie pour la prédiction du phénomène de dépôt dans les tubes du procédé. Les dimensions de l'installation ont conduit à élaborer une méthodologie originale et efficace pour la prédiction des flux d'énergie dans la zone radiative où se déroule la combustion d'un combustible complexe. Elle a permis de comprendre les différents transferts d'énergie et d'appréhender l'encrassement induit par ceux-ci.

La première partie de la thèse a réalisé une synthèse du phénomène de dépôt dans les installations de raffinerie et souligne l'impact du dépôt en terme d'efficacité (Chap. 1). Un premier constat s'établit : l'encrassement d'un liquide, de composition chimique aussi complexe, est en premier lieu un phénomène physico-chimique. La difficulté d'une prédiction de l'encrassement vient de la bonne modélisation de la température du fluide encrassant ainsi que de sa vitesse. Des méthodes de mesures du dépôt ont été présentées. Une corrélation entre la tendance à l'encrassement et les paramètres de l'écoulement (augmentation des pertes de charge, mesures directes de l'épaisseur, mesures de température...) a été établie sur deux expériences, l'une de laboratoire l'autre sur site.

Pour les systèmes de combustion de grande taille, les transferts thermiques sont dominés par le rayonnement des gaz de combustion. La combustion est le vecteur de ces transferts et une modélisation adaptée est importante pour la résolution des transferts d'énergie. La modélisation fine d'un écoulement turbulent réactif dans une enceinte de cette dimension requiert un effort numérique encore inaccessible. De plus, le carburant brûlé est généralement mal défini et la description de la chimie de la combustion devient compliquée. La description fine de l'écoulement n'est pas une priorité. Le chapitre 2 a choisi de représenter la flamme par un modèle analytique basé sur une chimie complexe. L'effort numérique pour modéliser cet écoulement turbulent réactif se réduit au calcul d'une flamme axisymétrique en chimie complexe.

Ensuite, les équations des principaux modes de transferts de chaleur sont établies dans le chapitre 3 avec une description des propriétés physiques de la matière impliquées dans ce transfert. Le niveau de modélisation pour chacun de ces modes coïncide avec leur niveau de contribution dans le système global. Ainsi, la convection des gaz chauds est modélisée par une corrélation adaptée. Le rayonnement est simulé par un code de DOM sur géométrie complexe avec des modèles spectraux à bandes étroites corrélées *SNB-ck*. La conduction dans les tubes se fait à l'aide d'un code thermique résolvant les géométries complexes.

Pour obtenir une bonne résolution des flux radiatifs, il est nécessaire de connaître avec précision la température des parois. Ceci amène à l'idée d'un couplage thermique entre le rayonnement des gaz chauds et la conduction dans les tubes pour prendre en considération cet échange. Cette idée est développée dans la seconde partie.

Deux systèmes ont été définis dans le four : d'un côté, la zone radiative où la flamme rayonne vers les tubes par l'intermédiaire de gaz chauds ; de l'autre, les tubes où le pétrole s'écoule pour y être chauffé. L'interaction thermique avec les parois des tubes est développée dans deux chapitres indépendants. Le chapitre 5 traite de l'interaction entre le rayonnement et la paroi. Il permet de mettre en place un calcul plus complexe pour la suite et surtout montre que la méthode de couplage permet de capter de manière efficace les bons flux radiatifs. Le chapitre 6 traite du couplage dépôt-thermique démontre qu'une modélisation thermique du dépôt permet de prédire l'augmentation de la température des tubes. Il donne également deux méthodes d'extraction des données l'une exposée sur une expérience

de laboratoire et l'autre dans un four.

Après cette validation, un assemblage des deux méthodes permet la description dans le système four complet. Les résultats énoncés prédisent assez bien l'augmentation de la température des parois et valident de fait la méthodologie d'extraction de la loi de dépôt réalisée précédemment (Chap. 6). La description montre que les points chauds peuvent être capturés. Cette méthodologie permet de décrire plus finement la distribution des flux radiatifs sur la paroi des tubes et dans déduire l'épaisseur du coke à l'intérieur des tubes.

## Perspectives

### Modélisation de l'écoulement diphasique

Deux améliorations sont possibles quant à la modélisation de l'écoulement diphasique dans les tubes. La première concerne la modélisation des transferts convectifs, la seconde la modélisation de l'arrachement dans la loi de coke.

Tout d'abord, le transfert conducto-convectif a été évalué par une corrélation simple ne prenant pas en compte l'instantanéité et le régime d'écoulement du fluide. Le régime d'écoulement peut avoir un impact important sur le coefficient de transfert. Il est nécessaire de connaître dans chaque écoulement ce coefficient de transfert thermique ainsi que les paramètres qui permettent le passage d'un régime à l'autre.

Le dépôt est seulement piloté par les transferts thermiques et l'arrachement de celui-ci n'a pas été modélisé. Il est lié à la vitesse du fluide à la paroi et vient diminuer l'épaisseur de dépôt. Il est également nécessaire de connaître les différents régimes d'écoulement et comment la transition s'effectue d'un régime à l'autre.

Pour ces deux raisons, un travail important doit être fourni pour la modélisation de ces écoulements diphasiques soumis à des changements de phases importants. La complexité soulevée par la modélisation de tels écoulements explique en partie pourquoi la littérature sur l'encrassement se focalise sur les procédés où les écoulements sont monophasiques, tels que dans le procédé de vapocraquages (charge gazeuse) ou dans les préchauffeurs traitant des pétroles encore à l'état liquide.

### Schémas numériques pour la conduction

La résolution des transferts conductifs dans les solides est un problème largement répandu. Pour les applications de fours industriels, les propriétés thermiques des matériaux ne posent pas de problèmes majeurs dans cette étude. L'amélioration possible concerne principalement les méthodes numériques. Le code utilisé lors de cette thèse utilise un schéma explicite pour la résolution du problème thermique. Les méthodes numériques implicites existent et sont plus efficaces en terme de temps de calcul pour ce type de problème. L'implémentation de cette méthode est en cours et permettra à terme de réduire le coût d'un calcul ou d'augmenter les temps simulés. L'ajout de la loi de dépôt telle qu'elle a été présentée ne pose aucune difficulté théorique supplémentaire.

## Modélisation de la combustion

Un modèle de flamme a été construit. Ce modèle a permis de concentrer les efforts sur la thermique mais a mis de côté la complexité des écoulements réactifs. Ces écoulements sont par nature très complexes et font intervenir divers domaines scientifiques tels que la chimie et la turbulence. De nombreux modèles numériques comme la LES permettent de résoudre ces écoulements. À l'heure actuelle, seules des configurations de l'ordre du centimètre ont pu être simulées pour avancer notre compréhension de la combustion. Deux raisons au moins me semblent importantes quant au manque de modélisation actuel pour la résolution des grands fours industriels. La première est économique. Le coût de telles simulations est encore trop important pour utiliser des modèles LES dans les fours. Mais l'augmentation des puissances de calcul associée au développement d'algorithmes « moins gourmands » (méthodes de résolution implicites des écoulements réactifs incompressibles associées à des méthodes de tabulations de la chimie) va tendre à augmenter la recherche effectuée dans le domaine des fours. La seconde raison est liée à la physique résolue. Dans les moteurs, l'énergie thermique produite doit être convertie en énergie mécanique. Les méthodes numériques doivent être construites pour capturer la transformation d'énergie calorifique en énergie cinétique. Les fours sont utilisés dans l'industrie des procédés pour transmettre au mieux l'énergie chimique des gaz chauds vers une charge. Le transfert d'énergie le plus efficace est sans aucun doute le rayonnement car les échanges thermiques sont proportionnels à la différence de température à la puissance quatre et se font sur de longues distances.

Ainsi, faire le choix de cette modélisation passe par ces deux considérations. Les études qui nécessiteraient de tels investissements pourraient être l'étude des instabilités hydrodynamiques et la production des suies lors de la combustion de carburant lourd...

## Modélisation du transfert radiatif

Un travail sur les modèles radiatifs pourra être mené spécifiquement pour le rayonnement dans les fours. Cet exercice devra permettre de dire si les modèles globaux sont capables de bien modéliser le rayonnement (sous condition d'une bonne modélisation de la combustion). Le cas échéant, les efforts fournis par *D. Poitou* pour optimiser le solveur radiatif afin d'en réduire le temps de calcul, permettront un couplage plus fréquent des phénomènes radiatifs et conductifs.

La plupart de ces améliorations apportées sont déjà existantes et peuvent dès maintenant être intégrées et validées dans la méthodologie. D'un point de vue théorique, la modélisation de la combustion ne semble en partie limitée que par la puissance de calcul actuelle. Les codes de résolutions des écoulements réactifs bénéficient des développements déjà nombreux réalisés dans le domaine de la combustion pour des systèmes plus compacts.

Le défi majeur est sans doute lié à la résolution des écoulements diphasiques avec changement de phase. La modélisation des écoulements hydrauliques diphasiques est complexe, la prédiction des changements de régime d'écoulement couplés à un changement de phase encore plus.





## Problème du mélange : fraction de mélange

### I Résolution de l'équation de transport pour la fraction de mélange à flux imposé sur la paroi

Nous cherchons à résoudre l'équation de conservation suivante :

$$\frac{\partial z}{\partial x} = \alpha \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial z}{\partial r} \right), \quad (\text{A.1})$$

avec  $\alpha = \frac{D_F}{u_F^0}$ .

Une solution analytique de l'Eq. (A.1) peut être développée une fois les conditions limites fixées. En entrée, un profil de type chapeau pour la fraction de mélange est imposé (Fig. 2.3).

$$z(0, r) = H(r - e_0) \quad (\text{A.2})$$

où  $H$  est la fonction de *Heaviside* et  $e_0$  est le rayon du disque d'injection de combustible. Les parois de la chambre sont modélisées par des conditions aux limites de *Neumann* :

$$\frac{\partial z(x, r)}{\partial r} \Big|_{r=e_1} = 0 \quad (\text{A.3})$$

#### 1. Méthode de séparation des variables

La première étape pour résoudre Eq. (A.1) consiste à utiliser la méthode de séparation des variables. Une solution générale de est donc cherchée sous la forme :

$$z(x, r) = h(x)g(r), \quad (\text{A.4})$$

où  $g$  et  $h$  sont des fonctions dépendantes de  $x$  et  $r$  respectivement.  $g'$  et  $h'$  désignent leur dérivée.

L'équation Eq. (A.1) s'écrit donc :

$$gh' = \alpha \left( g''h + \frac{1}{r}g'h \right) \quad (\text{A.5})$$

Les fonctions  $g$  et  $h$  sont recherchées différentes de la fonction nulle, Eq. (A.5) s'écrit :

$$\frac{1}{\alpha} \frac{h'}{h} = \frac{g'' + \frac{1}{r}g'}{g} \quad (\text{A.6})$$

Comme le membre de gauche ne dépend que de  $x$  et le membre de droite ne dépend que de  $r$ , ces deux expressions sont constantes.

De plus, la fraction de mélange est fini pour tout  $x$  et  $r$ . Cette constante doit être strictement négative et l'égalité donc on obtient l'égalité :

$$\frac{1}{\alpha} \frac{h'}{h} = \frac{g'' + \frac{1}{r}g'}{g} = -\lambda^2 \quad (\text{A.7})$$

avec  $\lambda$  cette constante non nulle à déterminer.

Deux équations indépendantes sont obtenues et forment le système d'équations :

$$\frac{1}{\alpha} \frac{h'}{h} = -\lambda^2 \quad (\text{A.8})$$

$$g'' + \frac{1}{r}g' + \lambda^2 g = 0 \quad (\text{A.9})$$

La solution de Eq. (A.8) est immédiate :

$$h(x) = Ae^{-\alpha\lambda^2 x} \quad (\text{A.10})$$

avec  $A$  et  $\lambda$  deux constantes à déterminer.

La seconde équation A.9 est une équation de *Bessel* d'ordre 0 et admet pour solution générale [61] :

$$g(r) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n J_0(\lambda_n r) + \sum_{n=0}^{\infty} D_n Y_0(\lambda_n r) \quad (\text{A.11})$$

avec  $J_0$  et  $Y_0$  les fonctions de *Bessel* d'ordre 0 et  $C_n$ ,  $D_n$ ,  $\lambda_n$  sont l'ensemble des constantes à déterminer.

Ainsi, la solution générale de l'Eq. (A.1) s'écrit :

$$z(x, r) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n J_0(\lambda_n r) e^{-\alpha\lambda_n^2 x} + \sum_{n=0}^{\infty} D_n Y_0(\lambda_n r) e^{-\alpha\lambda_n^2 x} \quad (\text{A.12})$$

## 2. Recherche d'une solution particulière

Dans la seconde étape, on cherche la solution particulière du problème traité en déterminant les constantes  $C_n$ ,  $D_n$  et  $\lambda_n$  en fonction de la condition limite de *Neumann* (Eq. (A.3)) et la fonction de *Heavisde* (Eq. (A.2)).

En premier lieu, la fraction de mélange doit être finie en  $r = 0$ , or la fonction de *Bessel* de seconde espèce  $Y_0$  possède une limite infinie en 0. Les constantes  $D_n$  sont donc nulles et Eq. (2.29) se simplifie en :

$$\forall (x, r) \in \mathbb{R} \times \mathbb{N}, \quad z(x, r) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n J_0(\lambda_n r) e^{-\alpha \lambda_n^2 x} \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{\partial z(x, r)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \sum_{n=0}^{\infty} C_n J_0(\lambda_n r) e^{-\alpha \lambda_n^2 x} = - \sum_{n=0}^{\infty} C_n \lambda_n J_1(\lambda_n r) e^{-\alpha \lambda_n^2 x} \quad (\text{A.14})$$

avec la formule dérivée  $\frac{d}{dr} [J_0(\lambda_n r)] = -\lambda_n J_1(\lambda_n r)$

Puis, l'évaluation de Eq. (A.14) à la paroi (Eq. (A.3)) permet de déterminer les constantes  $\lambda_n$  :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \frac{\partial z(x, r)}{\partial r} \Big|_{r=e_1} = - \sum_{n=0}^{\infty} C_n J_1(\lambda_n e_1) e^{-\alpha \lambda_n^2 x} = 0 \quad (\text{A.15})$$

Donc, l'égalité dans Eq. (A.15) n'est vérifiée que si au moins une des égalités suivantes est vérifiée :

$$\forall (x, n) \in \mathbb{R} \times \mathbb{N}, \quad C_n \lambda_n e^{-\alpha \lambda_n^2 x} = 0 \quad (\text{A.16})$$

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad J_1(\lambda_n e_1) = 0 \quad (\text{A.17})$$

La première solution (Eq. (A.16)) est exclue car la solution au problème de mélange serait la fonction nulle. La solution de Eq. (A.17) est :

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad \lambda_n = \frac{Z_n}{e_1}, \quad (\text{A.18})$$

où  $Z_n$  est le  $n$ -ième zéro de la fonction  $J_1$  de *Bessel* d'ordre 1.

Enfin, les coefficients  $C_n$  sont déterminés en utilisant la dernière condition limite d'entrée (Eq. (A.2)) :

$$\forall r \in \mathbb{R}^+, \quad z(x=0, r) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n J_0\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) = H(r - e_0) \quad (\text{A.19})$$

Les fonctions de *Bessel* définissent une base orthonormale notée (B) dans l'espace de Hilbert. Les fonctions  $p_n$  définissent la projection sur cette base (B) [62, 63] :

$$p_n : f \mapsto \int_0^{e_1} f J_0\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr \quad (\text{A.20})$$

La projection de Eq. (A.19) sur cette base donne :

$$\begin{aligned} \forall n \in \mathbb{N}, \quad C_n \int_0^{e_1} J_0^2\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr &= \int_0^{e_1} H(r - e_0) J_0\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr \\ &= \int_0^{e_0} J_0\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr, \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

ce qui permet de déterminer les coefficients  $C_n$  :

$$C_n = \frac{\int_0^{e_0} J_0\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr}{\int_0^{e_1} J_0^2\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr} \quad (\text{A.22})$$

Le dénominateur a déjà été évalué [61] :

$$\int_0^{e_1} J_0^2\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr = \frac{e_1^2}{2} J_1^2(Z_n) \quad (\text{A.23})$$

Il reste à l'évaluer le numérateur en utilisant la formule suivante [61] :

$$\int_0^x J_0(\xi) \xi d\xi = x J_1(x) \quad (\text{A.24})$$

Le premier zéro de la fonction de *Bessel* est 0. Un traitement particulier est fait pour le premier coefficient  $C_0$ . Pour tout  $n$  différent de zéro, la formule Eq. (A.24), avec le changement de variable  $x = \frac{Z_n}{e_1} r$ , donne le résultat :

$$\begin{aligned} \int_0^{e_0} J_0\left(\frac{Z_n}{e_1} r\right) r dr &= \left(\frac{e_1}{Z_n}\right)^2 \int_0^{\frac{e_0}{e_1} Z_n} x J_0(x) dx \\ &= \frac{e_0^2}{e_1} \frac{e_1}{Z_n} J_1\left(\frac{e_0}{e_1} Z_n\right). \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Pour  $n = 0$  :

$$\int_0^{e_0} J_0\left(\frac{Z_0}{e_1} r\right) r dr = \int_0^{e_0} J_0(0) r dr = \frac{e_0^2}{2} \quad (\text{A.26})$$

car  $J_0(0) = 1$ .

Donc, la solution particulière s'écrit finalement :

$$z(x, r) = \left(\frac{e_0}{e_1}\right)^2 + 2 \frac{e_0}{e_1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_1\left(\frac{e_0}{e_1} Z_n\right)}{Z_n J_0^2(Z_n)} J_0\left(\frac{Z_n r}{e_1}\right) e^{-\frac{\alpha Z_n^2 x}{e_1^2}} \quad (\text{A.27})$$

### 3. Évaluation de la longueur de flamme de diffusion

La longueur de flamme  $L_f$  d'une flamme de diffusion se définit comme la longueur pour laquelle la fraction de mélange est la fraction de mélange à la stoechiométrie :

$$z(x = L_f, r = 0) = z_{st} \quad (\text{A.28})$$

$L_f$  peut être évaluée en utilisant la solution du problème de mélange Eq. (A.27) en  $r = 0$  et  $x = L_f$  :

$$z_{st} \approx \left(\frac{e_0}{e_1}\right)^2 + 2 \frac{e_0}{e_1} \frac{J_1\left(\frac{e_0}{e_1} Z_1\right)}{Z_1 J_0^2(Z_1)} J_0\left(\frac{Z_1 r}{e_1}\right) e^{-\frac{\alpha Z_1^2 L_f}{e_1^2}} \quad (\text{A.29})$$



avec  $J_0(0) = 1$ . La longueur de flamme est égale à :

Par inversion de cette formule Eq. (A.29), la valeur de  $L_f$  est :

$$L_f = \frac{e_1}{Z_1^2} Re \ln \left( \frac{2 \frac{e_0}{e_1} J_1 \left( \frac{e_0}{e_1} Z_1 \right)}{Z_1 J_0^2(Z_1)} \frac{1}{\left( z_{st} - \frac{e_0^2}{e_1^2} \right)} \right) \quad (\text{A.30})$$

avec l'utilisation du nombre de Reynolds  $Re$  et de  $\alpha = u_F^0 / D_F$ .

## II Résolution de l'équation de transport pour la fraction de mélange dans un domaine infini

Une dernière analyse peut être développée. Il s'agit de considérer un flamme jet dans une atmosphère oxydante. Cette limite peut se voir comme une limite où les murs sont repoussés à l'infini, c'est à dire  $e_1 \rightarrow \infty$ .

Deux techniques sont possibles pour arriver au résultat :

- faire  $\frac{e_0}{e_1} \rightarrow 0$  avec  $r/e_0$  et  $\alpha/e_0^2$  fixé,
- appliquer une transformation de *Hankel* directement à Eq. (A.1).

La seconde dérivation utilise l'orthogonalité des fonctions de *Bessel*. La transformée de *Hankel* est similaire à une transformée de *Fourier* avec une base de fonctions de *Bessel* souvent rencontrée dans les problèmes cylindriques.

La transformée de *Hankel* est à la base de très nombreuses opérations sur un signal. Nous présentons ici son principe de projection sur une base de fonctions orthogonales. Nous verrons que le développement est très similaire aux opérations réalisées dans un domaine fini.

La transformée de *Hankel* est définie comme :

$$\hat{f}(\lambda) = \int_0^\infty r J_0(\lambda r) f(r) dr \quad (\text{A.31})$$

et nous rappelle la projection Eq. (A.20). Sa fonction inverse s'écrit :

$$f(x) = \int_0^\infty \lambda J_0(\lambda r) \hat{f}(\lambda) d\lambda \quad (\text{A.32})$$

En multipliant le terme de gauche de Eq. (A.1) par  $r J_0(\lambda r)$  :

$$r J_0(\lambda r) \frac{\partial z}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x_1} r z J_0(\lambda r) \quad (\text{A.33})$$

Cette intégration sur des réels positifs donne :

$$\int_0^\infty r J_0(\lambda r) \frac{\partial z}{\partial x_1} dr = \frac{\partial \hat{z}}{\partial x_1} \quad (\text{A.34})$$

Pour intégrer le terme de droite Eq. (2.11), l'identité de la transformée de *Hankel's* suivante est utilisée [128] :

$$\widehat{\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial z}{\partial r}} = \left( \frac{\partial z}{\partial r} + r \frac{\partial^2 z}{\partial r^2} \right) = -\lambda^2 \hat{z} \quad (\text{A.35})$$

L'équation (A.1) est transformée en :

$$\frac{\partial \hat{z}}{\partial x_1} = -\alpha \lambda^2 \hat{z} \quad (\text{A.36})$$

et est similaire à Eq. (A.10). Elle mène à la solution :

$$\hat{z}(x_1, \lambda) = c_1(\lambda) e^{-\alpha \lambda^2 x_1} \quad (\text{A.37})$$

où  $\hat{z}(0, r) = c_1(\lambda) = \frac{e_0 J_1(\lambda e_0)}{\lambda}$  est la transformée de Eq. (A.38).

Enfin, l'inversion de Eq. (A.37) conduit à :

$$z(x_1, r) = \int_0^\infty e_0 J_1(\lambda e_0) J_0(\lambda r) e^{-\alpha \lambda^2 x_1} d\lambda \quad (\text{A.38})$$

## Table des figures

1	Réserves prouvées de pétrole dans le monde en 2005 - Sources : BP Statistics ; Questions internationales : La bataille de l'énergie (n°24 mars-avril 2007) . . . . .	vi
2	Classification des hydrocarbures . . . . .	vii
3	Rendement en coupes pétrolières de trois familles de pétrole brut [3] . . . . .	viii
4	Schéma de principe du processus de distillation . . . . .	ix
5	Schéma d'une colonne de fractionnement atmosphérique . . . . .	x
6	Schéma simplifié d'une raffinerie . . . . .	xi
7	Schéma d'un four cylindrique . . . . .	xiii
8	Dépôt de coke dans un tube de four de raffinerie . . . . .	xv
9	Méthodologie globale pour la résolution du problème de dépôt dans les fours (Chap. 7) . . . . .	xx
10	Phénomènes intervenant dans le problème de dépôt . . . . .	3
1.1	Les trois phases d'un mécanisme de dépôt : épaisseur du dépôt en fonction du temps . . . . .	6
1.2	Mécanisme général de l'encrassement chimique [13] - A : Réactif, B : Précurseur soluble, C : Dépôt insoluble . . . . .	8
1.3	Profil de température à travers la paroi d'un tube propre (a) et d'un tube encrassé (b) dans un four . . . . .	9
1.4	Mécanisme d'évaluation de l'encrassement . . . . .	13
1.5	Courbes schématiques de l'évolution de l'épaisseur du dépôt en fonction du temps pour les trois régimes d'encrassement . . . . .	14
1.6	Température seuil d'encrassement obtenue par <i>Ebert &amp; Panchal</i> [1] en fonction du taux d'arrachement, $Re = 12000$ . . . . .	16
2.1	Évolution de la capacité thermique molaire en fonction de la température pour les espèces $H_2$ , $CH_4$ , $C_2H_4$ , $C_3H_8$ comparés aux mélanges <i>TOTAL-TP1</i> et <i>JP10</i> . . . . .	21
2.2	Modélisation de la flamme du brûleur de <i>Feyzin</i> . . . . .	23
2.3	Configuration de la flamme jet axisymétrique . . . . .	24
2.4	Structure de flamme pour une chimie infiniment rapide . . . . .	26
2.5	Flamme de diffusion à contre-courant [45] . . . . .	28

2.6	Structure d'une flamme laminaire de diffusion de : (a) methane/air et de (b) TOTAL-TP1/air calculée avec le mécanisme détaillé <i>GRI 3.0</i> [57] - Taux d'étirement : $a = 105s^{-1}$	29
2.7	Température maximale en fonction du taux d'étirement - Mécanisme <i>GRI 3.0</i>	29
2.8	Calcul d'équilibre du mélange TOTAL-TP1/air calculé avec les 53 espèces du <i>GRI</i> [57]	30
2.9	Longueur d'une flamme de diffusion en fonction de la vitesse débitante du carburant - Expérience de <i>Hottel &amp; Hawthorne</i> [65]	34
2.10	Schéma de la zone radiative du four cylindrique de <i>Feyzin</i>	35
2.11	Coupes du maillage du four sans tubes utilisé pour le calcul de la flamme de diffusion par <i>CANDLE</i>	36
2.12	(a) Fraction de mélange pour la flamme de diffusion. L'isoligne $z = z_{st}$ représente la zone où la flamme est la plus réactive - (b) Champ de température pour la chimie non infiniment rapide ( $a = 105s^{-1}$ )	37
2.13	Champ de fraction molaire d'espèces $CO_2$ (a) et $H_2O$ (b) pour la chimie non infiniment rapide ( $a = 105s^{-1}$ )	38
3.1	Bilan des modes de transfert de chaleur sur un tube dans un four	40
3.2	Conductivité des solides [68]	44
3.3	Conductivité des gaz [68]	44
3.4	Capacité thermique des solides [68]	45
3.5	Capacité thermique des gaz	45
3.6	Densité des solides [68]	46
3.7	Densité des gaz [68]	46
3.8	Volume de contrôle	46
3.9	Cylindre creux soumis à deux températures limites fixées	47
3.10	Profil de température dans un tube soumis à deux températures constantes ( $T_1$ et $T_2$ )	49
3.11	Noeuds et cellules utilisées pour le calcul du terme de diffusion $\nabla^2 T$ avec l'opérateur $4\Delta$ au noeud situé au centre - Image tirée de la thèse de N. Lamarque [71]	51
3.12	Noeuds et cellules utilisées pour le calcul du terme de diffusion $\nabla^2 T$ avec l'opérateur $2\Delta$ au noeud situé au centre - Image tirée de la thèse de N. Lamarque [71]	51
3.13	Configuration du calcul du tube chauffé	52
3.14	Effet d'une génération uniforme d'énergie dans un cylindre creux - Comparaison entre <i>AVTP</i> (symboles) et la théorie (trait pointillé)	52
3.15	Couche limite dynamique d'un écoulement sur une plaque plane	53
3.16	Couches limites dynamique $\delta$ et thermique $\delta_T$ d'un écoulement sur une plaque plane verticale en fonction du nombre de <i>Prandtl</i> $Pr$	55
3.17	Convection naturelle le long d'un mur vertical	56

3.18 Critère de transition entre la convection naturelle et forcée le long d'un mur vertical [73]	57
3.19 Régimes d'ébullition . . . . .	59
3.20 Courbe d'ébullition en vase à puissance imposée - Expérience de <i>Nukiyama</i> [76] . . . .	59
3.21 Ébullition en vase à température de paroi imposée - Expérience de <i>Drew et Müller</i> [77]	61
3.22 Régimes d'écoulement diphasique d'un fluide dans une conduite verticale [78] . . . . .	62
3.23 Carte des régimes d'écoulement diphasique air/eau liquide dans un tube vertical de diamètre de 5,1 cm à une atmosphère [78] - $U_{GS}$ et $U_{LS}$ sont respectivement la vitesse du gaz et du liquide . . . . .	63
3.24 Spectre électromagnétique . . . . .	65
3.25 Puissance émissive du corps noir selon la longueur d'onde pour différentes valeurs de température - Loi de <i>Planck</i> . . . . .	66
3.26 Direction d'émission et angle solide sur la sphère unité . . . . .	68
3.27 Luminance d'un point $\mathbf{r}$ selon la direction $\mathbf{s}$ traversant une surface $dS$ de normale $\mathbf{n}$ . .	69
3.28 Variation de l'émissivité avec la température pour la brique (réfractaire) et pour deux métaux (Al et Cr) . . . . .	71
3.29 Spectre d'absorptivité d'un mélange isotherme d'azote et de dioxyde de carbone [82] .	71
3.30 Modèle de distribution statistique des raies sur une bande étroite $\Delta\nu$ . . . . .	75
3.31 Découpage du spectre synthétique sur des bandes étroites et construction de la fonction cumulative $\kappa(g)$ [100] . . . . .	76
3.32 Coordonnées pour la dérivation de l'Équation de de Transfert Radiatif . . . . .	77
3.33 Directions de l'arrangement de la quadrature $S_8$ , selon <i>Koch et al.</i> [113] - représentation d'un quadrant et de sa décomposition sur 10 directions, c'est-à-dire un total de 80 directions, indiquées par les sphères sur la surface . . . . .	80
3.34 Schéma de la méthode des ordonnées discrètes dans un plan . . . . .	82
3.35 Principe de réordonnement des cellules pour la méthode DOM dans <i>PRISSMA</i> [100, 108]	84
3.36 Rayonnement dans un milieu absorbant entre deux surfaces noires froides . . . . .	85
3.37 Comparaison des résultats $S_2$ et $S_4$ à la solution exacte pour le cas 1D - Quadrature $S_2$ asymétrique et $S_4$ . . . . .	85
3.38 Effet de la discrétisation angulaire sur la résolution à la paroi . . . . .	86
3.39 Schéma des flux transférés à une surface grise . . . . .	87
3.40 Comparaison des coefficients de transfert $\overline{h_{rad}}$ calculés avec Eq. (3.121) et Eq. (3.123) .	88
3.41 Évolution du coefficient de transfert effectif $\overline{h_{eff}}$ avec la température moyenne Eq. (3.125) - Les zones typiques des coefficients en régime forcé et en régime libre sont superposés	89
3.42 Schéma d'un radiomètre ellipsoïdal . . . . .	90
3.43 Coupes du maillage sans tubes utilisé pour le calcul du rayonnement par <i>PRISSMA</i> de la flamme <i>CANDLE</i> . . . . .	91

3.44	Champ du terme source radiatif $S_r$ pour le cas 4 dans un plan vertical - Les symboles $\otimes$ localisent les mesures de flux incidents effectuées sur site . . . . .	92
3.45	Profils de température et de terme source radiatif $S_r$ à la hauteur de $h = 3m$ . . . . .	93
3.46	Amplitude du flux radiatif $q^r$ dans une coupe horizontale à la hauteur $h = 7m$ pour la quadrature angulaire $S_8$ . . . . .	93
3.47	Comparaison des quadratures spatiales $S_4$ , $S_8$ et $LC_{11}$ sur des profils de l'amplitude du flux radiatif $q^r$ sur un cercle de rayon $r = 2m$ à la hauteur de $h = 7m$ . . . . .	94
3.48	Profils de terme source radiatif à la hauteur de $h = 3m$ pour une température de paroi de 750K et 1000K . . . . .	95
3.49	Profils de flux radiatif net pour une température de paroi à 750K et 1000K à la hauteur de $h = 3m$ . . . . .	96
3.50	Influence de la température du réfractaire sur le calcul des flux radiatifs incidents simulés - Comparaison avec les mesures . . . . .	96
4.1	Schéma de couplage flamme/solide du système « Chambre de combustion » . . . . .	102
4.2	(a) interpolation « plus proche point », (b) interpolation linéaire et (c) interpolation conservative pour un maillage monodimensionnel - Les traits fins représentent les valeurs aux éléments - les traits épais représentent les valeurs aux noeuds . . . . .	103
4.3	Comparaison de l'interpolation conservative et linéaire conservative sur un maillage monodimensionnel - Les traits fins représentent les valeurs aux éléments - Les traits épais représentent les valeurs aux noeuds . . . . .	104
4.4	Schéma de couplage solide/dépôt du système « Procédé » . . . . .	104
4.5	Analogie électrique d'une résistance thermique d'un tube encrassé dans un four . . . . .	106
4.6	Schéma de couplage flamme/solide/dépôt du système « Four » . . . . .	106
5.1	Coupes du maillage utilisé pour le calcul de la flamme de diffusion par <i>CANDLE</i> et <i>PRISSMA</i> dans le calcul couplé du système « Chambre combustion » . . . . .	108
5.2	Maillage d'une passe utilisé pour le calcul conductif par <i>AVTP</i> dans le calcul couplé du système « Chambre combustion » . . . . .	108
6.1	Couplage entre la conduction dans le solide et la loi de dépôt . . . . .	122
6.2	Schéma de principe du couplage thermique entre la température de la paroi et la loi de dépôt . . . . .	130
6.3	Erreur absolue sur la température du mur entre couplages synchronisé ( $\alpha_c = 1$ ) et désynchronisé ( $\alpha_c = 200$ ) dans l'expérience de <i>Marteney &amp; Spadaccini</i> . . . . .	131
6.4	Bilan d'énergie sur un tube . . . . .	132
6.5	Données extraites du four de <i>Feyzin</i> . . . . .	134
6.6	Évolution temporelle de la température du pétrole . . . . .	135

6.7	Évolution temporelle du débit de pétrole brut $\dot{m}$ . . . . .	135
6.8	Évolution temporelle de la puissance échangée entre la flamme et le pétrole brut . . . .	136
6.9	Température de la paroi du tube 17 à 5m en fonction du temps . . . . .	136
6.10	Variation du taux de résistance $\frac{dR_{\text{coke}}}{dt}$ en fonction de $1000/T_m$ . . . . .	137
7.1	Couplage global entre la combustion, le rayonnement, la conduction dans le solide et la loi de dépôt . . . . .	141
7.2	Schéma d'une passe du four <i>Feyzin</i> (Vue dépliée verticale). Les symboles $\otimes$ indiquent la position des thermocouples . . . . .	142
7.3	Évolution temporelle de la température de paroi au niveau du thermocouple situé sur le tube numéro 18 - Comparaison entre les données TOTAL et les calculs . . . . .	144
7.4	Évolution temporelle de la température de paroi au niveau du thermocouple situé sur le tube numéro 17 - Comparaison entre les données TOTAL et les calculs . . . . .	145
7.5	Température moyenne le long de la passe - Comparaison entre le profil à 1 heure et à 6 heures de temps physique . . . . .	146
7.6	Épaisseur moyenne de coke le long de la passe . . . . .	147
7.7	Comparaison des flux radiatif moyen le long de la passe à 1 heure et à 6 heures . . . . .	148
7.8	Évolution angulaire de la température sur le tube 17 à 5m à l'instant initial et à 6hr . . .	150
7.9	Évolution angulaire de l'épaisseur du dépôt dans le tube 17 à 5m à $t = 1\text{hr}$ et $t = 6\text{hr}$ . .	151
7.10	Évolution angulaire de l'épaisseur du dépôt dans le tube 2 à 5m à $t = 1\text{hr}$ et $t = 6\text{hr}$ . . .	152
7.11	Comparaison des flux radiatifs sur le tube 17 à 5m à 1hr et à 6hr . . . . .	152





## Liste des tableaux

1	Coûts estimés liés au problème d'encrassement évalués sur une année pour divers pays	xvi
1.1	Exemples de matériaux rencontrés dans les fluides utilisés dans les procédés industriels	6
1.2	Paramètres de la loi d'encrassement de <i>Ebert &amp; Panchal</i> [1]	16
1.3	Modèles globaux [16]	17
2.1	Composition molaire du mélange TOTAL et de son mélange modèle TOTAL-TP1	20
2.2	Pouvoirs Calorifiques Inférieurs molaire (gauche) et massique (droite) des espèces $H_2$ , $CH_4$ , $C_3H_8$ , $C_8H_{18}$ comparé au mélange <i>TOTAL-TP1</i>	22
2.3	Températures maximales en fonction de l'étirement	28
2.4	Données du point de fonctionnement de l'installation <i>Feyzin</i>	35
3.1	Nombres sans dimension caractéristique	42
3.2	Données du point de fonctionnement de l'installation	63
3.3	Cosinus directeurs et poids pour les quadratures $S_2$ et $S_4$	81
3.4	Cas tests pour le four <i>Feyzin</i>	90
3.5	Coordonnées des points de mesures des flux incidents	93
7.1	Caractéristiques de l'écoulement de pétrole brut dans les tubes du four <i>Feyzin</i>	142
7.2	Propriétés des tubes ASTM A335	143
7.3	Paramètres de la loi de dépôt	143
7.4	Zones d'influence pour le tube 17	149



# Bibliographie

- [1] W.A Ebert and CB Panchal. Analysis of Exxon crude oil slip-stream coking data. *Fouling Mitigation of Industrial Heat-Exchange Equipment*, 1997.
- [2] E Hückel. Quantum-theoretical contributions to the benzene problem. i. the electron configuration of benzene and related compounds. *Z. Physik*, 70 :204–286, 1931.
- [3] A Chauvel, G Lefebvre, and L Castex. Procédés de pétrochimie. *Technip*, 1985.
- [4] U Chaudhuri. Fundamentals of petroleum and petrochemical engineering. *CRC Press*, Jan 2010.
- [5] E.M Ishiyama, W.R Paterson, and D.I Wilson. The effect of fouling on heat transfer, pressure drop and throughput in refinery preheat trains : Optimisation of cleaning schedules. *Heat Exchanger Fouling and Cleaning VII*, page 9, 2008.
- [6] D Chaudagne. Fouling costs in the field of heat exchange equipment in the french market. *Fouling Mechanisms : Theoretical and Practical Aspects*, Bohnet, M., TR Bott, AJ Karabelas, PA Pilavachi, R. Séméria and R. Vidil (Eds.). *European Edn. Thermies and Industry, Paris, France*, pages 21–25, 1991.
- [7] Thackery and P A. The cost of fouling in heat exchange plant. *Institution of Corrosion Science and Technology and Institution of Chemical Engineers Conference*, pages 1–9, May 1979.
- [8] B Garrett-Price. Fouling of heat exchangers : Characteristics, costs, prevention, control and removal. *Noyes Publications*, Jan 1985.
- [9] PA Pilavachi and JD Isdale. European community r&d strategy in the field of heat exchanger fouling : projects. *Heat Recovery Systems and CHP*, 13(2) :133–138, 1993.
- [10] X Zhi-Ming, Z Zhong-Bin, and S Yang. Costs due to utility fouling in china. *ECI Conference on Heat Exchanger Fouling and Cleaning : Fundamentals and Applications*, Jan 2008.
- [11] Van Nostrand, WL, Leach Jr, SH, Haluska, and JL. Economic penalties associated with the fouling of refinery heat transfer equipment. pages 1–27, May 1981.
- [12] N Epstein. Thinking about heat transfer fouling : A 5 x 5 matrix. *Heat transfer engineering*, 4(1) :43–56, 1983.
- [13] T Bott. Fouling of heat exchangers. *International journal of heat and mass transfer*, Jan 1997.
- [14] M Srinivasan and AP Watkinson. Fouling of some canadian crude oils. *Heat transfer engineering*, 26(1) :7–14, 2005.

- [15] Alberta Energy. Alberta energy annual report 2005- 2006. pages 1–104, Sep 2006.
- [16] M Srinivasan. Heat exchanger fouling of some canadian crude oils. 2008.
- [17] BD Crittenden, ST Kolaczowski, and IL Downey. Fouling of crude oil preheat exchangers. *Chemical engineering research & design*, 70(6) :547–557, 1992.
- [18] S Asomaning. *Heat exchanger fouling by petroleum asphaltenes*. 1997.
- [19] Z Saleh, R Sheikholeslami, and A P Watkinson. Fouling characteristics of a light australian crude oil. *ECI Conference on Heat Exchanger Fouling and Cleaning : Fundamentals and Applications*, Jan 2004.
- [20] BJ Fuhr, C Cathrea, L Coates, H Kalra, and AI Majeed. Properties of asphaltenes from a waxy crude. *Fuel*, 70(11) :1293–1297, 1991.
- [21] AP Watkinson and N Epstein. Gas oil fouling in a sensible heat exchanger. volume 65, pages 84–90, 1969.
- [22] G.T Polley, DI Wilson, BL Yeap, and SJ Pugh. Evaluation of laboratory crude oil threshold fouling data for application to refinery pre-heat trains. *Applied Thermal Engineering*, 22(7) :777–788, 2002.
- [23] V R Katta and W M Roquemore. Modeling of deposition process in liquid fuels. *Combustion Sciences and Technologies*, 139, 1998.
- [24] D Q Kern and R E Seaton. A theoretical analysis of thermal surface fouling. *British Chemical Engineering*, 4(5) :258–262, 1959.
- [25] GD Stefanidis, B Merci, GJ Heynderickx, and GB Marin. Cfd simulations of steam cracking furnaces using detailed combustion mechanisms. *Computers & chemical engineering*, 30(4) :635–649, 2006.
- [26] X Lan, J Gao, C Xu, and H Zhang. Numerical simulation of transfer and reaction processes in ethylene furnaces. *Chemical Engineering Research and Design*, 85(12) :1565–1579, 2007.
- [27] AP Watkinson and DI Wilson. Chemical reaction fouling : A review. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 14(4) :361–374, 1997.
- [28] DI Wilson, GT Polley, and SJ Pugh. Ten years of ebert, panchal and the ‘threshold fouling’ concept. *Heat Exchanger Fouling and Cleaning-Challenges and Opportunities*, page 6, 2006.
- [29] BL Yeap, DI Wilson, GT Polley, and SJ Pugh. Retrofitting crude oil refinery heat exchanger networks to minimize fouling while maximizing heat recovery. *Heat transfer engineering*, 26(1) :23–34, 2005.
- [30] M.R Jafari Nasr and M Majidi Givi. Modeling of crude oil fouling in preheat exchangers of refinery distillation units. *Applied Thermal Engineering*, 26(14-15) :1572–1577, 2006.
- [31] CB Panchal, WC Kuru, CF Lia, WA Ebert, and J Palen. *Threshold Condition for Crude Oil Fouling*. 1999.

- [32] Mostafa M Awad. Fouling of heat transfer surfaces. pages 1–38, 2004.
- [33] W Rodi. *Turbulence models and their application in hydraulics : a state-of-the art review*. 1993.
- [34] DC Wilcox. *Turbulence modeling for CFD*, volume 2. 1998.
- [35] PS Granville. Baldwin-lomax factors for turbulent boundary layers in pressure gradients. *AIAA Journal*, 25 :1624–1627, 1987.
- [36] B Baldwin and H Lomax. Thin-layer approximation and algebraic model for separated turbulent flows. volume 1, 1978.
- [37] PR Spalart and SR Allmaras. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows. *La Recherche Aéronautique*, 1(1) :5–21, 1994.
- [38] BE Launder, GJ Reece, and W Rodi. Progress in the development of a reynolds-stress turbulence closure. *Journal of Fluid Mechanics*, 68(03) :537–566, 1975.
- [39] J Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Mon. Weather Rev.* , 91 :99–164, 1963. ref lolo.
- [40] M Germano, U Piomelli, P Moin, and W Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids* , 3(7) :1760–1765, 1991. ER.
- [41] D K Lilly. A proposed modification of the germano sub-grid closure method. *Phys. Fluids* , 4(3) :633–635, 1992.
- [42] K Mahesh, G Constantinescu, and P Moin. A numerical method for large-eddy simulation in complex geometries. *J. Comput. Phys.* , 197(1) :215–240, 2004.
- [43] L Selle, G Lartigue, T Poinso, R Koch, K-U Schildmacher, W Krebs, B Prade, P Kaufmann, and D Veynante. Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combust. Flame* , 137(4) :489–505, 2004. jx.
- [44] S Roux, G Lartigue, T Poinso, U Meier, and C Bérat. Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and large eddy simulations. *Combust. Flame* , 141 :40–54, 2005. jx.
- [45] Thierry Poinso and Denis Veynante. Theoretical and numerical combustion. page 522, Jan 2005.
- [46] P Wolf, G Staffelbach, and R Balakrishnan. . . . Azimuthal instabilities in annular combustion chambers. *Proceedings of the . . .* , Jan 2010.
- [47] L Wang and H Pitsch. Large-eddy simulation of an industrial furnace with a cross-flow-jet combustion system. pages 1–10, Oct 2007.
- [48] F A Williams. Spray combustion and atomization. *Phys. Fluids* , 1 :541–546, 1958. JMS.
- [49] R Borghi and M Champion. *Modélisation et théorie des flammes*. 2000. ERbib.
- [50] K K Kuo. *Principles of Combustion*. 1986.

- [51] S P Burke and T E W Schumann. Diffusion flames. *Industrial and Engineering Chemistry*, 20(10) :998–1005, 1928.
- [52] G Damkohler. The effect of turbulence on the flame velocity in gas mixtures. *Z. Electrochem*, 46 :601–626, 1940.
- [53] COSILAB. <http://www.softpredict.com/>. ref SEB, MB.
- [54] David G Goodwin. Cantera code site, Jul 2009.
- [55] R S Barlow, JH Franck, AN Karpetsis, and J-Y Chen. Piloted methane/air jet flames : Transport effects and aspects of scalar structure. *Combustion and Flame*, (143) :433–449, 2005.
- [56] R.W Bilger. The structure of turbulent nonpremixed flames. *Symposium (International) on Combustion*, 22(1) :475 – 488, 1989.
- [57] GP Smith, DM Golden, M Frenklach, NW Moriarty, B Eiteneer, M Goldenberg, CT Bowman, RK Hanson, S Song, WC Gardiner Jr, et al. Gri-mech 3.0. URL : [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech), 1999.
- [58] A Linan. The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies. *Acta Astronautica*, 1 :1007, 1974.
- [59] P Clavin and A Li nán. Theory of gaseous combustion. an introductory course. *NATO ASI Ser. B*, 116 :291–338, 1984.
- [60] Forman A. Williams. Combustion theory : the fundamental theory of chemically reacting flow systems. page 704, Jan 1985.
- [61] M Abramowitz and I.A Stegun. Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables. national bureau of standards applied mathematics series 55. tenth printing. 1972.
- [62] KE Gustafson. *Introduction to partial differential equations and Hilbert space methods*. 1999.
- [63] RE Showalter. *Hilbert space methods for partial differential equations*, volume 1. 1977.
- [64] T Poinso, P Popp, M Baum, G Bruneaux, and T Baritaud. Direct numerical simulations of flame-wall interaction. 1995.
- [65] H C Hottel and W R Hawthorne. Diffusion in laminar flame jets. pages 254 – 266, 1949.
- [66] HS Carslaw and JC Jaeger. Heat conduction in solids. *Oxford UP, Oxford*, page 75, 1959.
- [67] MN Ozisik. Heat conduction, wiley, new york, 1993.
- [68] Charles E. Baukal. Industrial burners handbook. page 790, Jan 2004.
- [69] J Amaya. Unsteady coupled convection, conduction and radiation simulations on parallel architectures for combustion applications. *Simulation*, Jan 2010.
- [70] N Lamarque and T Poinso. Boundary conditions for acoustic eigenmodes computation in gas turbine combustion chambers. *AIAA Journal*, 46(9) :2282–2292, 2008.

- [71] N Lamarque. *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère*. PhD thesis, 2007. PhDMGarcia.
- [72] A Bejan and AD Kraus. *Heat transfer handbook*. 2003.
- [73] JR Lloyd and EM Sparrow. Combined forced and free convection flow on vertical surfaces. *International journal of heat and mass transfer*, 13(2) :434–438, 1970.
- [74] JH Lienhard, R Eichhorn, and JH Lienhard. *A heat transfer textbook*. 1987.
- [75] PH Oosthuizen and D Naylor. *An introduction to convective heat transfer analysis*. 1999.
- [76] S Nukiyama and Y Tanasawa. Experiments in on the atomization of liquids in air stream. report 3 : on the droplet-size distribution in an atomized jet. *Trans. Soc. Mech. Eng. Japan*, 5 :62–67, 1939.
- [77] TB Drew and AC Mueller. Boiling. *Trans. AIChE*, 33 :449, 1937.
- [78] Y Taitel, D Bornea, and AE Dukler. Modelling flow pattern transitions for steady upward gas-liquid flow in vertical tubes. *AIChE Journal*, 26(3) :345–354, 1980.
- [79] AE Dukler and Y Taitel. Flow pattern transitions in gas-liquid systems : measurement and modeling. *Multiphase Science and Technology*, 2(1-4), 1986.
- [80] FW Dittus and LMK Boelter. Heat transfer in automobile radiators of the tubular type. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 12(1) :3–22, 1985.
- [81] M Brewster. Thermal radiative transfer and properties. *Wiley Interscience*, Jan 1992.
- [82] N Lallemand, A Sayre, and R Weber. Evaluation of emissivity correlations for h<sub>2</sub>o/co<sub>2</sub>-n<sub>2</sub>/air mixtures and coupling with solution methods of the radiative transfer equation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 22(6) :543–574, 1996.
- [83] MF Modest and H Zhang. The full-spectrum correlated-k distribution and its relationship to the weighted-sum-of-gray-gases method. *ASME-PUBLICATIONS-HTD*, 366 :75–84, 2000.
- [84] Robert Siegel and J.R Howell. Thermal radiation heat transfer. *NASA*, 3, Jan 1971.
- [85] J Taine and J-P Petit. *Cours et données de base. Transferts thermiques. Mécanique des fluides anisotherme*. 1995.
- [86] W Malkmus. Random lorentz band model with exponential-tailed s-1 line-intensity distribution function. *Journal of the Optical Society of America*, 57(3) :323–329, 1967.
- [87] Liu, Smallwood, and Omer. Band lumping strategy for radiation heat transfer calculations using a narrowband model. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 14(2) :278 – 281, 2000.
- [88] M F Modest. *Radiative heat transfer*. 2003.
- [89] H Hottel and Adel F Sarofim. Hottel and sarofim radiative transfer. *McGraw-Hill Book Company*, Jan 1967.

- [90] M F Modest. The weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary solution methods in radiative transfer. *ASME Transactions Journal of Heat Transfer*, 113 :650–656, 1991.
- [91] A Soufiani and E Djavdan. A comparison between weighted sum of gray gases and statistical narrow-band radiation models for combustion applications. *Combust. Flame*, 97(2) :240–250, 1994. Jx.
- [92] M K Denison and B W Webb. The spectral-line-based weighted-sum-of-gray-gases model in nonisothermal nonhomogeneous media. *ASME Journal of Heat Transfer*, (117) :359–365, 1995.
- [93] M K Denison and B W Webb. A spectral line based weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary rte solvers. *ASME Journal of Heat Transfer*, (115) :1004–1012, 1993.
- [94] L Pierrot, A Soufiani, and J Taine J. Accuracy of narrow-band and global models for radiative transfer in h<sub>2</sub>o, co<sub>2</sub> and h<sub>2</sub>o-co<sub>2</sub> mixtures at high temperature. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 62 :523–548, 1999.
- [95] L Pierrot, P Rivière, A Soufiani, and J Taine. A fictitious-gas-based absorption distribution function global model for radiative transfer in hot gases. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 62(5) :609–624, 1999.
- [96] V Goutiere, F Liu, and A Charette. An assessment of real-gas modelling in 2d enclosures. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 64 :299–326, 2000.
- [97] Comparative performance of non-gray gas modeling techniques. *Numerical Heat Transfer Part B : Fundamentals*, 41 :361–381, 2002.
- [98] G A Domoto. Frequency integration for radiative transfer problems involving homogeneous non-gray gases : The inverse transmission function. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 14(9) :935–942, 1974.
- [99] J Dufresne, R Fournier, and J.Y GRANPEIX. Inverse gaussian k-distributions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 61(4) :433–441, Jan 1999.
- [100] D Poitou. Modélisation du rayonnement dans la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente. *ethesis.inp-toulouse.fr*, Jan 2009.
- [101] JR Howell. The monte carlo method in radiative heat transfer. *Journal of Heat Transfer*, 120 :547–560, 1998.
- [102] P Coelho, OJ Teerling, and D Roeckaerts. Spectral radiative effects and turbulence/radiation interaction in a non-luminous turbulent jet diffusion flame. *Combustion and Flame*, Jan 2003.
- [103] P Perez. PhD thesis, 2003.
- [104] W Fiveland. Discrete-ordinates solutions of the radiative transport equation for rectangular enclosures. *Journal of Heat Transfer*, Jan 1984.
- [105] SW Baek and MY Kim. Modification of the discrete-ordinates method in an axisymmetric cylindrical geometry. *Numerical Heat Transfer-Part B-Fundamentals*, 31(3) :313–326, 1997.



- [106] LB BARICHELLO and CE SIEWERT. A new version of the discrete-ordinates method. volume 2, pages 22–26.
- [107] GD Raithby. A finite-volume method for predicting a radiant heat transfer in enclosures with participating media. *Journal of Heat Transfer*, Jan 1990.
- [108] D Joseph, M El Hafi, R Fournier, and B Cuenot. Comparison of three spatial differencing schemes in discrete ordinates method using three-dimensional unstructured meshes. *Int. J. of Therm. Sci.* , 44(9) :851–864, Sep 2005.
- [109] Lionel Tesse, Francis Dupoirieux, and Jean Taine. Monte carlo modeling of radiative transfer in a turbulent sooty flame. *International journal of heat and mass transfer*, 47(3) :555 – 572, 2004.
- [110] M Roger, S Blanco, M El Hafi, and R Fournier. Monte carlo estimates of domain-deformation sensitivities. *Physical Review Letters*, 95(18) :180601, 2005.
- [111] D Joseph, P Perez, M El Hafi, and B Cuenot. Discrete ordinates and monte carlo methods for radiative transfer simulation applied to computational fluid dynamics combustion modeling. *Journal of Heat Transfer*, Jan 2009.
- [112] R Koch and R Becker. Evaluation of quadrature schemes for the discrete ordinates method. *J. Quant Spectrosc. Radiat. Transfer*, 84 :423–435, 2004.
- [113] R Koch, W Krebs, S Wittig, and R Viskanta. Discrete ordinates quadrature schemes for multidimensional radiative transfer. *J. Quant Spectrosc. Radiat. Transfer*, 53(4) :353–372, 1995.
- [114] J Truelove. Discrete-ordinate solutions of the radiation transport equation. *Journal of Heat Transfer*, Jan 1987.
- [115] V Lebedev. Values of the nodes and weights of ninth to seventeenth order gauss-markov quadrature formulae invariant under the octahedron group with inversion. *USSR Computational Mathematics and Mathematical . . .* , Jan 1975.
- [116] BG Carlson and KD Lathrop. Transport theory - the method of discrete ordinates. *Computing Methods in Reactors Physics*, 1968.
- [117] D Joseph. *Modélisation des transferts radiatifs en combustion par la méthode aux ordonnées discrètes sur des maillages non-structurés tridimensionnels*. PhD thesis, 2004.
- [118] R Siegel and J Howell. *Thermal Radiation Heat Transfer*. 2002.
- [119] C Rey. Numerical methods for radiative heat transfer. *dialnet.unirioja.es*, Jan 2007.
- [120] DM Rowe. *CRC handbook of thermoelectrics*. 1995.
- [121] S Paschen. *Thermoelectrics handbook*. 2005.
- [122] A.V Murthy, I Wetterlund, and D.P DeWitt. Characterization of an ellipsoidal radiometer. *JOURNAL OF RESEARCH-NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY*, 108(2) :115–124, 2003.

- [123] F Duchaine, A Corpron, L Pons, V Moureau, F Nicoud, and T Poinso. Development and assessment of a coupled strategy for conjugate heat transfer with large eddy simulation : Application to a cooled turbine blade. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 30 :1129–1141, 2009.
- [124] S Jaure. Massively parallel conjugate heat transfer solver based on large eddy simulation and application to an aeronautical combustion chamber. *a publier*, 2012.
- [125] PJ Marteney and LJ Spadaccini. Thermal decomposition of aircraft fuel. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 1986.
- [126] J TeVelde, LJ Spadaccini, EJ Szetela, and MR Glickstein. Thermal stability of alternative aircraft fuels. *AIAA, SAE, and ASME, Joint Propulsion Conference, 19 th, Seattle, WA*, 1983.
- [127] William H. Press, Brian P. Flannery, and Saul A. Teukolsky. Numerical recipes in fortran 77 : Volume 1. 1 :992, Jan 1992.
- [128] F Oberhettinger. *Tables of Bessel Transform*. 1972.