République Algérienne Démocratique et Populaire *Ministère d'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique*

École Nationale Polytechnique



Département de Génie Mécanique

Mémoire de fin d'études

Pour l'obtention du diplôme d'ingénieur d'état en Mécanique

Thème :

Evaluation des pertes par boil-off dues aux transferts de chaleur et aux pertes de charge dans les lignes de transfert de GNL

Proposé par : Pr M.A. Ait-Ali Réalisé par : Dirigé par : Mr L. Ziani Mr A. Smaili Pr M.A. Ait-Ali 2006 /2007

هذا البحث يشكل مساهمة في تقييم كمية الغاز الطبيعي المميّع التي تتبخر حين مروره داخل الأنابيب، هذا كي تكون لنا فكرة دقيقة عن كيفية توزع التبخر (بالانكليزية بويل أوف (boil-off) داخل مصنع الغاز الطبيعي المميع، ما يمكننا من معرفة الكميات المتبخترة بدقة. كي نقيّم التبخر استعملنا معادلة Peng & Robinson و كي ندرس سيلان الغاز الطبيعي المميّع داخل الأنابيب استعملنا برنامج مسمى Fluent.

كلمات مفتاحيه : تبخر الغاز الطبيعي المميّع، الغاز الطبيعي المميّع، boil-off.

<u>ملخص</u>

<u>Résumé</u>

Ce mémoire est une contribution à l'évaluation de l'évaporation qui se produit dans une ligne de GNL, pour permettre de se faire une idée plus précise de la répartition des pertes par boil-off dans une usine, et donc d'en déterminer les quantités exactes.

Pour quantifier l'évaporation, on a utilisé l'équation de Peng et Robinson ; pour d'étudier l'écoulement diphasique qui se produit dans la ligne, on a utilisé un logiciel de simulation de dynamique des fluides, le Fluent.

Mots clés : boil-off, GNL, gaz naturel, gaz naturel liquéfié.

Summary

This report is a contribution to the evaluation of the evaporation of liquid natural gas in LNG pipes, in order to get a better idea about the distribution of the production of the boil-off in a LNG plant.

To quantify the evaporation of LNG, we used the Peng and Robinson equation of state, and a computational fluid dynamics (CFD) software, Fluent, to simulate a tow phase flow inside the LNG pipe.

Key words : boil-off, LNG, liquid natural gas.

DEDICACES

Je dédie ce travail

Aux êtres les plus chères ma Mère et mon Père A mon adorable frère Khalil Ainsi qu'à tous mes Amis

REMERCIEMENTS

Je tiens à exprimer mes sincères remerciements à tous les enseignants qui ont participés à ma formation, au Professeur M.A. Ait Ali et au Dr Smaili, pour m'avoir confié ce travail, ainsi que pour leurs précieux conseils.

Je tiens également à dire un grand merci à toutes les personnes qui m'ont aidé de prés ou de loin à réaliser ce travail, ne serait-ce que par des réflexions.

Je remercie les membres du jury d'avoir pris la peine de lire et de juger ce travail.

A tous ceux qui ont voulu que je réussisse, je dis mercie du fond du coeur.

Sommaire

Introduction générale	1
-----------------------	---

Chapitre I : Généralités

I.1.1. Le GNL et sa production	5
I.1.2. Chaîne du GNL	5
I.1.2. Procédés de production de GNL	7
I.1.3. Description d'une usine de production	
I.2. Notions sur les écoulements diphasiques	9
I.2.1. Configurations d'écoulements	9
I.2.2. Equations générales	
I.2.3. Définitions	14
I.3. Transfert de chaleur	
I.3.1. Les mécanismes de transfert de chaleur	
I.3.2. Convection forcée	
I.3.3. Ebullition	
I.4. Définition du «boil-off »	20

Chapitre II : Méthodes numériques et présentation du logiciel Fluent

II.1. Modélisation numérique	
II.2. La méthode des volumes finis	
II.2.1. Schémas d'interpolation	
II.3. Le logiciel Fluent	
II.3.1. Fluent Inc.	
II.3.2. FLUENT	
II.3.3. L'interface de Fluent	
II.3.4. Le calcul sur Fluent	
II.3.5. Les fonctions définies pour l'utilisateur (UDF)	
• · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	

Chapitre III : Les équations d'état et les équilibres de phases

III.1. Les équations d'état	
III.1.1. L'équation de Van der Waals	
III.2. Les équilibres de phases	
III.2.1. Notion de fugacité	
III.2.2. Les règles de mélange	
III.3. L'équation d'état de Peng Robinson	
III.3.1. Règles de mélange	
III.3.2. Calcul de la fugacité	
III.3.3. Calcul de l'enthalpie	
III.4. Equation de Clausus Clapeyron	

Chapitre 4 : Simulations numériques

IV.1. Simulations préparatoires	
IV.1.1. Simulations d'écoulements laminaires	
IV.1.2. Simulations d'écoulements turbulents	44
IV.1.3. Simulations d'écoulements avec transfert de chaleur	49
IV.2. Simulation du boil-off dans une ligne	53
IV.2.1. Dimensions de la ligne	54
IV.2.2. Débit d'écoulement du GNL	54
IV.2.3. Les mécanismes de transfert de chaleur	55
IV.2.4. Composition du GNL et définition de ses propriétés	55
IV.2.5. les conditions à l'entrée et à la sortie	56
IV.2.6. Les mécanismes de transfert de masse	57
IV.2.7. Calcul du boil-off par l'équation de Peng et Robinson	60

Chapitre 5 : Résultats et discussions

V.1. Résultats pour une pression p=101450 Pa	68
V.2. Correction de la pression d'entrée sur Fluent	69
V.2.1. courbes de pression	69
V.2.2. courbes de résidu	71
V.3. Quantité de vapeur produite (boil-off)	72
V.4. Température de sortie	73
V.5. Composition de la vapeur	74

Conclusion générale	76
Perspectives	76

Références bibliographiques

Annexes

Nomenclature

Symboles	Unités	Significations
$a A_{G}$	\overline{m}^2	Coefficient de l'équation de Peng et Robinson Section droite de l'écoulement du gaz
A_{l}	m^2	Section droite de l'écoulement du liquide
$b a_c$	-	Coefficient de l'équation de Peng et Robinson Coefficient de l'équation de Peng et Robinson à l'état critique
b_c	-	Coefficient de l'équation de Peng et Robinson à l'état critique
<i>cp</i>	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	Chaleur specifique a pression constante
D	m	Diamètre de la conduite
e r	$J \cdot kg^{-1}$	Energie massique
$J \rightarrow$	pascal	Forces surfacious
\dot{F}_{Σ}	$N \cdot m^2$	Forces surfaciques
$\stackrel{\rightarrow}{F}_{\Omega}$	$m \cdot s^{-2}$	Forces volumétriques
g	$m \cdot s^{-2}$	Accélération gravitationnelle
g_T	$J \cdot mol^{-1}$	Enthalpie libre molaire
Н	$J \cdot mol^{-1}$	Enthalpie molaire
H^{*}	$J \cdot mol^{-1}$	Enthalpie molaire au conditions standard
h	$W \cdot K^{-1} \cdot m^{-2}$	Coefficient de transfert de chaleur par convection
$H_{_m}$	$J \cdot kg^{-1}$	Enthalpie massique
k	-	Coefficient d'équilibre
l	m	Longueur de la conduite
Μ	$kg \cdot mol^{-1}$	Masse molaire
m	$kg \cdot m^{-2}$	Masse totale
m_{g}	$kg \cdot m^{-2}$	Masse de gaz
n	-	Indice caractéristiques de l'écoulement
nu p	pascal	Nombre de Nusselt Pression
r	pascal	Pression critique
P_c	pascal	Pression de saturation
p Di	puscui	Nombro do Prondel
f_d	-	Cœfficient de pertes de charges linéaire
Q	$kg \cdot s^{-1}$	Débit massique
q	$W \cdot m^{-2}$	Flux de chaleur
R	m	Rayon de la conduite
R_{c}	-	Concentration volumique de vapeur
Re	-	Nombre de Reynolds

S	$J \cdot K^{-1} \cdot kg^{-1}$	Entropie massique
Т	K	Température
T_{c}	K	Température critique
T_i	K	Température d'entrée
T_m	Κ	Température moyenne
T_r	K	Température réduite
T_s	K	Température de surface
U	$m \cdot s^{-1}$	Vitesse axiale
<i>u</i> _m	$m \cdot s^{-1}$	Vitesse axiale moyenne
- U	$m \cdot s^{-1}$	Vitesse moyenne dans le temps
v	$m^3 \cdot mol^{-1}$	Volume molaire
V_{e}	$m \cdot s^{-1}$	Vitesse d'entrée
W	$kg \cdot s^{-1}$	Débit total
W_{G}	$kg \cdot s^{-1}$	Débit du gaz
X	-	Titre réel
X_s	-	Concentration massique de vapeur dans la section
X_i	-	Fraction du composant i, dans le liquide
y_i	-	Fraction du composant i, dans le gaz
Z	-	Coefficient de compressibilité
Z_{g}	-	Coefficient de compressibilité du gaz
Z_l	-	Coefficient de compressibilité du liquide
z_i	-	Fraction molaire
$\Delta h_{_f}$	$J \cdot mol^{-1}$	Enthalpie de formation
Δh^{σ}	$J \cdot mol^{-1}$	Enthalpie de vaporisation
α	-	Fraction molaire de vapeur
$\alpha_{_{v}}$	-	Fraction locale de vide
λ	$W \cdot K^{-1} \cdot m^{-2}$	Conductivité thermique
μ	$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$	Viscosité dynamique
ρ	$kg \cdot m^{-3}$	Masse volumique
$ ho_{_G}$	$kg \cdot m^{-3}$	Masse volumique du gaz
$ ho_l$	$kg \cdot m^{-3}$	Masse volumique du liquide
τ	$m^2 \cdot s^{-1}$	Diffusivité thermique
\mathcal{O}	-	Facteur acentrique
$\delta_{_{ij}}$	-	Coefficient d'interactions binaires
φ	-	Coefficient de fugacité
ϕ	W	Fonction de dissipation de Rayleigh
Y	-	Glissement

Liste des figures

fig I-1: Vue d'ensemble de l'usine de GNL de Skikda	6
fig I-2: schéma d'une chaîne de GNL	7
fig I-3 : schéma du cycle cascade classique et à cascade incorporée	
fig I-4 : configurations horizontales	
fig I-5 : configuration d'écoulement vertical	
fig I-6 : représentation d'un écoulement laminaire	
fig I-7 : représentation d'un écoulement turbulent	
fig I-8: Diagramme général d'équilibre liquide vapeur	
fig II-1 : interface de Fluent	
fig II-2 : les étapes de modélisation sur Fluent	
fig II-3 : types de mailles utilisables sur Fluent	
fig IV-1 : <i>maillage</i> 5x50	
fig IV-2 : maillage 10x100	
fig IV-3 : maillage 20x200	
fig IV-4 : maillage optimisé	
fig IV-5 : dimensions de la ligne de GNL	
fig IV-6 : Tronçon du modèle dessiné sur Gambit	
fig IV-7 : schéma physique d'une ligne de GNL	
fig V-1 : courbes des résidus	
0	

Liste des graphes

graphe 1 : Production pour l'année 2005 de Gaz Naturel en Gm ³	1
graphe 2 : Production de GNL dans le monde en millions m ³ pour l'année 1999	2
graphe 3 : évolution de la production Algérienne de GNL entre 1992 et 2002 en millier	s de
m^3 par an	3
graphe IV-1 : profils des vitesses pour les modèles sur fluent	42
graphe IV-2 : profils de vitesse à plusieurs sections	43
graphe IV-3: profil de vitesse de l'écoulement développé	43
graphe IV-4: Profil de pression le long de la conduite	44
graphe IV-5: variation de la vitesse axiale le long	46
graphe IV-6: profile de la vitesse pour une section à $x=50m$	47
graphe IV-7: variation de la pression le long de la conduite.	47
graphe IV-8: vitesse axiale le long de la conduite	48
graphe IV-9: profile de vitesse pour une section a $x=50m$	48
graphe IV-10: variation de la pression le long de la	49
graphe IV-11: variation de la température pour un flux de chaleur constant dans un	
écoulement laminaire	51
graphe IV-12: profil de température pour une section à 50m	51
graphe IV-13: variation de la température le long de la conduite pour un écoulement	
laminaire avec une température de paroi constante	52
graphe IV-14: variation de la température le long de la conduite pour un écoulement	
turbulent avec un flux de chaleur constant	52
graphe IV-15: variation de la température le long de la conduite pour un écoulement	
turbulent avec une température de paroi constante	53
graphe V-1 : profil de pression pour différentes valeurs du flux de chaleur	69
graphe V-2: variation de la pression de sortie en fonction du flux de chaleur	70
graphe V-3 : fraction massique de la vapeur à la sortie de la ligne, α_2 , en fonction du fla	ux de
chaleur	73
graphe V-4: température de sortie T_2 en fonction du flux de chaleur	74

Liste des tableaux

tableau 1 : Production de GNL par pays pour l'année 2005	2
tableau 2 : liste des pays importateurs de GNL, et quantité importée pour l'année 2006	3
tableau I-1 : comparaison de la composition du GN à celle du GNL	5
tableau IV-1: caractéristique de l'écoulement pour les trois valeurs du nombre de Reyno	lds
	45
tableau IV-2: propriétés du gaz naturel à l'état liquide à 111K	55
tableau IV-3: propriétés du gaz naturel à l'état vapeur à 111K	56
tableau IV-4: autres propriétés du gaz naturel	56
tableau IV-5: les constantes de l'équation de Clapeyron pour chaque composant	57
tableau V-1 : résultats pour une pression d'entrée p=101450 Pa	68
tableau V-2: valeurs de la pression d'entrée pour	70
tableau V-3 : vapeur produite en fonction du flux de chaleur	72
tableau V-4 : débit massique et fraction volumique de la vapeur à la sortie de la ligne	72
tableau V-5 : températures de sortie du GNL de la ligne	73
tableau V-6: composition de la vapeur de GNL pour différentes valeurs du flux de chaleu	ır 75

Introduction générale

Le monde voit sa demande d'énergie s'accroître sans cesse, l'énergie étant le moteur premier de toute activité, industrielle, commerciale ou autre. Elle est évidemment devenue source de tensions et de conflits, mais aussi moyen de pressions politiques. Les sources les plus utilisées sont les combustibles fossiles, le charbon, le pétrole et le gaz, le plus convoité d'entre eux étant le pétrole, qui tend à s'épuiser. Il est suivi directement par le Gaz Naturel avec une production mondiale de 2871 Gm³ durant l'année 2005 d'après BP (British Petroleum), soit 2,5 % de plus qu'en 2004. Dans le graphe suivant, on peut voir la production des principaux pays producteurs de gaz naturel.



graphe 1 : *Production pour l'année 2005 de Gaz Naturel en Gm³*, [13]

Le gaz naturel présente de nombreux avantages, sa combustion

- produit très peu ou presque pas de NOx.
- produit moins de CO₂ que les autres combustibles (55 kg/G J contre 77 kg/G J pour le pétrole et 100 pour le charbon).

Mais le plus avantageux c'est qu'il coûte moins cher que le pétrole, du fait de sa facilité d'extraction.

Même si la production de gaz naturel a connu une évolution remarquable depuis la fin des années 70, elle reste largement dépendante de la contrainte géographique. Contrairement au pétrole qui, lui, peut être transporté facilement par bateau, le gaz naturel est en général transporté dans des gazoducs, ce qui restreint les marchés autant pour les clients que pour les producteurs.

Pour toutes ces raisons, la production et le transport du gaz naturel sous forme liquide peuvent devenir intéressants. Depuis la construction de la première usine en 1963 en Algérie à Arzew, l'industrie du GNL s'est beaucoup développée. La production mondiale a atteint un total de 93,22 millions de m³ en 1995, pour passer à 125,12 millions de m³ en 1999, soit 34,25 % de plus.



graphe 2 : Production de GNL dans le monde en millions m^3 pour l'année 1999, [12]

En 2005, 13 pays exportent du GNL, les plus importants sont indiqués dans le tableau ci-dessous.

Pays	Volume (Mt/an)	Notes
Indonésie	22,6	Fournisseur de Japon et de la Corée du sud
Malaisie	20,4	Fournisseur de Japon et de la Corée du sud
Qatar	19,43	Fournisseur de Japon et de la Corée du sud
Algérie	18,4	Principal fournisseur de l'Europe
Australie	10,65	Fournisseur du Japon et de la Corée du sud
Trinidad	10,05	Principal fournisseur des Etats-Unis
Nigeria	8,63	
Brunei	6,6	
Oman	6,6	
Émirats	5,1	
États-Unis (Alaska)	1,32	Kenai LNG, fournisseur du Japon
Libye	0,62	Terminal en sous-capacité

tableau 1 : Production de GNL par pays pour l'année 2005,[13]

2

	Volume (Mt/an)	Terminaux d'importation actifs
Japon	59,7	Environ 25
Corée du Sud	25,9	4 : Pyongtaek, Inchon, Tongyeong, Kwangyang
Espagne	17,8	5
États-Unis	12,1	5 (tous sur la côte est)
France	10,1	2 : Fos-sur-Mer et Montoir-de-Bretagne
Taiwan	7,5	Yung-An
Inde	5,8	3 : Dahej, Hazira et Dabhol (ce dernier en 2006)
Turquie	4,2	2 : Marmara Ereglisi et Ismir
Belgique	3,1	Zeebruge
Italie	2,3	Panigaglia
Portugal	1,4	Sines
Royaume-Uni	2,6	Isle of Grain
Chine	0,7	Guang Dong (2006)
Mexique	0,7	Altamira (2006)
Grèce	0,4	Revithoussa
Porto Rico	0,5	San Juan
Rép. dominicaine	0,2	Andres

Et on peut le voir dans le tableau suivant, 17 pays importent du GNL en 2006 pour une masse totale de 155 mega tonnes :

tableau 2 : liste des pays importateurs de GNL, et quantité importée pour l'année 2006, [13]

L'Algérie est le premier producteur de GNL, avec une usine construite en 1963 à Arzew, d'une capacité de 7500 m³/jour, l'usine comprend trois unités. En 1972 une nouvelle usine, de trois unités, d'une capacité de 19500 m³/jour est construite à Skikda. En 1977 l'usine d'Arzew passe à une capacité de 54000 m³/jour. Trois ans après, en 1981, de nouvelles unités sont construites à Skikda, ce qui augmente la capacité de l'usine à 57000 m³/jour.

On peut voir dans le graphe suivant l'évolution de la production de GNL, en Algérie entre 1992 et 2002.



graphe 3 : évolution de la production Algérienne de GNL entre 1992 et 2002 en milliers de m³ par an,[14]

Toutes ces données montrent bien que le marché du GNL est en pleine expansion, et cela ne devrait pas s'arrêter dans les années à venir. Certains parlent même d'une OPEP du gaz, car le GNL permettrait l'ouverture de nouveaux marchés pour les pays producteurs, mais aussi un plus large choix pour les importateurs. On planifie la construction de nouvelles d'usines de production de GNL, ainsi que des unités de regazéification. Au Canada, aux USA, ou encore en Asie, le problème majeur de cette industrie est son prix de production élevé, en raison principalement du coût énergétique des procédés de production et de transport.

La production, le transport et le stockage du GNL produit des gaz évaporés, riche en méthane et azote, que l'on brûle dans les chaudières ou dans les torches.

L'objectif de cette étude consiste à évaluer la quantité de GNL évaporé dans les lignes de transfert. Pour cela, on étudiera l'écoulement du GNL dans une ligne en faisant des simulations sur un logiciel de simulation d'écoulement, le Fluent. On approchera le comportement thermodynamique du gaz par l'équation de Peng et Robinson.

Chapitre I

Généralités

I.1.1. Le GNL et sa production

Le Gaz Naturel Liquéfié (**GNL**) est du gaz naturel (**GN**) condensé à l'état liquide, ce qui permet une réduction du volume de 600 fois par rapport à l'état gazeux. En effet, lorsque ce gaz est refroidi à une température d'environ -162°C (111 K) à la pression atmosphérique, il prend la forme d'un liquide clair, transparent, inodore, non corrosif et non toxique.

Le GNL est du gaz naturel, dont la composition est différente du GN, comme l'indique le tableau ci-dessous,

Composant	Composition du GN	Composition du GNL	
N_2	5,60	0,85	
CO_2	0,21	Pratiquement nul	
CH ₄	83,40	91,5	
C_2H_6	7,60	5,64	
C_3H_8	1,90	1,5	
$i - C_4 H_{10}$	0,40	0.5	
$i - C_5H_{12} + C_6H_{14} + n - C_5H_{12}$	0,12	0,3	

Tableau I-1 : comparaison de la composition molaire du GN à celle du GNL

NB: Les compositions données dans ce tableau sont des moyennes.

Les extractions des fractions lourdes permet d'obtenir essentiellement du méthane, de l'éthane, du propane et de l'azote

I.1.2. Chaîne du GNL

Le gaz naturel est acheminé via des gazoducs, depuis le gisement jusqu'à l'usine de liquéfaction toujours située sur un site maritime. Des stations de recompression, distantes de 50 à 100 kilomètres, maintiennent la pression entre 50 et 100 bars.

Une fois arrivé dans l'usine, le gaz passe dans les unités suivantes :

- l'unité d'épuration du gaz où se fait l'élimination de CO₂, H₂S, H₂O, gazolines (essences naturelles) ;
- l'unité de liquéfaction, qui comprend :
 - les échangeurs cryogéniques et les colonnes de distillation,
 - le ou les compresseurs de cycle, avec leurs turbines d'entraînement à gaz ou à vapeur, des chaudières à vapeur, le cas échéant,
 - le circuit d'eau de mer de réfrigération (compresseur, turbine) ;
- les réservoirs cryogéniques pour le stockage du GNL et les lignes pour leur chargement;
- les appontements et les lignes de chargement des méthaniers, avec leurs bras articulés.



fig I-1: Vue d'ensemble de usine de GNL de Skikda, [6]

Le GNL une fois produit est chargé sur des bateaux méthaniers, ces derniers sont réalisés selon deux technologies.

- Celle, dite « à membranes », de GTT (Groupement de Gaz Transport et de Technigaz, société française de GDF, Total et Bouygues Offshore). Les cuves du navire sont intégrées à la coque ; les membranes constituent un revêtement cryogénique spécial recouvrant intérieurement les cuves.
- celle « à sphères autoporteuses », dite *MRK*, de la société concurrente japonaise Moss-Rosenberg. Les réservoirs cryogéniques sont alors complètement indépendants de la structure du navire, ce qui présente l'avantage de réduire la durée de onstruction, donc le coût. En contrepartie, l'espace est moins bien utilisé et donc l'encombrement du navire est plus grand pour le même volume utile.



fig I-2: schéma d'une chaîne de GNL, [6]

Une fois livré le GNL est regazeifié, dans des unités conçues à cet effet, afin de desservir le réseau urbain.

I.1.2. Procédés de production de GNL, [6]

L'histoire du GNL débute en 1940 aux États-Unis à Cornwell avec la réalisation d'une station expérimentale équipée d'une unité de liquéfaction de 17 m³ par jour associée à un stockage de 40 m³. Cette installation fut réalisée par Linde, selon le cycle de Pictet.

Il existe commercialement 3 procédés différents de production de GNL.

1. Cycle à cascade classique

Le procédé est celui mis en oeuvre à Arzew (Algérie) dans trois unités de 0.5×10^9 Nm³/an de la CAMEL (Compagnie Algérienne de Méthane Liquéfié), mises en service en 1963. Il s'agit d'une cascade classique à aspiration froide, fonctionnant avec 3 étages au propane, 4 étages à l'éthylène et 3 étages au méthane. Le transfert de froid se fait par étapes successives à des températures progressivement décroissantes.

2. Cycle à cascade incorporée

C'est encore un cycle à cascade, mais à fluide frigorigène unique constitué d'un mélange adéquat de certains composants du gaz naturel. Les pressions de condensation et de vaporisation sont, aux pertes de charge près, les mêmes de bout en bout. La composition du mélange est choisie de manière que la quantité condensée dans une zone de température constituant un étage, apporte par vaporisation dans la zone suivante la quantité de froid nécessaire à cet étage suivant.



fig I-3: à gauche, schéma du cycle cascade classique et à droite cascade incorporée, [5]

3. Cycles mixtes

Ce sont des variantes du cycle à cascade incorporée qui mettent en oeuvre deux cycles en cascade. Un premier cycle permet de descendre à une température comprise entre -40 et -65 °C ; il peut être du type propane à plusieurs niveaux de pressions ou du type à cascade incorporée à composants lourds (éthane, propane, butane et pentane). Un deuxième cycle, du type à cascade incorporée, à composants légers (azote, méthane, éthane, propane), permet d'atteindre la température finale désirée généralement comprise entre -160 et -162 °C.

I.1.3. Description d'une usine de production

La capacité d'un train (module) étant technologiquement limitée, une usine de production de GNL se compose de plusieurs trains de production. Chaque train comporte toutes les sections permettant la production de GNL à partir de gaz naturel brut :

- *Section de démercurisation* : le mercure étant très corrosif, il risque d'endommager les tube en aluminium ; on l'extrait dans des ballons.
- *Section de décarbonatation* : le CO₂ est extrait dans des colonnes d'absorption ; il est très important de l'extraire car il se solidifie à de basses températures, obstruant ainsi les tubes.

- Section de déshydratation ; où le gaz naturel décarbonisé est refroidi au propane pour enlever de grandes quantités d'eau dans un séparateur avant de passer dans le sécheur et puis dans un filtre pour être débarrassé de toute l'eau.
- Section de pré-refroidissement au propane ; le gaz une fois traité passe dans un échangeur pour être refroidi à une température de -26°C.
- Section de séparation des hydrocarbures ; où l'on sépare les composants lourds de ce qui va être la composition finale du GNL ; on extrait ainsi un produit commercialisable, la gazoline.
- Section compression au MCR : le MCR est un mélange d'azote, de méthane et de propane. Ce mélange circule dans une boucle fermée à deux compresseurs où il est utilisé pour sous refroidir le GN à une température de -148 °C.
- Section de liquéfaction : le GNL sortant en tête de l'échangeur principale passe dans un ballon de détente où sa température atteint -161 °C, ce flash qui s'est produit libère un gaz léger riche en azote qui sera acheminé ver des brûleurs.

Le GNL ainsi produit est envoyé pour être stocké de façon temporaire dans des réservoirs, via des lignes de transfert. Le GNL sera une fois encore transporté dans des lignes vers les terminaux de chargement. Au bout de chaque ligne il y a une conduite avec une vanne pour le retour des vapeurs de GNL (boil-off).

Pour faire tourner les compresseurs, les pompes et les auxiliaires, l'usine peut être reliée au réseau électrique local ; mais on dispose aussi toujours de ce que l'on peut appeler alimentation propre en énergie. Cela se concrétise par des turbines à gaz ou à vapeur. Donc l'usine dispose de chaudières pour la production de vapeur d'eau ; il est judicieux d'utiliser les gaz de boil-off comme appoint, ce qui réduit l'apport extérieur en énergie.

I.2. Notions sur les écoulements diphasiques, [1]

Lors de l'écoulement du GNL dans les lignes il se produit une évaporation (le boil-off). Nous serons donc en présence de deux phases en écoulement, une phase liquide, le GNL, et phase gazeuse, les vapeurs de GNL. Même si les calculs de l'écoulement, des pertes de charge, et des transferts de chaleur qui ont lieu le long des lignes se feront sur le Fluent, il est nécessaire de maîtriser les notions clés concernant les écoulements diphasiques afin de pouvoir choisir le modèle adéquat parmi ceux proposés par le logiciel.

Nous présentons ici les différentes configurations des écoulements diphasiques et les équations qui les régissent. L'étude des transferts de masse et d'équilibre de phases sera développée dans le chapitre IV.

I.2.1. Configurations d'écoulements

On appelle configuration d'écoulement l'ensemble des paramètres qui décrivent la forme (structure et dimension) de chacune des phases dans l'écoulement. En général, cette description peut se faire par l'observation directe si l'écoulement est lent, ou par photographie. Des méthodes plus élaborées sont évidemment utilisables, chaque type de configuration peut en effet correspondre à une évolution caractéristique de certains paramètres hydrodynamiques.

• Configuration d'écoulement horizontal



1. Ecoulement à bulles (Bubble flow)



5. ecoulemnt par bouchons (Slug flow)



2. Ecoulement à poches (Plug flow)



6. Ecoulement annulaire (Annular flow)



3. Ecoulement stratifié (stratified flow)



7. Ecoulement dispersé (Spray Flow)



sens d'écoulement

4. Ecoulement par vagues (Wavy flow)

fig I-4 : configurations horizontales

Lorsqu'on augmente le débit de gaz dans un écoulement diphasique horizontal, on constate successivement les configurations suivantes selon les régimes hydrodynamiques et thermodynamiques en présence :

- 1. un écoulement à bulles (bubble flow) ; les bulles se déplacent dans la partie supérieure du tube à la même vitesse que le liquide,
- 2. un écoulement à poches (plug flow) ; des poches de liquide et de gaz se déplacent alternativement dans la partie supérieure du tube.

- 3. un écoulement stratifié (stratified flow) ; le liquide s'écoule dans la partie inférieure du tube et le gaz au-dessus, l'interface est lisse,
- 4. un écoulement à vagues (wavy flow) ; c'est le même que le précédent mais avec une interface perturbée,
- 5. un écoulement à bouchons (slug flow) ; des bouchons de gaz circulent à une vitesse supérieure à la vitesse moyenne du liquide,
- 6. un écoulement annulaire (annular flow) ; un film se forme sur la paroi du tube,
- 7. un écoulement dispersé (spray flow) ; le liquide forme un brouillard dans le gaz.
- Configurations d'écoulement vertical :

En augmentant la vitesse du gaz, on constate :

- 1. un écoulement à bulles (bubble flow) ; la forme des bulles est très variée, elles ont tendance à se rassembler au centre du canal,
- 2. un écoulement à bouchons (slug flow),
- 3. un écoulement à coalescence (churn flow) ; le gaz est très dispersé dans le liquide,
- 4. un écoulement semi-annulaire (semi-annular flow), c'est la transition entre l'écoulement à forte coalescence et l'écoulement annulaire,
- 5. un écoulement annulaire (annular flow),
- 6. un écoulement dispersés (mist ou spay flow) sous forme de brouillard.



fig I-5 : configuration d'écoulement vertical

• Écoulements pulsés

Dans certaines conditions de fonctionnement, le débit de l'écoulement peut être oscillatoire. Dans certains cas, surtout à basse pression, il peut y avoir expulsion périodique du liquide contenu dans le canal. Il est certain que dans ce cas les effets dynamiques jouent un rôle important.

I.2.2. Equations générales

Après avoir caractérisé l'écoulement d'un point de vue qualitatif, il convient de l'aborder sous sa forme quantitative. Pour cela on dispose des mêmes principes de base que pour l'étude des écoulements monophasiques, à savoir :

- 1. conservation de masse ou équation de continuité,
- 2. conservation de la quantité de mouvement,
- 3. conservation de l'énergie ou premier principe de la thermodynamique,
- 4. second principe de la thermodynamique.
- Equations sous forme intégrale (bilans globaux)
- 1. *Conservation de la masse*. Si l'on désigne par Σ la surface limitant le volume de contrôle Ω , on écrira, comme pour les écoulements monophasiques :

$$\oint_{\Sigma} \rho \vec{V} \cdot \vec{n} d \Sigma + \frac{\partial}{\partial t} \oint_{\Omega} \rho d\Omega = 0$$
(1-1)

avec :

- ρ : masse volumique,
- \vec{V} : vecteur vitesse,
- \vec{n} : vecteur normal à la surface $\sum |\vec{n}|| = 0$.
- Conservation de la quantité de mouvement. Nous écrirons, selon le théorème d'Euler, la somme des forces agissant sur le volume de contrôle (forces de volume et de surface) :

$$\vec{F}_{\Sigma} + \vec{F}_{\Omega} \oint_{\Omega} \rho d\Omega = \oint_{\Sigma} \vec{V} \left(\rho \vec{V} \cdot \vec{n} \right) d\Sigma + \oint_{\Sigma} \rho \vec{V} d\Omega$$
(1-2)

avec :

 \vec{F}_{Σ} : force surfacique, \vec{E} : force surfacique, 3. conservation de l'énergie.

$$\oint_{\Sigma} \left(H_m + \frac{V^2}{2} + gz \right) \rho \vec{V} \cdot \vec{n} d \Sigma + \frac{\partial}{\partial t} \oint_{\Omega} \rho e d\Omega = \frac{dq}{dt} - \frac{dw_x}{dt} - \frac{dw_y}{dt}$$
(1-3)

avec :

- H_m : enthalpie massique,
- g : accélération de la pesanteur,
- z : coordonnée (hauteur),
- *e* : énergie interne massique.
- 4. *deuxième principe de la thermodynamique*. La variation totale de l'entropie est égale ou supérieure au flux de chaleur divisé par la température.

$$\frac{\partial}{\partial t} \oint_{\Omega} \rho \, sd\,\Omega \,+\, \oint_{\Sigma} \rho \, s\vec{V} \cdot \vec{n}\,d\,\Sigma \,\geq\, \oint_{\Sigma} \frac{1}{T} \frac{d\,q_{e}}{d\,t} \tag{1-4}$$

avec :

- *s* : entropie massique,
- q_e : quantité de chaleur échangée.
- Equations sous forme différentielle (équations locales)
- 1. Conservation de la masse.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div \left(\rho \vec{V} \right) = 0 \tag{1-5}$$

2. conservation de la quantité de mouvement.

$$\rho \, \frac{d\vec{V}}{dt} = \rho \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \left(\vec{V} \cdot \overline{g \, rad} \right) \vec{V} \right] = \rho \, \vec{F}_{\Omega} - \overline{g \, rad} \, \rho \tag{1-6}$$

3. Conservation de l'énergie.

$$\rho \quad \frac{d \ h}{d \ t} - \frac{d \ p}{d \ t} = \frac{d \ q_{e}}{d \ t} + \phi \tag{1-7}$$

avec ϕ la fonction de dissipation de Rayleigh

$$\phi = \frac{2}{3} \mu \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} - \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right] + \left[\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 \right]$$
(1-8)

I.2.3. Définitions

• Titre

On appelle titre réel X le rapport du débit massique de vapeur au débit massique total :

$$X = \frac{W_G}{W} \tag{1-9}$$

avec :

 W_G : débit massique du gaz,

W : débit massique total.

• Concentration massique de vapeur dans la section

Désigné par X_s. C'est le rapport entre la masse de gaz et la masse total, Dans une section donnée d'épaisseur unité,

$$X_s = \frac{m_G}{m} = \frac{\rho_G A_G}{\rho_G A_G + \rho_L A_L} \tag{1-10}$$

avec :

 m_G : masse de gaz,

m : masse totale.

 ρ_{G}, ρ_{L} : masses volumiques du gaz, et du liquide respectivement

 A_G , A_L : section droite de l'écoulement du gaz, et du liquide respectivement.

• *Concentration volumique de vapeur dans la section (fraction de vide)*

Dans une section donnée d'épaisseur unité, c'est le rapport entre le volume de gaz et le volume total,

$$R_c = \frac{v_G}{v_G + v_L} \tag{1-11}$$

avec :

 v_G : Volume massique du gaz,

 v_L : Volume massique du liquide

Si l'on fait tendre l'épaisseur de l'élément de volume vers zéro, R_c tend vers la fraction locale de vide α_v .

$$\alpha_{v} = \frac{A_{G}}{A_{G} + A_{L}} \tag{1-12}$$

• Glissement

C'est le rapport des vitesses moyennes de deux phases dans la section

$$\gamma = \frac{V_G}{V_L} \tag{1-12}$$

Avec :

 V_G : vitesse moyenne du gaz,

 V_L : vitesse moyenne du liquide.

I.3. Transfert de chaleur, [4]

Les mécanismes de transfert de chaleur et les lois qui les régissent nous permettent de comprendre et de cerner les phénomènes liés au boil-off et d'aborder son étude, afin de pouvoir monter un modèle sur Fluent.

I.3.1. Les mécanismes de transfert de chaleur

• Conduction

C'est le mode de transfert de chaleur au sein d'un milieu sans déplacement de matière (par contact), sous l'influence d'un gradient de température. La propagation de la chaleur par conduction à l'intérieur d'un corps s'effectue selon deux mécanismes distincts : une transmission par les vibrations des atomes ou molécules et une transmission par les électrons valence.

La théorie de la conduction repose sur l'hypothèse de Fourier : le flux de chaleur est proportionnel au gradient de température :

$$\dot{q} = -\lambda \frac{dT}{dx}$$
(1-13)

avec :

q: flux de chaleur (W/m)

 λ : conductivité thermique du milieu (W/mK),

T: température (K)

• Convection

C'est un mécanisme de transfert de chaleur qui se fait par contact des particules mais aussi par leur déplacement. Ce mécanisme de transfert est régi par la loi de Newton dans le cas d'un transfert entre une plaque et un fluide :



$$q = h \left(T_p - T_\infty \right) \tag{1-14}$$

avec :

- q : Flux de chaleur transmis par convection (W/m²)
- *h* : Coefficient de transfert de chaleur par convection (W/m^2K)
- T_n : Température de surface du solide (K)
- T_{∞} : Température du fluide loin de la surface du solide (K)

Remarque : La valeur du coefficient de transfert de chaleur par convection h est fonction de la nature du fluide, de sa température, de sa vitesse et des caractéristiques géométriques de la surface de contact solide/fluide.

Il existe deux types de transfert de chaleur par convection.

- 1. Convection naturelle : le fluide est mis en mouvement sous le seul effet des différences de masse volumique résultant des différences de température sur les frontières et d'un champ de forces extérieures (la pesanteur).
- 2. Convection forcée : le mouvement du fluide est induit par une cause indépendante des différences de température (pompe, ventilateur...); c'est le cas de notre étude.

• Rayonnement

C'est un transfert d'énergie électromagnétique entre deux surfaces (même dans le vide). Dans les problèmes de conduction, on prend en compte le rayonnement entre un solide et le milieu environnant et dans ce cas nous avons la relation ; entre deux plaques parallèles infinies, on a simplement :

$$q = \sigma \varepsilon_p \left(T_p^4 - T_{\infty}^4 \right) \tag{1-15}$$

Avec :

q: flux de chaleur transmis par rayonnement (W/m²)

 σ : constante de Stephan (5,67.10-8 W/m² K⁴)

 ε_p : facteur d'émission de la surface

 T_{p} : température de la surface (**K**)

 T_{∞} : température du milieu environnant la surface (**K**)

I.3.2. Convection forcée

L'étude du transfert de chaleur par convection permet de déterminer les échanges de chaleur se produisant entre un fluide et une paroi. Compte-tenu du lien entre le transfert de masse et le transfert de chaleur, il est nécessaire de considérer le régime d'écoulement. Considérons l'écoulement d'un fluide dans une conduite.

En régime laminaire, l'écoulement s'effectue par couches parallèles pratiquement indépendantes.



fig I-6 : représentation d'un écoulement laminaire

Entre deux filets fluides adjacents, les échanges de chaleur s'effectuent donc :

- par conduction uniquement si l'on considère une direction normale aux filets fluides,

- par convection et conduction (négligeable), si l'on considère une direction non normale aux filets fluides.



En régime turbulent, l'écoulement n'est pas unidirectionnel :

fig I-7 : représentation d'un écoulement turbulent

L'échange de chaleur dans la zone turbulente s'effectue par convection et conduction dans toutes les directions. On vérifie que la conduction est généralement négligeable par rapport à la convection.

I.3.3. Ebullition



• Formation des bulles

fig I-8: Diagramme général d'équilibre liquide vapeur, [4]

On donne la pression de saturation corrigée,

$$p_{rb}\left(T\right) = p_s\left(T\right) - \frac{2\sigma}{r_b} \tag{1-16}$$

donc si $r_b \rightarrow 0$ alors $p_{rb} \rightarrow \infty$.donc une bulle ne pourrait théoriquement pas prendre naissance dans un liquide qui est un milieu continu. On suppose que sur les parois chauffées sur lesquelles se produit l'ébullition se trouvent des discontinuités (petites cavités contenant de l'air) qui servent de "germes" favorisant la naissance des bulles. Ces points privilégiés sont appelés "sites" et leur nombre croît avec la différence Tp – Ts(p) entre la température de la surface chauffée et la température de saturation du liquide sous la pression p.

Les différents régimes d'ébullition, les variations du coefficient de transfert de chaleur h en fonction de l'écart de température Tp - Ts(p) présentent la même allure pour un grand nombre de liquides ; elles sont représentées par le Graphe de Nukiyama :



★ Zone AB :

Bien que Tp > Ts(p), il n'y a pas encore naissance de bulles. L'échange paroi liquide s'effectue par convection naturelle et obéit à la loi de Newton, le transfert de chaleur se calcule par une corrélation adéquate.

★ Zone BC :

Les bulles montent en colonne à partir de points isolés de la paroi : les « sites ». Ensuite elles deviennent de plus en plus nombreuses et isolent presque totalement la paroi par une couche de vapeur presque continue. L'évacuation de la chaleur s'effectue principalement sous forme de chaleur latente de vaporisation. C'est la zone d'ébullition nucléée.

✤ Point C :

La couche de vapeur isole totalement la paroi du liquide et la chaleur ne peut plus se transmettre que par l'intermédiaire de la vapeur de très faible conductivité thermique. L'augmentation brutale de la résistance thermique va provoquer une brusque augmentation de la température de la paroi chauffante jusqu'à un niveau qui va permettre d'évacuer le flux fourni à la paroi à la fois par conduction convection et par rayonnement.

✤ Zone CD :

C'est une zone instable.

✤ Zone DE :

C'est une zone d'ébullition pelliculaire dans laquelle le transfert de chaleur de la paroi vers le liquide s'effectue par conduction et par rayonnement à travers la couche continue de vapeur surchauffée.

I.4. Définition du «boil-off»

A la sortie des trains de production le GNL est à une température de -162 °C. Ce liquide est en saturation ; cela veut dire que la moindre quantité de chaleur apportée provoque une évaporation. Dans le cas du GNL celle-ci est connue sous l'appellation anglaise « boil-off ».

Ce problème est surtout rencontré au niveau des cuves, car le gaz passe plus de temps en réserve, il est donc susceptible d'échanger une grande quantité de chaleur avec l'extérieur, ce qui engendre un phénomène d'évaporation important. Toutefois l'expérience montre que se phénomène se produit aussi dans les lignes.

On souligne que le calcul du boil-off qui se produit dans les ligne est difficile à réaliser en raison de l'écoulement, de ce fait mais aussi parce que le GNL passe très peu de temps dans une ligne, le phénomène est souvent négligé.

Aujourd'hui, les moyens numériques nous permettent d'approcher les solutions de problèmes complexes. Dans le chapitre suivant on présentera le logiciel Fluent. On citera les possibilités qu'il offre, on parlera aussi de la méthode des volumes finis, qui est la méthode utilisée par ce logiciel.

Chapitre II

Méthodes numériques et présentation du logiciel Fluent

II.1. Modélisation numérique

La modélisation numérique consiste en la résolution de formules mathématiques qui décrivent le comportement d'un système ou d'un phénomène étudié par des méthodes numériques.

Devant la complexité des problèmes rencontrés et la limite des solutions analytiques, les méthodes numériques deviennent une excellente alternative ; elles sont même devenues nécessaires par la complexité des phénomènes étudiés.

L'invention et le développement des machines de calcul, ont permis l'introduction et la mise en application de nouvelles méthodes, des méthodes de discrétisation comme la méthode des différences finies, la méthode des élément finis, puis la méthode des volumes finis. Cela a permis de résoudre des problèmes jusque-là irrésolus. L'exemple le plus impressionnant qui a mobilisé des moyennes de calcul énormes est celui du calcul des variables météorologiques.

II.2. La méthode des volumes finis

En analyse numérique, la méthode des volumes finis est utilisée pour résoudre numériquement des équations aux dérivées partielles. Mais, contrairement à la méthode de différences finies qui utilise des approximations de dérivées, la méthode de volumes finis utilise des approximations d'intégrales. Toutefois, la méthode des éléments finis utilise une formulation variationnelle de l'équation à résoudre (on parle aussi de forme faible), tandis que la méthode de volumes finis est fondée directement sur la forme dite forte de l'équation.

On résout l'équation aux dérivées partielles de manière approchée sur un maillage. Ce maillage est constitué de volumes finis. Ce sont des petits volumes (en 3D, des surfaces en 2D, des segments en 1D) dont la réunion forme le domaine d'étude. Il peuvent être construits autour de points d'un maillage initial, mais pas nécessairement.

Les méthodes de volumes finis ont été mises au point pour des lois de conservation. Des développements récents permettent à présent de les utiliser pour des équations elliptiques et paraboliques. Ces équations aux dérivées partielles contiennent des termes de divergence. Les intégrales de volume d'un terme de divergence sont transformées en intégrales de surface en utilisant le théorème de flux-divergence. Ces termes de flux sont ensuite évalués aux interfaces entre les volumes finis. On utilise une fonction de flux numérique pour faire une approximation des flux aux interfaces. Comme le flux entrant dans un volume donné est égal au flux sortant du volume, ces méthodes sont conservatives, ce qui est particulièrement important lorsqu'on résout des lois de conservation.

Un autre avantage de la méthode des volumes finis est qu'elle est facilement utilisable avec des maillages non-structurés. En effet, la formulation d'une méthode de volumes finis ne tient aucun compte de la complexité du maillage, pour ce qui est de la discrétisation des lois de conservation. En revanche les caractéristiques géométriques du maillage peuvent jouer un rôle déterminant pour ce qui est des flux diffusifs.

Pour la détermination des valeurs des grandeurs physiques, on utilise une méthode ou schéma d'interpolation.

II.2.1. Schémas d'interpolation

On peut en citer cinq :

- 1. Premier ordre ; qui est le schéma classique de la méthode.
- 2. *deuxième ordre* ; quand une précision plus importante est recherchée, on calcule les valeurs aux frontières des cellules.
- *3. en puissance ;* on utilise une interpolation exponentielle pour la détermination des valeurs nominales des variables dans chaque cellule.
- 4. schéma de différence centré ; il est utilisé pour représenter les termes de diffusion.
- 5. *schéma décentré ou upwind ;* il est introduit pour corriger les imperfections du schéma précédant.

II.3. Le logiciel Fluent, [15]

II.3.1. Fluent Inc.

Fluent et Gambit sont des logiciels sous licence commerciale permettant de faire des simulations, en 2 et 3 dimensions, en mécanique des fluides, allant de la construction du maillage sur Gambit à la résolution des équations et au traitement des résultats sur Fluent.

Fluent Inc. est l'un des plus grands fournisseurs du monde de logiciels et de services informatiques commerciaux de calcul de dynamique des fluides (CFD, en anglais computational fluid dynamic).

II.3.2. FLUENT

Fluent est un programme machine conçue pour modéliser les écoulements de fluides et de transferts thermiques dans des géométries complexes. Il a la capacité de résoudre des problèmes pour de nombreux types de mailles, y compris la capacité de résoudre des problèmes d'écoulement en utilisant des mailles non structurées qui peuvent être produites pour des géométries complexes avec une facilité relative. Les types de maille incluent les mailles deux dimensions, de forme triangulaire, quadrilatère, tétraédrique, hexaèdre, et en trois dimensions, pyramidale. Il permet également de raffiner les maillages.

Il est écrit dans le langage de programmation de C et utilise pleinement sa flexibilité et sa puissance. Toutes les fonctions nécessaires pour calculer une solution et pour montrer les résultats sont accessibles grâce à une interface interactive et pilotée par menu.

Le Fluent est fourni avec Gambit qui est un logiciel de génération de maillages. On peut définir la géométrie directement sur Gambit ou l'importer d'un autre logiciel de dessin comme solidWorks, Autocad etc....

Sur Gambit, on dispose d'un large choix de maillage que l'on peut ajuster selon les besoins ; on peut aussi y définir les conditions aux limites avant la création du fichier mesh qui sera lu par fluent et qui représente le domaine de calcul maillé.

II.3.3. L'interface de Fluent

Fluent se présente sous une interface graphique qui comprend :

- ✤ une fenêtre console,
- ✤ des panneaux de contrôle,
- ✤ des boites de dialogue,
- ♦ des fenêtres de graphisme pour la visualisation des domaines de calcul.

La console nous permet de choisir entre le mode graphique (les boîtes de dialogue, les panneaux,...) ou le mode texte où l'on peut saisir les opération à faire.


fig II-1 : interface de Fluent

II.3.4. Le calcul sur Fluent

Les simulations sur Fluent se font en utilisant la méthode des volumes finis. Le logiciel, via ses boîtes de dialogue permet à l'utilisateur de choisir un schéma de calcul approprié au problème. La figure suivante montre les étapes de simulation, de la création du domaine de calcul au traitement des résultats.



fig II-2 : les étapes de modélisation sur Fluent

Le TGRID est un programme sur Fluent qui permet la lecture des fichiers mesh, donc du domaine de calcul maillé.

II.3.4.1. Que peut-on modéliser sur Fluent ?

Le Fluent permet de faire les modélisations suivantes :

- écoulements permanents ou transitoires,
- écoulements incompressibles ou compressibles, y compris tous les écoulements de régimes de vitesse (bas subsonique, transsonique, supersonique, et hypersonique)
- écoulements non visqueux, laminaires, et turbulents,
- écoulements newtoniens ou non newtoniens,
- transfert thermique, y compris la convection forcée et naturelle, transfert thermique mixte, convection et rayonnement,
- mélange et réaction chimique d'espèces, y compris les modèles homogènes et hétérogènes de combustion et les modèles extérieurs de dépôt/réaction,
- surface libre et modèle multiphase pour les écoulements gaz-liquides, gaz-solide, et liquide-liquide.
- calcul lagrangien de trajectoire pour la phase dispersée (particules/gouttelettes/bulles),
- cavitation,

- modèle de changement de phase pour des applications de fusion/solidification,
- écoulements dans des milieux poreux, avec une perméabilité non isotrope,
- modèles de paramètres pour des ventilateurs, des pompes, des radiateurs, et des échangeurs de chaleur.
- modèles acoustiques pour prévoir le bruit,
- armature de référence multiple (MRF) des options de maille pour modeler les armatures mobiles.
- modélisation des interactions de rotor redresseur, des convertisseurs de couple, et des applications semblables de la turbomachines avec des options pour la conservation de masse.
- modèle de mailles dynamiques pour modeler des domaines mobiles avec déplacement et déformation des mailles,
- sources volumétriques de masse, de chaleur, et d'espèces chimiques,
- base de données matérielle et leurs propriétés,
- possibilités étendues de personnalisation par l'intermédiaire des fonctions définies pour l'utilisateur (UDF).



fig II-3 : types de mailles utilisables sur Fluent

II.3.5. Les fonctions définies pour l'utilisateur (UDF)

Ce sont des fonctions programmées par l'utilisateur qui peuvent être chargées de façon dynamique dans Fluent. Les UDF sont écrites en langage de programmation C, et sont chargées dans le logiciel pour fonctionner comme des sous programmes ou fonctions.

Cela ouvre de nouvelles possibilités mais elles restent limitées car on ne peut introduire ou charger ces fonctions qu'à des niveaux prévus par les concepteurs de Fluent, par exemple : pour décrire des conditions aux limites, imposer des profils de vitesse.

Même si elles sont écrites en langage C, il reste que le langage d'écriture de ces fonctions comprend une syntaxe particulière. Aussi, il faut toujours dans chaque fonction inclure le ficher d'en-tête 'udf.h'.

On rappelle que l'objectif de ce travail est d'évaluer la perte par boil-off, donc l'évaporation, dans une ligne de transfert de GNL.

On tentera de faire une simulation dans Fluent de l'écoulement du GNL dans une ligne de transfert avec évaporation, on tiendra compte de l'échange de chaleur avec l'extérieure. Aussi, afin d'évaluer l'évaporation qui se produit lors de l'écoulement, on écrira un programme UDF qu'on chargera dans Fluent, Ce programme se base sur une règles de mélange présentées dans le chapitre suivant.

Dans ce même chapitre, on présentera aussi l'équation d'état de Peng et Robinson, qu'on utilisera pour écrire un code sur Matlab 6.5. Ce code nous permettra d'évaluer les quantités de vapeur (boil-off) à la sortie de la ligne de transfert. **Chapitre III**

Les équations d'état et les équilibres de phases

III.1. Les équations d'état

Les équations d'état représentent à l'aide d'une expression mathématique la relation existant entre les conditions de température et de pression, le volume occupé et la quantité de matière pour un corps pur ou pour un mélange :

$$E(T, p, V, N) = 0 \tag{3-1}$$

où :

T : est la température,
p : la pression,
V : le volume,
N : le nombre de moles.

Cette relation est le plus souvent ramenée à la mole :

$$e(T, p, v) = 0$$
 (3-2)

où v est le volume molaire.

Il est souvent souhaitable, d'avoir une équation d'état précise, qui représente analytiquement le comportement T, p, v d'un corps. On a élaboré plusieurs équations d'état différentes ; la plupart d'entre elles ne sont précises que pour des conditions éloignées des conditions critiques. Toutes les équations d'état ne sont pas fiables lorsque elles sont utilisées en dehors des conditions pour lesquelles l'équation a été établie.

Parce que les expressions qui sont couramment utilisées sont imparfaites et ne peuvent satisfaire à tous les besoins, il et nécessaire de vérifier certains critères. Le plus important de ces critères est le domaine d'applications de l'équation considérée :

- Quels composés, ou quel familles ?
- ✤ Quelles propriétés ?
- Quel domaine de pression et de température ?

On peut regrouper les équations d'état en trois classes importantes, les équations généralisées, les équations empiriques, et les équations théoriques. La plus connue des équations d'état généralisée et aussi la plus ancienne, est l'équation de Van der Waals, qui a été introduite en 1873,[8].

III.1.1. L'équation de Van der Waals, [8]

C'est une amélioration de l'équation des gaz parfaits. Elle s'écrit comme suite :

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2}$$
(3-3)

où R est la constante des gaz parfaits.

La constante *b* a pour but de corriger le volume occupé par les molécules par rapport au modèle de gaz parfait. Le premier terme de l'équation est appelé pression de répulsion (repulsion pressure, p_R), $p_R = \frac{RT}{v-b}$.

Le terme $\frac{a}{v^2}$ est une correction qui tient compte des forces d'attraction

intermoléculaire. Ce terme est appelé pression d'attraction (attraction pressure, p_A).

Les constantes a et b sont évaluées à partir du fait que l'isotherme critique passe par un point d'inflexion à l'état critique et que sa pente y est nulle. Les constantes a et bs'écrivent dans le cas de l'équation de Van der Waals comme suit :

$$a = \frac{27}{64} \frac{R^2 T_c^2}{p_c}$$
(3-4)
$$b = \frac{RT_c}{8p_c}$$
(3-5)

où :

 T_c : est la température critique,

et p_c : la pression critique.

Après l'apparition de l'équation de Van der Waals, un très grand nombre de modifications semi-empiriques de cette équation ont été proposées, celles qui ont connus le plus grand succès sont :

- l'équation de Redlich et Kwong en 1949,
- l'équation de Redlich et Dunlop en 1963,
- l'équation de Wilson en 1969,
- l'équation de Zudkvitch et Joffe en 1970,
- l'équation de Ding-Yu Peng et Donald B. Robinson (PR) en 1975

Les plus utilisées sont l'équation de Peng et Robinson et l'équation de Soave Ridlich et Kwong, surtout dans le domaine des hydrocarbures.

III.2. Les équilibres de phases

III.2.1. Notion de fugacité, [7]

Avant de présenter les différentes règles de calcul d'équilibre de phase, il est important d'introduire la notion de fugacité car elle tient toute son importance dans ces calculs.

Le potentiel qui détermine l'équilibre d'un corps pur entre plusieurs phases est l'enthalpie libre molaire. Lewis (1923) a proposé de représenter l'enthalpie libre à l'aide d'une propriété auxiliaire, la fugacité. La fugacité est définie par la relation :

$$dg_{T} = RTd\ln f \tag{3-6}$$

avec :

 g_T : enthalpie libre, f : fugacité.

et la condition la condition limite :

$$\lim_{p \to 0} \binom{f}{p} = 1 \tag{3-7}$$

La fugacité se présente donc comme une pseudo-pression ou comme une pression effective, c'est-à-dire la grandeur qu'il faut substituer à la pression pour conserver les expressions propres au gaz parfait.

On définit aussi ce que l'on appelle coefficient de fugacité φ comme suit :

$$\varphi = \frac{f}{p} \tag{3-8}$$

Ce coefficient est obtenu en fonction du volume à partir de la relation :

$$RT\ln\varphi = \int_{0}^{p} \left(v - \frac{RT}{p}\right) dp \tag{3-9}$$

Ainsi pour un gaz parfait, $\varphi = 1$.

III.2.2. Les règles de mélange

III.2.2.1 Définitions

Dans un mélange de substances pures, où les deux phases, liquide et vapeur, sont en équilibre, on définit les grandeurs suivantes :

- la fraction molaire totale d'un composant, z_i , $z_i = \frac{\text{le nombre total de moles du composant}}{\text{le nombre total de moles}}$ (3-10)
- *la fraction molaire d'un composant dans la phase liquide, x_i*,

$$x_i = \frac{\text{le nombre de moles du composant dans la phase liquide}}{\text{le nombre total de moles dans la phase liquide}}$$
(3-11)

• la fraction molaire d'un composant dans la phase gazeuse, y_i,

$$y_i = \frac{\text{le nombre de moles du composant dans la phase gazeuse}}{\text{le nombre total de moles dans la phase gazeuse}}$$
(3-12)

• Le cœfficient d'équilibre, k_i , $k_i = \frac{y_i}{x_i}$ (3-13)

III.2.2.2. La solution idéale, [7]

La solution idéale, est celle où la fugacité du composant A dans un mélange est exprimée comme le produit de la fraction molaire de A par la fugacité de A pure dans la même phase que le mélange, à la pression et la température de ce dernier ; il est ainsi pour les autres composants du mélange. On se donne un système de n composants, supposons qu'il se comporte selon le modèle de la solution idéale. Les conditions d'équilibre requises sont :

$$x_{1}f_{1}^{L} = y_{1}f_{1}^{V}$$

$$x_{2}f_{2}^{L} = y_{2}f_{2}^{V}$$

$$\vdots$$

$$x_{n}f_{n}^{L} = y_{n}f_{n}^{V}$$
(3-14)

où les exposants L et V, veulent dire respectivement liquide et vapeur,

auxquel s'ajoutent les équations de conservation :

pour la phase liquide :

$$x_1 + x_2 + \dots + x_n = 1 \tag{3-15}$$

et pour la phase vapeur :

$$y_1 + y_2 + \dots + y_n = 1$$
 (3-16)

Si l'on connait les fugacités, on disposera d'un système de 2n équations en 2n inconnues. Ce système peut donc être résolu.

Il ne reste donc plus qu'à calculer la fugacité de chaque composant ; cela peut se faire en utilisant une équation d'état (equation (3-9)).

III.2.2.3. Règle de Raoult, [7]

Le modèle de la règle de Raoult est un cas particulier de la solution idéale et, bien qu'il ne soit pas aussi précis, il est néanmoins très convenable pour le comportement de solutions diluées à basse pression.

On suppose que les phases liquides et vapeur d'un système à n composant, obéissent à la règle de Raoult. La condition d'équilibre dans ce cas s'écrit comme suit :

$$x_{1}p_{1}^{sat} = y_{1}p$$

$$x_{2}p_{2}^{sat} = y_{2}p$$

$$\vdots$$

$$x_{n}p_{n}^{sat} = y_{n}p$$
(3-17)

en sachant que :

pour la phase liquide :

 $x_1 + x_2 + \dots + x_n = 1$

et pour la phase vapeur :

 $y_1 + y_2 + \dots + y_n = 1$

Nous obtenons donc un system de 2n équations pour 2n inconnues, ainsi le système peut être résolu. Les valeurs des pressions de saturation, peuvent être obtenues de diagramme, par des corrélations empiriques (Antoine), ou être calculées par l'équation de Clausus Clapeyron.

Ce modèle comprend deux hypothèses de plus que celui de la solution idéale. Pour un composant A d'un mélange ces hypothèses sont les suivantes :

- 1. la fugacité de A pur liquide, à la température et pression du système, est égale à la fugacité de A saturé à la même température et à la pression de saturation correspondante ;
- 2. A pur, sous forme de vapeur saturée, à la température du mélange et à la pression de saturation, se comporte comme un gaz parfait.

Ces deux hypothèses indiquent clairement les limites de la règle de Raoult par rapport au modèle de la solution idéale qui est plus précise, et surtout aux pressions élevées.

III.3. L'équation d'état de Peng Robinson, [9]

L'équation de PR est une modification de l'équation de Van der Waals, c'est donc une équation généralisée qui comprend les deux termes de pression d'attraction et de pression de répulsion et qui garde la même forme ; mais la pression d'attraction se présente sous la forme suivante :

 $p_A = -\frac{a}{g(v)}$, où g(v) est une fonction du volume molaire v, et 'a' n'est plus une

constante mais une fonction de la température.

L'équation se présente donc comme suit :

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a(T)}{v(v+b) + b(v-b)}$$
(3-18)

qui peut être écrite sous la forme :

$$Z^{3} - (1 - B)Z^{2} + (A - 3B^{2} - 2B)Z - (AB - B^{2} - B^{3}) = 0$$
(3-19)

où :

$$A = \frac{ap}{R^2 T^2} \tag{3-20}$$

$$B = \frac{ap}{RT}$$
(3-21)

$$Z = \frac{pv}{RT}$$
(3-22)

Au point critique, les paramètres de l'équation prennent les valeurs suivantes :

$$a(T_c) = 0.45724 \frac{R^2 T_c^2}{p_c}$$
(3-23)

$$b(T_c) = 0.07780 \frac{RT_c}{p_c}$$
 (3-24)

$$Z_{a} = 0.307$$
 (3-25)

A une température quelconque ces mêmes paramètres s'écrivent comme suit :

$$a(T_1) = a(T_c) \cdot \alpha(T_{ri1}, \omega)$$
(3-26)

$$b(T_1) = b(T_c) \tag{3-27}$$

où :

 T_r : est la température réduite de la substance,

 $\boldsymbol{\omega}$: le facteur acentrique (propre à toute substance, il est detérminer expérimentalement),

et $\alpha(T_r, \omega)$ est une fonction adimensionnelle de la température réduite et du facteur acentrique de la substance considérée.

Elle et déterminé pour toutes les substances par la fonction suivante :

$$\alpha(T_r,\omega) = \left[1 + \beta \left(1 - \left(\frac{T_{ci}}{T_1}\right)^{\frac{1}{2}}\right)\right]^2$$
(3-28)

où β est une constante caractéristique de toute substance, qui est donné on fonction du facteur acentrique :

$$\beta = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2 \tag{3-28}$$

III.3.1. Règles de mélange

Dans le cas d'un mélange, on calcule les paramètres a et b pour chaque composant qu'on notera a_i et b_i et puis on applique les règles suivantes :

$$a = \sum_{i} \sum_{j} z_{i} z_{j} a_{ij}$$

$$b = \sum_{i} z_{i} b_{i}$$
(3-29)
(3-30)

où :

 z_i : est la fraction molaire totale,

L'équation précédente suppose que la composition des phases liquides et vapeur est la même que la composition totale.

et

$$\begin{cases} a_{ij} = (1 - \delta_{ij}) a_i^{1/2} \cdot a_j^{1/2} \\ avec \\ \delta_{ij} = 0 \text{ pour } i = j \end{cases}$$
(3-31)
(3-32)

 δ_{ij} est appelé cœfficient d'interaction binaire ; il est déterminé empiriquement, et dépend bien sûr des deux composants i et j.

III.3.2. Calcul de la fugacité

En appliquant la relation (3-9), et en introduisant l'équation (3-18), on obtient l'équation suivante :

$$\ln\frac{f}{p} = Z - 1 - \ln\left(Z - B\right) - \frac{A}{2\sqrt{2B}}\ln\left(\frac{Z + 2.414B}{Z - 0.414B}\right)$$
(3-33)

Dans le cas d'un mélange, le cœfficient de fugacité pour un composant i est donné par la relation suivante :

$$\ln\left(\frac{\varphi_{i}}{x_{i}}\right) = \frac{b_{i}}{b}(Z-1) - \ln\left(Z-B\right) - \frac{A}{2\sqrt{2B}}\left(\frac{2\sum_{j} z_{j}a_{jk}}{a} - \frac{b_{i}}{b}\right) \ln\left(\frac{Z+2.414B}{Z-0.414B}\right) (3-34)$$

III.3.3. Calcul de l'enthalpie

On applique l'équation (3-18) dans la relation thermodynamique

$$H - H^* = RT(Z - 1) + \int_{\infty}^{v} \left[T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{v} - p \right] dv$$
(3-35)

pour calculer la déviation par rapport au gaz parfait, et on obtient l'équation suivante :

.

$$H - H^* = RT(Z - 1) + \frac{T\frac{da}{dT} - a}{2\sqrt{2b}} \ln\left(\frac{Z + 2.414B}{Z - 0.414B}\right)$$
(3-36)

où H^* est l'enthalpie du gaz parfait .

Concernant la précision et le domaine d'application de l'équation, pour une pression comprise entre 1 et 13 atm, et une température comprise entre 110 et 283 k, on a les coefficients d'erreurs suivante :

pour le CH_4 : moins de 0,6 % pour le C_2H_6 : moins de 0,4 % pour le C_3H_8 : moins de 0,5 % pour le N_2 : moins de 0,4 %

Il est à souligner que cette équation est très largement utilisée pour le calcul de procédés dans le domaine de l'industrie des hydrocarbures.

III.4. Equation de Clausius Clapeyron

Pour une substance pure, l'équation de Clapeyron est utilisée pour calculer la pression de saturation à partir de la température de saturation :

$$\frac{dp}{dT} = h_{fg}T^{-1}v_{fg} = \frac{s_{fg}}{v_{fg}}\frac{dp}{dT} = h_{fg}T^{-1}v_{fg} = \frac{s_{fg}}{v_{fg}}$$
(3-37)

en supposant que $v_g >> v_f$ et que la phase vapeur se comporte comme un gaz parfait,

$$\frac{dp_{sat}}{p_{sat}} = h_{fg}R^{-1}T^{-2}dT$$
(3-38)

où p_{sat} est la pression de saturation.

Cette approximation est tout-à-fait fausse lorsqu'on s'approche du point critique, mais elle demeure très acceptable au loin de ce point. Cela dit, en supposant un h_{fg} constant, en pratique la présente équation donne de bonnes variations de la pression de saturation et cela pour une large plage de pressions et de températures.

L'équation (3-38) devient

$$d(\ln p_{sat}) = -R^{-1}h_{fg}d(T^{-1})$$
(3-39)

A partir de données expérimentales et en appliquant l'équation précédente, l'expression suivante est obtenue :

$$\ln p_{sat} = \ln p_c \frac{\left(1 - \frac{T_b}{T}\right)}{\left(1 - \frac{T_b}{T_c}\right)}$$
(3-40)

qui est transformée comme suit :

$$\ln p_{sat} = I \left(1 - \frac{T_b}{T} \right) \tag{3-41}$$

où I et T_b sont des constantes déterminés expérimentalement.

On peut faire le calcul de la pression de saturation de l'azote, du méthane et des hydrocarbures léger (C_2H_6 , C_3H_8 ,...) avec une erreur comprise entre 1 et 2%, ce qui est très acceptable.

Nous disposons à présent de tous les outils nous permettant de mettre au point un modèle numérique pour simuler l'écoulement du GNL dans une ligne. Nous avons présenté dans ce chapitre les règles et les équations qu'on utilisera pour calculer la quantité de vapeur de GNL lors de l'écoulement et à la sortie de la ligne.

Dans le chapitre suivant on présentera les modèles choisis pour faire la simulation, nous expliquerons les choix ainsi que la démarche suivie pour arriver aux résultats.

Chapitre IV

Simulations numériques

IV.1. Simulations préparatoires

Avant d'entamer la modélisation de l'écoulement du GNL dans une ligne il fallait prendre connaissance du logiciel Fluent. Cela a été fait dans le chapitre deux, mais il fallait aussi se familiariser avec ce logiciel par des simulations d'écoulements plus simple, et s'assurer de son bon fonctionnement et de la précision des résultats qu'il donne. Cela a été fait en passant par les étapes suivantes :

- 1. simulations d'écoulements laminaires,
- 2. simulations d'écoulements turbulents,
- 3. simulation d'écoulements avec transfert de chaleur.

IV.1.1. Simulations d'écoulements laminaires

On se propose de simuler un écoulement laminaire unidimensionnel et permanent, dans une conduite lisse de 12m de longueur et d'un diamètre de D=2m. On fera une étude théorique afin de comparer les résultats obtenus sur Fluent.

Pour ce faire on a choisi d'étudier l'écoulement d'un fluide hypothétique qui a les caractéristiques suivantes :

- Viscosité dynamique $\mu = 0,1$
- Masse volumique $\rho = 1$

On a choisi un nombre de Reynolds $R_e = 50$, ce qui donne une vitesse d'entrée $V_e=2,5m/s$.

IV.1.1.1. Etude analytique

La longueur de développement de l'écoulement est donnée par la corrélation suivante, [4] :

$$\frac{l_e}{D} = 0.06R_e \tag{4-1}$$

où l_e est la longueur de développement.

AN: $l_e = 6 \text{ m}.$

L'équation de Navier Stokes s'écrit dans ce cas :

$$\frac{dP}{dx} = \mu \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{du}{dr} \right) = A \tag{4-2}$$

avec :

A : est une constante réelle,

r : coordonnée radiale,

P : pression,

u : vitesse axiale.

Ainsi :

•
$$u(r) = \frac{A}{4\mu}r^2 + B\ln r + c = u_{\max}\left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)$$
 (4-3)

• p(x) = Ax + c' (4-4)

où : u_{max} :vitesse axiale maximale, et c, B, A : des constantes.

Les conditions aux limites pour l'équation (4-3) sont :

- u(R) = 0
- $Q = 2.5\pi R^2$ tel que $Q = \int_s u(r) ds$.

avec : Q est le débit massique.

L'équation (4-3) devient :

$$u(r) = \frac{2V_e}{R^2} \left(R^2 - r^2 \right)$$
(4-5)

On voit bien que le profil des vitesses après développement de l'écoulement est parabolique.

Pour r = 0 $u(0) = u_{max} = 2V_e$ AN : $u_{max} = 5m/s$

Calcul du champ de pression

L'équation a pour condition à la limite : p(0) = 0, ce qui nous permet d'écrire : $p(x) = -\frac{8\mu}{R^2}V_e x$ (4-6) AN : p(x) = -2x (4-7)

IV.1.1.2. Simulation sur Fluent

Nous avons pour cela mis au point un même modèle bidimensionnel (conduite circulaire), représenté par un rectangle de 12m de long et de 1m de large. On n'a pris que la moitié du domaine et on introduit la condition à la limite qu'il faut, le problème étant axisymétrique.

Cette partie a aussi pour but de voir quelles sont les possibilités d'optimiser le maillage du domaine. Pour cela on utilise quatre maillages différents, toutefois les condition aux limites suivantes sont les même pour les quatre modèles :

- Vitesse d'entrée V_e= 2,5 m/s
- Ecoulement complètement développé à la sortie (dans Fluent outflow).

Pour le reste il suffit de définir la paroi et l'axe lors du maillage, bien sûr, on pose la • condition de non glissement à la paroi, et de symétrie par rapport à l'axe.

Tous les maillages utilisés sont structurés mais le nombre de mailles change d'un maillage à un autre : en premier lieu un maillage de 5x50, puis 10x100, 20x200, et enfin un maillage optimisé.

1. 5x50 mailles

Le maillage est constitué de manière à diviser toute la surface en 250 petits rectangles, 50 intervalles sur la longueur et 5 sur le rayon.



fig IV-1: maillage 5x50

2. 10x100 mailles

On procède de la même manière que dans le cas précédant pour avoir 1000 mailles.



fig IV-2 : maillage 10x100

3. 20x200 mailles

On procède de la même manière que précédemment mais pour avoir 4000 mailles,



fig IV-3 : maillage 20x200

4. maillage optimisé

Afin de réduire le temps de calcul lors de l'exécution, on réduit le nombre de mailles sans pour autant diminuer la précision. Pour ce faire on utilise un maillage uniforme sur les 6 premiers mètres puis un maillage en exponentiel sur le reste de la longueur.



fig IV-4 : maillage optimisé

Comme on le voit sur la figure, au delà de six mètres la largeur des intervalles suit une loi exponentielle.

- IV.1.1.3. Résultats et commentaires
- IV.1.1.3.1. Evolution de la vitesse axiale le long de la conduite



graphe IV-1 : distribution de la vitesse pour les modèles sur fluent

- Le modèle 5x50 donne des résultats au bout de 50 itérations mais ils sont un peu éloignés de ceux obtenus par le modèle analytique.
- Le modèle 10x100 donne de meilleurs résultats pour 120 itérations, mais ils ne sont toujours pas assez précis.
- Le modèle 20x200 donne de très bons résultats, mais il faut plus de 300 itérations pour que la solution converge.
- Le modèle à maillage optimisé donne des résultats tout aussi bons que le précédent, mais pour moins de 250 itérations.



graphe IV-2 : profils de vitesse à plusieurs sections

- Pour la première section à x=1m on voit très bien que l'écoulement n'est pas encore développé ; on remarque aussi que la courbe comprend une partie à l'allure droite.
- Pour x=4m, l'écoulement est presque développé, la courbe a une allure presque parabolique mais la vitesse maximum est encore un peu loin de $2V_e$.
- Pour x=6m, on peut voir que l'écoulement s'est développé, tel que la courbe a une allure parabolique avec une vitesse maximum proche de $2V_e$.

IV.1.1.3.2. Comparaison des résultats

Nous allons dans ce paragraphe comparer les résultats obtenus en utilisant le modèle à maillage optimisé avec les résultats analytiques.

• Vitesse axiale : pour la partie de l'écoulement complètement développé, les résultats obtenus sur fluent se rapprochent de ceux obtenus analytiquement.



graphe IV-3: profil de vitesse de l'écoulement développé



graphe IV-4: Profil de pression le long de la conduite

Le graphe IV-4 représente la variation de la pression en fonction de x pour le modèle à maillage optimisé. Dans la partie où l'écoulement est complètement développé on remarque que la courbe est une droite de pente $\frac{dp}{dx} = -2$, ce qui correspond très bien au résultat analytique donné plus haut.

IV.1.2. Simulations d'écoulements turbulents

On a choisi de simuler ici l'écoulement turbulent de la glycérine aux conditions normales dans une conduite lisse de diamètre D=1 m pour une longueur de l=60 m. On se donne les nombres de Reynolds suivants :

• $R_e=2\ 10^4$, • $R_e=6\ 10^4$. La glycérine a les propriétés suivantes : $\rho=1259,9\ kg/m^3$ $\mu=0,799$

I.2.1. Etude analytique, [3]

Dans le cas des écoulements turbulents il n'existe pas actuellement de solution analytique quoique certaines tentatives aient abouti à des équations semi empiriques, c'est pourquoi dans cette partie nous allons utiliser quelques corrélations déjà vérifiées par l'expérience comme base de comparaison afin de valider les modèles sur Fluent.

La corrélation suivante est utilisée pour le calcul de la longueur de développement :

$$\frac{l_e}{D} = 4.4 R_e^{\frac{1}{6}} \tag{4-8}$$

Le nombre de Reynolds est donné par :

$$R_e = \frac{\rho u_m D}{\mu} \tag{4-9}$$

avec u_m : vitesse axiale moyenne.

Ainsi la vitesse prend la valeur suivante :

$$u_m = R_e \frac{\mu}{\rho D} \tag{4-10}$$

La perte de charge est donnée par :

$$\frac{\Delta P}{l} = f \frac{\rho u_m^2}{2D} \tag{4-11}$$

où f est un coefficient donné par la charte de Moody (bien sûr, cette formule valable uniquement pour un écoulement développé).

Dans la zone où l'écoulement est parfaitement développé, le profil de vitesse est donné par :

$$\bar{u} = V_c \left(1 - \frac{r}{R} \right)^{\frac{1}{n}}$$
(4-12)

avec :

 V_c : vitesse à l'axe.

 \bar{u} : vitesse moyenne dans le temps.

R : rayon de la conduite.

n : indice caractéristique de l'écoulement.

Les résultats pour chaque nombre sont donnés dans le tableau suivant :

	$R_e = 2 \ 10^4$	$R_e = 6 \ 10^4$
Vitesse moyenne (m/s)	12,6835	38,0506
Longueur de développement (m)	22,92	27,53
Indice n	5,6	6,7
Indice f	0,025	0,02
Perte de charge par unité de longueur	2533,52	18241,41

tableau IV-1: caractéristique de l'écoulement pour les deux valeurs du nombre de Reynolds

IV.1.2.2. Modèles sur Fluent

Pour simuler l'écoulement nous avons choisi deux maillages différents, un maillage régulier de 12 000 mailles et un autre optimisé. Nous avons choisi pour cette modélisation, le modèle de turbulence K-ε, avec les paramètres par défaut, donné par le logiciel. Ces derniers donnent de bons résultats pour une importante plage du nombre de Reynolds.

IV.1.2.2.1. Modèle à maillage régulier

Ce modèle est a maillage régulier avec 1200 intervalles sur la longueur pour 10 sur la largeur ce qui fait des intervalles de longueur de 5 cm. Ce modèle représente la moitié du domaine, le reste étant obtenu par symétrie.

La convergence est atteinte au bout de 650 itérations pour un temps d'environs 2mn.

IV.1.2.2.2. Modèle à maillage optimisé

Afin d'obtenir des résultats plus précis, il nous faut augmenter le nombre de mailles mais, pour ne pas le faire au détriment du temps de calcul nous n'allons pas l'augmenter de façon régulière. On divise le diamètre en 20 intervalles, très fins près de la paroi et de plus en plus large au fur et à mesure qu'on s'en éloigne, au total nous avons 24000 mailles. On obtient ainsi une convergence pour moins de 800 itérations avec un résidu de l'ordre de 10⁻⁸.

IV.1.2.2.3. Résultats et discussion

• Pour $R_e = 2 \ 10^4$



graphe IV-5: variation de la vitesse axiale le long de la conduite.

Bien que l'allure soit la même pour les deux graphes, on remarque une légère différence, mais on peut dire que le graphe du modèle à maillage optimisé donne un meilleur résultats car il prévoit une longueur de développement en très bon accord avec le résultat de la formule empirique qui est de 22,9m.



graphe IV-6: profil de vitesse pour une section située à 50m de l'entrée

Ce graphe montre le profil de vitesse pour une section qui se trouve à 50 m de l'entrée donc l'écoulement est complètement développé. Comme on peut s'y attendre le profil est plat. On remarque que pour le modèle à maillage optimisé le profil est plus lisse car il y a plus de point dans la zone où la vitesse évolue rapidement. Les valeurs sont très proches de celle donnée par la formule empirique. Toutefois il y'a une certaine différence au-delà ; cela est peut être du à la lecture de l'indice n.



graphe IV-7: variation de la pression le long de la conduite.

On peut remarquer que la pente du graphe du modèle raffiné est légèrement inférieure. Les pertes de charge sont surévaluées avec le modèle à maillage régulier : on peut lire une pente de 2600 pa/m. • Pour $R_e = 6 \ 10^4$



graphe IV-8: vitesse axiale le long de la conduite

Comme dans le cas précédant le modèle à maillage optimisé prévoit une longueur de développement qui est plus proche de la valeur obtenue avec la formule empirique.



graphe IV-9: profil de vitesse pour une section a x=50m

Le profil est bien plat, caractéristique des écoulements turbulents. Le profil du modèle à maillage raffiné et celui de la formule empirique se superpose auprès de la paroi mais on remarque un décalage au-delà ; cela est peut-être dû à l'inexactitude de la lecture de l'indice n.



graphe IV-10: variation de la pression le long de la conduite.

Les deux profils se rapprochent, quoiqu'on puisse voir que pour le modèle à maillage régulier les pertes de charge sont toujours surévaluées. Pour le modèle à maillage optimisé, on obtient une pente de 18200 Pa/m, ce qui correspond assez bien au résultat de la formule empirique.

IV.1.3. Simulations d'écoulements avec transfert de chaleur

On se donne dans ce cas deux types d'écoulement et pour chaque type deux conditions différentes à la paroi.

- 1. un écoulement laminaire ($R_e = 100$), avec un flux de chaleur constant q=70w/m²,
- 2. un écoulement laminaire ($R_e = 100$), avec une température constante à la paroi de la conduite $T_s=360$ K,
- 3. un écoulement turbulent ($R_e=6\ 10^4$), avec un flux de chaleur constant q=15000 w/m²,
- 4. un écoulement turbulent ($R_e=6\ 10^4$), avec une température de paroi constante $T_s=360$ K.

Le modèle utilisé est une conduite de diamètre D=1m et de longueur L=60m, le fluide utilisé est de l'eau dont on prendra les propriétés suivantes, qu'on considère constantes :

- $\rho = 998,2 \text{ kg/m}^3$,
- $\mu = 0,001003 \text{ kg/ms},$
- k= 0,6 w/mk, conductivité thermique,
- cp= 4182 J/kgk, chaleur spécifique à pression constante,
- P_r=7 Nombre de Prandtl.

IV.1.3.1. Etude analytique, [2]

Dans cette partie nous allons développer les équations régissant le transfert de chaleur dans une conduite, dans le but de calculer les variations de la température moyenne le long de la conduite. Et dans le cas de l'écoulement laminaire avec un flux de chaleur constant, on calculera le profil de la température à une distance de 50m de l'entrée.

IV.1.3.1.1. Ecoulements laminaires

Pour un écoulement laminaire avec un flux de chaleur constant, la température moyenne à une distance x de l'entrée est donnée par, [4] :

$$T_m = T_i + 2\pi R q x \tag{4-13}$$

où :

 T_m : température moyenne à x,

T_i : température d'entrée du fluide.

L'équation donnant le profil de température pour l'écoulement laminaire développé s'écrit comme suit :

$$T(r) = T_{s} - \frac{2u_{m}R^{2}}{\alpha} \left(\frac{dT_{m}}{dx}\right) \left[\frac{3}{16} + \frac{1}{16} \left(\frac{r}{R}\right)^{4} - \frac{1}{4} \left(\frac{r}{R}\right)^{2}\right]$$
(4-14)

où α est la diffusivité thermique.

Pour l'écoulement laminaire avec une température de paroi constante on donne l'équation suivante (toujours dans la zone où l'écoulement est complètement développé) :

$$T_m = T_s - (T_s - T_i) \exp\left(-\frac{3.66 \, k \cdot P \cdot x}{Q \cdot cp}\right) \tag{4-15}$$

où : $P = 2\pi R$

IV.1.3.1.2. Ecoulements turbulents

Pour un écoulement turbulent avec un flux constant, l'équation donnant la température moyenne est la même que pour le cas d'un écoulement laminaire.

Pour le cas d'une paroi à température constante la variation de la température moyenne (dans la zone où l'écoulement est complètement développé) est donné par :

$$T_m = T_s - (T_s - T_i) \exp\left(-\frac{Px}{m c p}\bar{h}\right)$$
(4-16)

avec $\bar{h} = \frac{kN_u}{2R}$ où N_u est le nombre de Nusselt qui est dans ce cas donné par : $N_u = 0.023 R_e^{4/5} P_r^{0.4}$ (4-17)

IV.1.3.2. Modèles sur Fluent

Pour simuler l'écoulement nous avons choisi un modèle comportant un maillage structuré de 24 000 mailles mais aussi un maillage, dont les mailles proche de la paroi sont plus fines. Pour que la simulation des transfert de chaleur puisse avoir lieu il faut activer l'équation d'énergie.

NB : La variation de la température moyenne le long de la conduite a été calculée a partir des résultats fournis par Fluent à l'aide de programmes écris sur fortran.

IV.1.3.2.1. Ecoulement laminaire avec flux de chaleur constant

Le graphe suivant donne la variation de la température le long de la conduite.



graphe IV-11: variation de la température pour un flux de chaleur constant dans un écoulement laminaire

Le résultat est en très bon accord avec les attentes et le graphe est bien une droite dont la pente est égale à $2\pi Rq$.

On a choisi une section à 50m de l'entrée de la conduite (écoulement parfaitement développé), pour voir le profil de la température.



graphe IV-12: profil de température pour une section à 50m

Les deux graphes se superposent presque parfaitement, ce qui confirme que les résultats répondent bien aux attentes.





graphe IV-13: variation de la température le long de la conduite pour un écoulement laminaire avec une température de paroi constante

On remarque que les deux graphes se rejoignent et que l'écart commence à s'affaiblir considérablement au delà de 40m avec une erreur de moins de 2%. Cette longueur correspond à la longueur de développement. Mais on remarque aussi que la variation est plus importante à l'entrée d'après le modèle sur Fluent, ce qui est vrai car le gradient de température étant plus grand à l'entrée le flux de chaleur l'est aussi.

I.3.2.3. Ecoulement turbulent avec un flux de chaleur constant



graphe IV-14: variation de la température le long de la conduite pour un écoulement turbulent avec un flux de chaleur constant

Les deux graphes sont des droites qui se rapprochent beaucoup, avec une erreur très inférieure à 1%, dont la pente est égale à $2\pi Rq^{\text{W}}$. On remarque sur le graphe du modèle Fluent une non linéarité à l'entrée, due à une imperfection dans le calcul de la température moyenne.



IV.1.3.2.3. Ecoulement turbulent avec température de paroi constante



Les deux graphes se rapprochent avec une erreur inférieure à 1%. On remarque aussi une très rapide augmentation de la température dans le cas du modèle Fluent, cette élévation est très réaliste car le gradient de température entre le fluide et la paroi est plus important à l'entrée.

En conclusion ces exercices nous ont permis non seulement de nous familiariser avec le Fluent mais aussi de prendre conscience de l'importance du choix d'un bon maillage dans l'exécution de la simulation et de son impact sur les résultats, ils nous permettent enfin d'estimer la fiabilité du logiciel.

IV.2. Simulation du boil-off dans une ligne

On doit d'abord définir les différents paramètres de cet écoulement :

- 1. dimensions de la ligne,
- 2. débit d'écoulement du GNL,
- 3. mécanismes de transfert de chaleur,
- 4. composition du GNL et définition de ses propriétés,
- 5. conditions à l'entrée et à la sortie,
- 6. mécanismes de transfert de masse.

IV.2.1. Dimensions de la ligne

Les dimensions de la ligne ont été choisis de façon à approcher les dimensions d'une ligne réelle, par hypothése on prendra :

- \blacktriangleright diametre D = 50cm = 0,5m,
- > longueur l = 100m.



fig IV-5 : dimensions de la ligne de GNL

On réalise sur Gambit un modèle rectangulaire de 100m de long et de 0,25m de large ce qui représente la moitié du domaine, car on suppose aussi que le problème est axisymétrique, cela rendra plus rapide l'exécution.



fig IV-6 : Tronçon du modèle dessiné sur Gambit

IV.2.2. Débit d'écoulement du GNL

Le débit d'écoulement du GNL est calculé à partir de la production annuelle de l'usine de production de Skikda, en supposant un temps d'arrêt d'un mois pour chaque train de production.

- La production annuelle est de 17.5 Millions m³/an de liquide,
- L'usine comprend 6 trains de production,
- On suppose un mois d'arrêt par an pour chaque train.

Ainsi le débit d'écoulement par seconde devient de 46.33 kg/s.

IV.2.3. Les mécanismes de transfert de chaleur

Trois mécanismes interviennent dans ce problème :

- transfert de chaleur par convection, qui intervient à l'extérieur de la ligne (entre la paroi de la ligne et l'air l'entourant), mais aussi à l'intérieur de la ligne (entre la paroi et le fluide en écoulement);
- un transfert de chaleur par conduction entre la surface extérieure et intérieure de la paroi de la ligne ;
- un transfert par rayonnement, les rayons du soleil qui frappent la surface de la paroi la chauffant ainsi ;

Il aurait été intéressant de pouvoir faire une simulation complète en prenant en compte les trois mécanismes de transfert de chaleur, mais, ne disposant pas de données suffisantes concernant les lignes (épaisseur de la paroi, les isolant utilisé) cela reste impossible. On approchera donc ces mécanismes en supposant un flux de chaleur constant le long de la paroi qu'on fera varier.

IV.2.4. Composition du GNL et définition de ses propriétés

Pour faire cette simulation on se donne la composition (composition molaire) du GNL produit à Skikda :

- 91.5% de méthane (CH₄),
- 5.64% d'Ethane (C₂H₆),
- 1.5% de propane (C₃H₈),
- 0.25% de n-C₄H₁₀,
- 0.25% de i-C₄H₁₀,
- 0.85% d'azote (N₂),
- 0.01 de $n-C_5H_{10}$.

De cette composition on ne prendra en considération que quatre composants pour donner la composition suivante :

- 91.5% de méthane (CH₄),
- 5.64% d'Ethane (C_2H_6),
- 2.01% de propane (C₃H₈),
- 0.85% d'azote (N₂).

Comme on peut le remarquer, afin de satisfaire la condition $\sum z_i = 1$, on a rajouté la différence à la fraction du propane. Les fractions massiques deviennent :

- 83.88% de méthane (CH₄),
- 9.69% d'Ethane (C₂H₆),
- 5.065% de propane (C₃H₈),
- 1.361% d'azote (N₂).

	CH ₄	C ₂ H ₆	C_3H_8	N ₂	GNL
ρ (kg/m ³)	422.62	620	755	612.1	461.143
Cp (J/kgK)	3495	2300	1950	2782	3291
μ (kg/ms)	102.5 10 ⁻⁶	700 10 ⁻⁶	2300 10 ⁻⁶	51.01 10 ⁻⁶	270.9983 10 ⁻⁶
λ (w/mK)	0.206	0.55	0.25	0.0775	0.2398

Une fois la composition déterminée on peut ainsi calculer les propriétés du gaz naturel, à l'état liquide et vapeur, à une température T=111K,

tableau IV-2: propriétés du gaz naturel à l'état liquide à 111K, 1atm

	CH ₄	C ₂ H ₆	C_3H_8	N ₂	GN
ρ (kg/m ³)	1.823	3.7123	5.9591	3.078	2.23269
Cp (J/kgK)	1950	1250	920	980	1816.7
μ (kg/ms)	4.26 10 ⁻⁶	3 10 ⁻⁶	2.9 10 ⁻⁶	13 10 ⁻⁶	270.9983 10 ⁻⁶
λ (w/mK)	12.6266 10 ⁻³	6 10 ⁻³	3.9 10 ⁻³	10.75 10 ⁻³	10.75 10 ⁻³

tableau IV-3: propriétés du gaz naturel à l'état vapeur saturée à 111K, 1atm

	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	N_2	GN
Δh^{σ} (J/mole)	8165	14690	18800	5543	8724.5
Δh_f (J/moles)	-74850	-83850	-104680	0	-75320.9
Masse molaire (g/mole)	16.043	30.070	44.097	28.013	17.5

tableau IV-4: autres propriétés du gaz naturel

avec :

 Δh_f : enthalpie de formation,

 Δh^{σ} : enthalpie de vaporisation.

IV.2.5. les conditions à l'entrée et à la sortie

On suppose une température d'entrée de 111K, c'est ce qui a été dit lors de la présentation des cycles de production de GNL dans le chapitre I. La température de la sortie va dépendre des conditions de l'écoulement (transfert de chaleur et perte de charge), elle sera calculée en conséquence.

Dans ce problème on ne connaît que la pression de sortie qu'on supposera égale à la pression atmosphérique. La pression d'entrée, comme la température de sortie, dépend des conditions d'écoulement.

IV.2.6. Les mécanismes de transfert de masse

Le transfert de masse entres les deux phases (liquide et vapeur) se fait par évaporation. Cette évaporation est due au transfert de chaleur, donc à l'augmentation de l'enthalpie, mais aussi aux pertes de charge qui font que l'énergie cinétique se dégrade en une énergie thermique. Pour faire ce calcul sur Fluent, qui n'est pas conçu pour cela, on devra donc écrire un UDF (un programme) sur Visual C++ qu'on chargera sur le logiciel. Ce programme repose sur l'équation de Clapeyron, mais, afin de corriger les résultats à la sortie de la ligne, on utilisera aussi un autre programme fait sur Matlab 6.5 qui repose sur l'équation d'état de Peng et Robinson.

Le choix de l'équation de Clapeyron pour l'UDF au lieu de l'équation de Peng et Robinson est justifié par le fait que cette dernière demande un temps de résolution plus long.

IV.2.6.1. Programme par l'équation de Clapeyron

Même si Fluent ne calcule pas par lui-même le débit d'évaporation, il nous permet de charger un UDF pour faire le calcul de ce débit. Cette UDF est chargé à partir de la fenêtre dans laquelle on définit les interactions entre les phases en écoulement.

Il utilise l'équation de Clapeyron pour définir les pressions de saturation pour chaque température à laquelle se trouve le fluide en écoulement. On utilise ensuite la règle de Raoult pour définir l'équilibre et calculer la fraction de vapeur produite. Les constantes I et T_b sont donnés dans le tableau suivant.

	Ι	T _b
Méthane (CH ₄)	7.2739	-64.84
Ethane (C_2H_6)	6.3711	-130.68
Propane (C ₃ H ₈)	6.8131	-130.28
Azote (N ₂)	8.1342	-16.36

tableau IV-5: les constantes de l'équation de Clapeyron pour chaque composant

IV.2.6.1.1. Algorithme de l'UDF

Le principe de ce programme est que lorsque le Fluent fait le calcul sur une maille, l'UDF va calculer la fraction de vapeur pour cette maille d'après les données fournies par Fluent, et faire aussi le même calcul pour la maille qui la précède. Avec la différence des deux fractions, on pourra alors calculer le débit d'évaporation.

On notera dans ce qui suit la maille sur laquelle se fait le calcul par Fluent (maille 2), et la précédente (maille 1).

Etape 1 : lecture des données

- Lecture de la température de la maille 2.
- Lecture de la pression de la maille 2.
- Lecture du gradient de température.
- Lecture du gradient de pression.
- Lecture du volume de liquide noté V_l .
- Lecture du volume de vapeur noté V_g .
- Lecture de la masse volumique du liquide noté ρ_l .
- Lecture de la masse volumique de la vapeur noté ρ_g .

Etape 2 : calcul de la température et de la pression de la maille 1 par les formules suivantes

$$T_1 = T_2 - \Delta x \frac{\partial T}{\partial x} \tag{4-17}$$

tel que :

 T_1 : température de la maille 1,

 $\frac{\partial T}{\partial x}$: gradient de température,

 T_2 : température de la maille 2,

 Δx : distance entre le centre des deux mailles.

$$p_1 = p_2 - \Delta x \frac{\partial p}{\partial x} \tag{4-18}$$

tel que :

 p_1 : pression de la maille 1, p_2 : pression de la maille 2, $\frac{\partial p}{\partial x}$: gradient de pression.

<u>Etape 3</u> : calcul des pressions de saturation de chaque composant pour la maille 1 par la formule suivante

$$p_{sat}(i) = \exp\left[I(i)\left(1 - \frac{T_b(i)}{T}\right)\right]$$
(4-19)

tel que :

 $p_{sat}(i)$: pression de saturation du composant i, T: température, $I(i), T_b(i)$: constantes de l'équation de Clapeyron pour le composant i.

Etape 4 : calcul des cœfficients d'équilibre de chaque composant pour la maille 1

$$k(i) = \frac{p_{sat}(i)}{p} \tag{4-20}$$

tel que :

k(i) : cœfficient d'équilibre du composant i,

p : pression.

<u>Etape 5</u> : résolution de l'équation donnant la fraction molaire de la vapeur α ,

$$1 = \sum_{i=1}^{3} \frac{z(i)}{1 - \alpha(1 - k(i))} + \frac{1 - \sum_{i=1}^{3} z(i)}{1 - \alpha(1 - k(4))}$$
(4-21)

La résolution se fait par la méthode du point fixe.

Etape 6 : c'est la même que l'étape 3 mais pour la maille 2 ; calcul des pressions de saturation en utilisant la même équation, équation (4-19).

Etape 7 : calcul des coefficients d'équilibre pour chaque composant, par l'équation (4-20).

Etape 8 : résolution de l'équation (4-21), pour obtenir la fraction molaire de la vapeur dans ce cas.

Etape 9 : calcul du débit d'évaporation

$$m = \alpha \left(\rho_l V_l + \rho_g V_g \right) \tag{4-22}$$

Dans l'équation (4-22) on fait l'approximation selon laquelle la masse molaire du GNL liquide est égale à celle de la vapeur de GNL.

、

Dans l'étape 8 et 5 l'équation (4-21) n'est pas utilisée dans sa forme brute mais elle est développée pour donner,

$$\alpha = c_1 \alpha^3 - c_2 \alpha^2 + c_3 \alpha + c_4 \tag{4-23}$$

avec :

$$\begin{split} c_1 &= \prod_{i=1}^4 (1-k(i)) \\ c_2 &= (1-k(3))(1-k(2))(1-k(4))(1-z(1)) + (1-k(1))(1-k(3))(1-k(4))(1-z(2)) \\ &+ (1-k(1))(1-k(2))(1-k(4))(1-z(3)) + (1-k(1))(1-k(3))(1-k(4))(1-z(4)) \\ c_3 &= (1-k(1))(1-k(2))(z(1)+z(2)) + (1-k(1))(1-k(3))(z(1)+z(3)) + (1-k(1))(1-k(4))(z(1)+z(4)) \\ &+ (1-k(2))(1-k(3))(z(2)+z(3)) + (1-k(2))(1-k(4))(z(2)+z(4)) + (1-k(3))(1-k(4))(z(4)+z(3)) \\ c_4 &= (1-k(1))z(1) + (1-k(2))z(2) + (1-k(3))z(3) + (1-k(4))z(4) \end{split}$$

IV.2.6.1. Compilation et exécution de l'UDF

Avant d'être chargé dans Fluent, le programme a été testé sur Matlab 6.5 où on a noté sa bonne marche. Après avoir été chargé et compilé avec succès sur Fluent, lors de l'exécution on reçoit un code erreur, on note aussi l'arrêt de l'exécution et du calcul. Le code erreur nous demande de nous référer au service technique de Fluent, ce qui n'est pas possible car les simulations ont été faites à l'EMP.

Après vérification on note que toutes les procédures et notations ont bien été respectées. Et on découvre que ce qui cause problème, c'est que l'on fasse appel au gradient de température. Deux causes peuvent être à l'origine de ce problème,

- 1. la version du logiciel en notre possession ne dispose pas des fichiers lui permettant de faire appel aux variables comme les gradients de pression ;
- 2. lors de l'exécution le Fluent n'enregistre pas les variables auxquelles on fait appel dans le programme UDF.

Face à cette situation on a décidé de modifier le programme sur Matlab pour le calcul du boil-off produit à la sortie de la ligne on procédera comme suit :

- 1. on fera le calcul pour différentes valeurs du flux de chaleur (de 1à1000 w),
- 2. avec les valeurs des quantités de vapeur obtenues on fera des simulations sur Fluent en supposant cette fois une évaporation constante le long de la ligne ce qui nous est possible, afin de corriger la différence de pression entre l'entrée et la sortie ;
- 3. avec les valeurs des pressions d'entrée obtenues sur Fluent, on recalcule les valeurs d'évaporation pour chaque valeur du flux de chaleur.

IV.2.7. Calcul du boil-off par l'équation de Peng et Robinson

Le principe du programme est le suivant :

- 1. on calcule l'enthalpie à l'entrée du tube en supposant la pression connue ; la température est prise égale à 111 K, et on dira qu'à l'entrée le GNL est à état 1,
- 2. on définit l'état 2 (à la sortie de la ligne) par les deux variables, la pression et l'enthalpie, et on cherchera à partir de cela la température et la fraction de vapeur.



fig IV-7 : schéma physique d'une ligne de GNL

Le transfert de chaleur ne peut se faire que dans un seul sens, de l'extérieur vers l'intérieur de la ligne, la température à l'intérieur étant toujours inférieure à celle de l'extérieur, cela veut dire que toute l'énergie thermique qui est reçue par le GNL est conservée. D'un autre coté l'énergie due à la différence de pression entre l'entrée et la sortie se dégrade en énergie thermique.

Cela nous permet de dire que la différence d'enthalpie entre l'entrée et la sortie de la ligne de transfert est égale à la celle due au transfert de chaleur.

IV.2.7.1. Algorithme

<u>Etape 1</u> : calcul des paramètres de l'équation de Peng Robinson au point critique pour chaque composant,

$$a_i(T_c) = 0.45724 \frac{R^2 T_c^2}{p_c}$$
(4-24)

$$b_i(T_c) = 0.07780 \frac{RT_c}{p_c}$$
 (4-25)

tel que :

 $a_i(T_c), b_i(T_c)$: paramètres de l'équation de Peng Robinson du composant *i* au point critique.

Etape 2 : calcul des paramètres de l'équation pour chaque composant à l'état 1,

$$a_i(T_1) = a_i(T_c) \cdot \alpha_i(T_{ri1}, \omega_i)$$

$$b_i(T_1) = b_i(T_c)$$
(4-26)
(4-27)

tel que :

 $a_i(T_1), b_i(T_1)$: paramètres de l'équation du composant *i* à l'état 1,

 T_1 : température à l'état 1,

 T_{ri1} : température réduite du composant *i* à l'état 1, $T_{ri1} = \frac{T_{i1}}{T_{ri1}}$

 ω_i : facteur acentrique du composant *i*,

et
$$\alpha(T_{ri1},\omega) = \left[1 + \beta_i \left(1 - \left(\frac{T_{ci}}{T_1}\right)^{\frac{1}{2}}\right)\right]^2$$
(4-28)

où
$$\beta_i = 0.37464 + 1.54226\omega_i - 0.26992\omega_i^2$$
 (4-29)

Etape 3 : calcul des paramètres de l'équation pour le GNL à l'état 1 en utilisant les équations (3-29) et (3-30),

$$a(T_1) = \sum_i \sum_j z_i z_j a_{ij}(T_1)$$
$$b(T_1) = \sum_i z_i b_i(T_1)$$

avec :

$$\begin{cases} a_{ij}(T_1) = (1 - \delta_{ij}) a_i^{1/2}(T_1) \cdot a_j^{1/2}(T_1) \\ avec \\ \delta_{ij} = 0 \text{ pour } i = j \end{cases}$$

Etape 4 : calcul de A et B paramètres de l'équation (3-19),

$$A = \frac{a(T_1)p_1}{R^2 T_1^2}$$
(4-30)

$$B = \frac{a(T_1) p_1}{RT_1}$$
(4-31)

$$Z = \frac{p_1 v}{RT_1} \tag{4-32}$$

Etape 5 : résolution de l'équation donnant le facteur de compressibilité (équation (3-19)),

$$Z^{3} - (1-B)Z^{2} + (A - 3B^{2} - 2B)Z - (AB - B^{2} - B^{3}) = 0$$

La résolution se fait par la méthode du point fixe pour une erreur de 10^{-10} . On obtient trois valeurs; la plus grande correspond à celle de la phase vapeur notée Z_g et la plus petite à celle du liquide notée Z_l , la valeur intermédiaire est rejetée car elle n'a pas de sens physique dans notre cas.

<u>Etape 6</u> : calcul des coefficients de fugacité pour chaque composant. On utilise l'équation (3-34) qui devient

pour la phase liquide :

$$\frac{\varphi_{il}}{x_i} = p_1 \exp\left(\frac{b_i}{b}(Z_l - 1) - \ln(Z_l - B) - \frac{A}{2\sqrt{2B}}\left(\frac{2\sum_j z(j)a_{jk}(T_1)}{a} - \frac{b_i}{b}\right) \ln\left(\frac{Z_l + 2.414B}{Z_l - 0.414B}\right)\right) (4-33)$$

pour la phase vapeur :

$$\frac{\varphi_{ig}}{y_i} = p_1 \exp\left(\frac{b_i}{b} \left(Z_g - 1\right) - \ln\left(Z_g - B\right) - \frac{A}{2\sqrt{2B}} \left(\frac{2\sum_j z(j)a_{jk}(T_1)}{a} - \frac{b_i}{b}\right) \ln\left(\frac{Z_g + 2.414B}{Z_g - 0.414B}\right)\right) (4-34)$$

tel que φ_{il} , φ_{ig} sont respectivement le coefficient de fugacité du composant i dans la phase liquide et le coefficient de fugacité du composant i dans la phase vapeur.

Etape 7 : calcul des coefficients d'équilibre pour chaque composant à l'état 1,

$$k(i) = \sqrt{\frac{\begin{pmatrix} \varphi_{il} \\ x_i \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} \varphi_{ig} \\ y_i \end{pmatrix}}}$$
(4-35)

<u>Etape 8</u> : résolution de l'équation (4-23) (équation donnant la fraction molaire de vapeur). La résolution se fait toujours par la méthode du point fixe pour une erreur de 10^{-10} .

Etape 9 : calcul de l'enthalpie à l'état 1

$$H_1 = H_{1l} + H_{1g} \tag{4-36}$$

tel que :

$$H_{1l} = (1-x) \left(RT_1(Z_l - 1) + \frac{T \frac{da}{dT} \Big|_{T=T_1} - a(T_1)}{2\sqrt{2b(T_1)}} \ln\left(\frac{Z_l + 2.414B}{Z_l - 0.414B}\right) \right)$$
(4-37)

$$H_{1g} = x \left(RT_1 \left(Z_g - 1 \right) + \frac{T \frac{da}{dT} \Big|_{T=T_1} - a(T_1)}{2\sqrt{2b(T_1)}} \ln \left(\frac{Z_g + 2.414B}{Z_g - 0.414B} \right) \right)$$
(4-38)

<u>Etape 10</u> : initialisation de la valeur de la température de l'état 2, on prend comme valeur initiale celle qui vérifie l'équation suivante

$$T_2 = \frac{1}{2} \left(T_3 + T_4 \right) \tag{4-39}$$

où :
$$T_4 = T_1 + \frac{\Delta H}{cp}$$
 (4-40)

et $T_3 = T_1 - 1$

telle que le cp ici est celui du GNL,

et ΔH : différence d'enthalpie molaire entre l'entrée et la sortie.

$$\Delta H = \frac{qS}{Q}M\tag{4-41}$$

avec :

M : masse molaire en (kg/moles),

S : section de la ligne en m²,

q: flux de chaleur en w/m².

Etape 11 : calcul des paramètres de l'équation pour chaque composant à l'état 2,

$$a_i(T_2) = a_i(T_c) \cdot \alpha_i(T_{ri2}, \omega_i)$$

$$b_i(T_2) = b_i(T_c)$$
(4-42)
(4-43)

tel que :

 $a_i(T_2), b_i(T_2)$: paramètres de l'équation du composant i à l'état 2,

 T_2 : température à l'état 2,

 T_{ri2} : température réduite du composant i à l'état 2,

et
$$\alpha(T_{ri2},\omega) = \left[1 + \beta_i \left(1 - \left(\frac{T_{ci}}{T_2}\right)^{\frac{1}{2}}\right)\right]^2$$
 (4-44)

où
$$\beta_i = 0.37464 + 1.54226\omega_i - 0.26992\omega_i^2$$
 (4-45)

Etape 12 : calcul des paramètres de l'équation pour le GNL à l'état 2 en utilisant les équations (3-29) et (3-30),

$$a(T_2) = \sum_{i} \sum_{j} z_i z_j a_{ij}(T_2)$$
(4-46)

$$b(T_2) = \sum_{i} z_i b_i(T_2)$$
(4-47)

avec :

$$\begin{cases} a_{ij}(T_2) = (1 - \delta_{ij}) a_i^{1/2}(T_2) \cdot a_j^{1/2}(T_2) \\ avec \\ \delta_{ij} = 0 \text{ pour } i = j \end{cases}$$

Etape 13 : calcul de A et B paramètres de l'équation (3-19),

$$A = \frac{a(T_2)p_2}{R^2 T_2^2}$$
(4-48)

$$B = \frac{a(T_2) p_2}{RT_2}$$
(4-49)

$$Z = \frac{p_2 v}{RT_2} \tag{4-50}$$

Etape 14 : résolution de l'équation donnant le facteur de compressibilité (équation (3-19)),

$$Z^{3} - (1-B)Z^{2} + (A - 3B^{2} - 2B)Z - (AB - B^{2} - B^{3}) = 0$$

La résolution se fait par la méthode du point fixe pour un erreur de 10^{-10} . On obtient trois valeurs la plus grande correspond à celle de la phase vapeur notée Z_g et la plus petite à celle du liquide notée Z_l la valeur intermédiaire est rejetée.

Etape 15 : calcul des coefficients de fugacité pour chaque composant. On utilise l'équation (3-34) qui devient

pour la phase liquide :

$$\frac{\varphi_{il}}{x_i} = p_2 \exp\left(\frac{b_i}{b}(Z_l - 1) - \ln(Z_l - B) - \frac{A}{2\sqrt{2B}}\left(\frac{2\sum_j z(j)a_{jk}(T_2)}{a} - \frac{b_i}{b}\right) \ln\left(\frac{Z_l + 2.414B}{Z_l - 0.414B}\right)\right) \quad (4-51)$$

pour la phase vapeur :

$$\frac{\varphi_{ig}}{y_i} = p_2 \exp\left(\frac{b_i}{b} (Z_g - 1) - \ln(Z_g - B) - \frac{A}{2\sqrt{2B}} \left(\frac{2\sum_j z(j)a_{jk}(T_2)}{a} - \frac{b_i}{b}\right) \ln\left(\frac{Z_g + 2.414B}{Z_g - 0.414B}\right)\right) \quad (4-52)$$

telles que φ_{il} , φ_{ig} sont respectivement le coefficient de fugacité du composant *i* dans la phase liquide et le coefficient de fugacité du composant i dans la phase vapeur.

Etape 16 : calcul des coefficients d'équilibre pour chaque composant à l'état 2,

$$k(i) = \sqrt{\frac{\begin{pmatrix} \varphi_{il} \\ x_i \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} \varphi_{ig} \\ y_i \end{pmatrix}}}$$
(4-53)

<u>Etape 17</u> : résolution de l'équation (4-23) (équation donnant la fraction molaire de vapeur). La résolution se fait toujours par la méthode du point fixe pour une erreur de 10^{-10} .

Etape 18 : calcul de l'enthalpie à l'état 2

.

$$H_2 = H_{2l} + H_{2g} \tag{4-54}$$

tel que :

$$H_{1l} = (1-x) \left(RT_2 \left(Z_l - 1 \right) + \frac{T \frac{da}{dT} \Big|_{T=T_2} - a(T_2)}{2\sqrt{2b(T_2)}} \ln \left(\frac{Z_l + 2.414B}{Z_l - 0.414B} \right) \right)$$
(4-55)

et

$$H_{2g} = x \left(RT_2 \left(Z_g - 1 \right) + \frac{T \frac{da}{dT} \Big|_{T=T_2} - a(T_2)}{2\sqrt{2b(T_2)}} \ln \left(\frac{Z_g + 2.414B}{Z_g - 0.414B} \right) \right)$$
(4-56)

avec

$$\frac{da}{dT} = \sum_{i=1}^{4} \sum_{j=1}^{4} z_i^2 T_{ci} \left(1 + \beta_i \left(1 - \frac{1}{2\sqrt{T/T_{ci}}} \right) \right) + \lambda_1 \sqrt{T_{ci} \frac{T_{cj}}{\lambda_2}}$$
(4-57)

où :

$$\lambda_{1} = \left(1 + \beta_{i}\left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_{ci}}}\right)\right) \left(1 + \beta_{j}\left(1 - \frac{1}{2\sqrt{T/T_{cj}}}\right)\right) + \left(1 + \beta_{j}\left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_{cj}}}\right)\right) \left(1 + \beta_{j}\left(1 - \frac{1}{2\sqrt{T/T_{ci}}}\right)\right)$$

et

$$\lambda_2 = \left(1 + \beta_i \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_{ci}}}\right)\right) \left(1 + \beta_j \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_{cj}}}\right)\right)$$

<u>Etape 19</u>: attribution d'une nouvelle valeur à T_2 , T_3 , T_4 .

soit:
$$er = (H_2 - H_1) - \Delta H$$
 (4-58)

si er < 0 : $T_3 = T_2$

si non : $T_4 = T_2$

et
$$T_2 = \frac{1}{2} (T_3 + T_4)$$

On reprendra les étapes 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18 et 19 jusqu'à ce que la condition $\Delta H - (H_2 - H_1) \le 10^{-4}$ soit vérifiée.

Tous les résultats et les commentaires seront présentés dans le chapitre suivant.

Chapitre V

Résultats et discussion

V.1. Résultats pour une pression p=101450 Pa

On exécute le programme décrit dans le chapitre quatre sur Matlab pour différentes valeurs du flux de chaleur, mais pour la même valeur de pression et de température à l'entrée. On se donne les conditions suivantes :

- ✓ pression d'entrée p_1 =101450 Pa,
- ✓ température d'entrée T_1 =111 K,
- ✓ pression de sortie p_2 =101350 Pa (pression atmosphérique).

L'exécution prend environ 10s, ce qui justifie davantage le choix de l'équation pour l'UDF dans le chapitre précédent. On obtient les résultats suivants.

Le flux de chaleur q (W/m ²)	Différence d'enthalpie (J/kg)	Différence d'enthalpie ΔH (J/mol)	Température de sortie T_2 (K)	Fraction de vapeur à la sortie α ₂ (%)	Différence de fraction entre l'entrée et la sortie $\Delta \alpha$ (%)
1	3,39	0,0593	110,9937	0,1010	3,9054 10 ⁻²
4	13,56	0,2373	110,9938	0,1021	4,0109 10 ⁻²
10	33,90	0,5933	110,9941	0,1042	4,2218 10 ⁻²
40	135,60	2,2373	110,9958	0,1148	5,2774 10-2
100	339,00	5,9328	110,9990	0,1359	7,3907 10 ⁻²
400	1356,00	23,7312	111,0153	0,2420	0,18
800	2712,00	47,4624	111,0368	0,3846	0,32
1000	3390,00	59,3280	111,0475	0,4564	0,39

tableau V-1 : résultats pour une pression d'entrée p=101450 Pa

La fraction molaire de vapeur à l'entrée est égale à $\alpha_1 = 6.1977 \ 10^{-2}$ %. (On ne fera pas de commentaires, à ce point, sur les résultats obtenus.). A la prochaine étape on introduira dans Fluent, en plus des paramètres de l'écoulement donnés dans le chapitre précédent, pour chaque valeur du Flux une valeur correspondante du transfert de masse entre la phase liquide et la phase vapeur.

La valeur du transfert de masse introduite dans Fluent est calculée comme suit

$$m_{\rm lg} = Q \frac{\alpha}{100} \tag{V-1}$$

Dans Fluent, on a fait une simulation d'écoulement diphasique avec transfert de masse. On y a introduit les valeurs obtenues du transfert de masse, afin de corriger la valeur de la pression pour chaque valeur du flux de chaleur.

V.2. Correction de la pression d'entrée sur Fluent

On utilise le même modèle présenté dans le chapitre précédent, en introduisant les valeurs calculées par le programme sur Matlab.

V.2.1. courbes de pression



graphe V-1 : profil de pression pour différentes valeurs du flux de chaleur

Les profils de pression ont une allure parabolique plus au moins prononcée selon la valeur du flux de chaleur ; tous les graphes se rejoignent à la sortie de la ligne, ce qui est normal car la pression est la même dans tous les cas, du moment qu'on a supposé que les réservoirs se trouvent à la pression atmosphérique.

Flux de chaleur q (W/m^2)	Pression d'entrée p ₁ (pa)
1	101537.762
4	101538.458
10	101540.483
40	101543.275
100	101550.396
400	101606.531
800	101734.279
1000	101809.479

Les pressions d'entrée (p_1) se pressente comme suit.

tableau V-2: valeurs de la pression d'entrée pour différentes valeurs du flux de chaleur



graphe V-2: variation de la pression de sortie en fonction du flux de chaleur

Sur ce graphe on peut voir que la variation de la pression d'entrée en fonction du flux de chaleur a une forme parabolique. On voit aussi que La pression d'entrée croit avec la croissance du flux de chaleur, car ils sont liés par la quantité de vapeur produite. Plus le flux est important plus on a de vapeur. La vapeur ayant un volume massique plus important, pour le même débit massique elle va donc s'écouler plus vite et entraîner avec elle le liquide, ce qui augmente la perte de charge et par conséquent la pression d'entrée.

V.2.2. courbes de résidu

Il a fallu pour chaque simulation, plus de 28 500 itérations pour aboutir à une convergence, ce qui représente plus d'une journée (10 h) de calcul sur un ordinateur présentant les caractéristiques suivantes :

- un processeur P4 technologie LGA d'une fréquence de 3,4 GHz,
- une mémoire cache de 1 Mo,
- une mémoire vive (RAM) de 512 Mo.



fig V-1 : courbes des résidus

Comme on peut le voir, le plus grand résidu est de l'ordre de 10^{-12} , cela veut dire que la convergence est tout à fait satisfaisante.

La figure confirme bien qu'il a fallu plus de 28 500 itérations pour aboutir aux résultats proposés ici. C'est pour cette raison qu'on a dû s'arrêter à un choix de huit valeurs du flux de chaleur seulement, Par manque de temps on ne pouvait donc pas aller plus loin.

V.3. Quantité de vapeur produite (boil-off)

Flux de chaleur q (W/m ²)	Différence d'enthalpie ΔH (J/mol)	Fraction massique de vapeur à l'entrée α_1 (%)	Fraction massique de vapeur à la sortie α_2 (%)
1	0,0593	0	6.52 10 ⁻²
4	0,2373	0	6.6 10 ⁻²
10	0,5933	0	6.72 10 ⁻²
40	2,2373	0	7.66 10 ⁻²
100	5,9328	0	9.48 10 ⁻²
400	23,7312	0	0.178
800	47,4624	0	0.268
1000	59,3280	0	0.309

Après exécution du programme sur Matlab, on obtient les résultats suivants.

tableau V-3 : vapeur produite en fonction du flux de chaleur

On remarque bien que la quantité de vapeur augmente avec l'augmentation du flux de chaleur ce qui est tout a fait normal.

Flux de chaleur q (W/m ²)	Fraction massique de vapeur à la sortie α_2 (%)	Débit massique de vapeur à la sortie (Kg/s)	Fraction volumique à la sortie (%)
1	6.52 10 ⁻²	0,030	11,8
4	6.6 10 ⁻²	0,031	12
10	6.72 10 ⁻²	0,032	12,2
40	7.66 10 ⁻²	0,035	13,67
100	9.48 10 ⁻²	0,045	16,39
400	0.178	0,082	26,92
800	0.268	0,124	35,69
1000	0.309	0,143	39,09

tableau V-4 : débit massique et fraction volumique de la vapeur à la sortie de la ligne

Les valeurs de fraction massique obtenues semblent crédibles, un calcul simple en considérant du méthane pur permet d'estimer la fraction massique à la sortie à 0,66 % pour un flux de 1000W/m².

De la même façon que la fraction massique, la fraction volumique augmente avec l'augmentation du flux de chaleur, ce qui est normal. Par ailleurs cette augmentation de la fraction volumique, justifie l'augmentation des pertes de charges et ainsi celles de la pression à l'entrée.



graphe V-3 : fraction massique de la vapeur à la sortie de la ligne, α_2 , en fonction du flux de chaleur

Dans les résultats obtenus après correction de la pression on peut remarquer que la fraction de vapeur est toujours nulle, quelle que soit la valeur de la pression à l'entrée, contrairement aux premiers résultats avec une pression de 101450 pa, cela est en bon accore avec ce qui a été dit dans le premier chapitre lors de la description des procédés de production de GNL. Donc à la sortie du train de production ou à l'entrée de la ligne de GNL nous avons du liquide sous-refroidi.

Flux de chaleur q (W/m^2)	Température de sortie T_2 (K)
1	110.9881
4	110.9882
10	110.9884
40	110.9899
100	110.9927
400	111.0055
800	111.0193
1000	111.0255

V.4. Température de sortie

tableau V-5 : températures de sortie du GNL de la ligne



graphe V-4: température de sortie T_2 en fonction du flux de chaleur

La température ne varie pas d'une façon très importante elle reste toujours comme on peut le voir sur le graphe entre 110,85 et 111,030. On l'a aussi noté pour les calculs faits avec une pression de 101450 Pa.

Les températures obtenues avec ce programme rejoignent les constatations expérimentales qui disent que le GNL est généralement stocké à une température autour de 111 K (-162 °C). Certes cela peut varier, mais la température de stockage dépend directement de la composition du GNL.

Le GNL est composée essentiellement de méthane, qui a une température de saturation de 111,63 K, à la pression atmosphérique (101350 Pa). Les températures de sortie obtenues sont un peu inférieur à la température de saturation de méthane, cela peut s'expliquer par le fait que le GNL contient de l'azote, qui a une température de saturation de 77, 34 K à la pression atmosphérique.

V.5. Composition de la vapeur

Après avoir quantifié le boil-off, il serait intéressant de voir quelle est sa composition afin de savoir exactement ce qui est perdu.

Comme en peut le voir, plus le flux de chaleur augmente plus la proportion de méthane augmente dans la phase vapeur, contrairement à l'azote dont la proportion diminue avec l'augmentation du flux, ce qui est normal vue sa proportion dans la composition totale.

D'un autre côté, on n'a pas exposé de graphe représentant la proportion d'éthane et de propane dans la vapeur parce qu'elle ne change pas (le changement n'est pas remarquable), comme on peut le voir dans le tableau suivant.

Flux de chaleur q (W/m ²)	Température de sortie T_2 (K)	Fraction molaire de méthane CH ₄ (%)	Fraction molaire d'azote N ₂ (%)	Fraction molaire d'éthane C ₂ H ₆ (%)	Fraction molaire de propane C ₃ H ₈ (%)
1	110.9881	91.8	7.58	0.54	0.08
4	110.9882	91.8	7.58	0.54	0.08
10	110.9884	91.8	7.58	0.54	0.08
40	110.9899	91.81	7.57	0.54	0.08
100	110.9927	91.82	7.56	0.54	0.08
400	111.0055	91.87	7.52	0.54	0.08
800	111.0193	91.92	7.46	0.54	0.08
1000	111.0255	91.94	7.44	0.54	0.08

tableau V-6: composition de la vapeur de GNL pour différentes valeurs du flux de chaleur

On constate que le méthane reste toujours largement majoritaire même dans la phase vapeur, ce qui veut dire qu'à chaque fois que l'on perd du GNL en boil-off, cette vapeur est constituée de plus de 91,5% de méthane. Par ailleurs cela nous conforte dans l'approximation faite dans le chapitre précédent et qui suppose que la masse molaire du GNL coïncide avec celle de sa vapeur.

On constate aussi que la fraction molaire de l'azote diminue avec l'augmentation du flux de chaleur. Cette diminution n'est pas très importante, elle vaut 0,14 entre un flux de chaleur de 1 W/m^2 et 1000 W/m^2 . Cette diminution de la fraction molaire ne veut pas dire que la quantité d'azote évaporée diminue, mais seulement sa fraction.

Pour expliquer cela, prenons les valeurs pour un flux de chaleur de 1 W/m^2 et de 1000 W/m^2 . La fraction d'azote dans la vapeur pour 1 W/m^2 et supérieure à celle de 1000 W/m^2 , mais dans l'absolu, la quantité d'azote contenue dans la vapeur pour 1 W/m^2 est inférieure à celle pour 1000 W/m^2 . La quantité d'azote est très faible dans la composition totale, donc pour 1000 W/m^2 la quantité de vapeur étant plus importante, la fraction d'azote tend à diminuer dans la vapeur.

Les fractions molaires du propane et de l'éthane ne changent pas et restent très faibles dans la phase vapeur.

Conclusion générale

L'objectif de ce travail était de calculer le boil-off produit dans une ligne de transfert. Ce boil-off est dû aux transferts de chaleur entre l'intérieur et l'extérieur de la ligne mais aussi aux pertes de charge, quelles soient singulières ou linéaires. On a donc étudié l'écoulement du GNL dans une ligne, un écoulement avec évaporation. On a eu recours à l'utilisation d'un logiciel de simulation, pour simuler un écoulement diphasique avec variations de la fraction massique de la vapeur.

La simulation ne pouvant se faire complètement sur Fluent, on a considéré uniquement les pertes de charge linéaires, et un flux de chaleur constant sur la paroi de la ligne. A l'aide de l'équation d'état de Peng et Robinson, en corrigeant les pressions d'entrée par des simulations sur Fluent. Nous avons ainsi évalué le boil-off dans une ligne.

Les quantités de vapeur produites dans la ligne peuvent paraître petites mais elles deviennent importantes une fois étalées sur une longue période. Par exemple pour un flux de chaleur de 10 W/m^2 , la perte de gaz sur une année est de 5433,12 de tonnes, ce qui représente 7h de production.

Nous avons pu voir aussi l'impact de l'évaporation du GNL dans une ligne sur les pertes de charge et nous avons conclu que plus il y a de vapeur, plus la vitesse d'écoulement devient importante. C'est ce qui fait que les pertes de charges sont importantes dans ce cas.

La résolution du problème a demandé d'utiliser et donc de maîtriser un logiciel de simulation d'écoulement (CFD), le Fluent, de travailler sur des méthodes numériques nouvelles comme celle des volumes finis et de bien en comprendre l'utilité. De faire une première approche aux écoulements diphasiques.

Ce que l'on peut dire au terme de cette étude, nous avons pu ainsi mettre au point une méthode de calcul du boil-off produit dans une ligne. Elle a permis d'approcher méthodiquement un cas réel mais il reste que, nous n'avons pas disposé des données nécessaires pour y être directement confrontés. Nous exposerons donc pour finir, les pistes de recherche qui nous sont apparues.

Perspective

Pour améliorer et d'approfondir cette étude, on citera les points suivants.

1. Obtenir des informations sur la situation des lignes, par rapport à leur exposition au vent et aux rayonnements solaires, sur leurs dimensions et les matériaux avec lesquels ils sont fabriqués, dans le but d'améliorer la simulation du point de vue du transfert de chaleur. Cela pour étudier d'éventuelle optimisation de l'isolation, et des diamètres des lignes.

- 2. Simuler des écoulements avec des pertes de charges singulières car il subsiste un lien direct entres les pertes de charge et le boil-off, et étudier l'influence d'une variation de diamètres des lignes et des débit d'écoulement.
- 3. Examiner l'impact de la composition du GNL sur son écoulement et sur la production de boil-off.

Tout cela rendrait nécessaire l'achat d'une licence complète d'utilisation du Fluent, et dans la mesure du possible, l'acquisition de moyens de calcul professionnel permettant l'étude de problèmes en trois dimensions.

Références bibliographiques

- [1] Michel Hug, « Mécanique des fluides appliquée ». Eyrolles 1975.
- [2] Frank P. Incropera, David P. Dwitte. «Fundamentals of heat and mass transfert ». John Wiley & Sons 1996.
- [3] B.R. Munson, D.S. Yung, T.H. Okiishi . « fundamentals of fluids dynamics ». John Wiley & Sons 1998.
- [4] Frank Kreith. "Heat and Mass Transfer". Mechanical Engineering Handbook, 1999.
- [5] Pierre Petit, «Séparation et liquéfaction des gaz ». Technique de l'ingénieur, J3600.
- [6] Pierre Petit, «Liquéfaction du gaz naturel ». Technique de l'ingénieur, J3601
- [7] Gordon J. Van Wylen, Richard E. Sonntag. « Thermodynamique appliquée ». Edition du renouveau pédagogique.
- [8] Jean Vidal. « Thermodynamique : application au génie chimique et à l'industrie pétrolière ». Edition technip 1997.
- [9] Ding-Yu Peng, Donalde B. Robinson. « A new tow-constant equation of state ». Chemical engineering science, 1975.

[10] Giorgio Soave. « Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state ». Chemical engineering science, 1971.

[11] Navin C. Patel, Amyn S. Teja. « A new cubic equation of state for fluids and fuild mixtures ». Chemical engineering science, 1981.

- [12] www.eia.doe.gov, energy information administration, official energy statistics from the USA government.
- [13] www.eia.org , site officiel de l'agence internationale de l'énergie.
- [14] www.mem-algeria.org, site officiel du ministère Algérien de l'énergie et des mines.

[15] Documentation de Fluent.



Annexe A :

Méthode du point fixe

Le principe de la méthode consiste à mettre l'équation f(x) = 0 sous sa forme équivalente suivante :

$$x = g(x)$$
,

où g(x) est une fonction de x. Ensuite par approximations successives calculer la racine.

En utilisant une estimation grossière x_0 (de la racine réelle x_r recherchée), recherchons le second membre $g(x_0)$. Nous aurons ainsi calculé une première approximation x_1 par x_r . Dans le second membre remplaçons maintenant x_0 par x_1 pour obtenir une seconde approximation x_2 . Ce processus de calcul est répété ainsi jusqu'à ce que la différence entre deux approximations voisines soit inférieure à la précision recherchée *E*.

$$\left| x_{i} - x_{i-1} \right| < E$$

On dira alors que le processus a convergé, et que x_i représente la racine recherchée.

Pour que le processus converge, il faudrait que cette solution existe. Les conditions d'existence d'une solution dans un intervalle [a, b] sont les suivantes :

- * la fonction f est continue sur l'intervalle [a, b],
- $\bullet \ \text{ le produit } f(a)f(b) < 0,$
- de plus si f'(x) ne change pas de signe sur l'intervalle, la solution est unique.

Si l'existence de la solution est vérifiée alors les conditions de convergence sont :

- ★ la fonction g(x) est stable dans l'intervalle [a, b], cela veut dire que $\forall x \in [a,b]: g(x) \in [a,b],$
- ♦ la fonction g(x) doit vérifier que $\forall x \in [a,b]$: $|g^{\setminus}(x)| < 1$

Annexe B :

Calcul des propriétés physiques du GNL et du GN

Le gaz naturel liquéfié est un mélange de méthane, d'éthane, de butane, de propane et d'azote. Il est stocké sous forme liquide à une température d'environ 110 K sous pression atmosphérique.

I. Calcul des propriétés physique du GNL

Les propriétés sont calculées comme une moyenne des propriétés des différentes substances qui constituent le GNL, on citera :

✤ La chaleur spécifique Cp,

$$cp_{GNL} = \sum_{i=1}^{n} x_i cp_i$$

* La densité ρ ,

$$\lambda_{GNL} = \sum x_i \lambda_i$$

↔ La viscosité dynamique μ

$$\mu_{GNL} = \sum x_i \mu_i$$

* La conductivité thermique λ

$$\lambda_{GNL} = \sum x_i \lambda_i$$

I. Calcul des propriétés physique du GN

De la même façon que pour le GNL, les propriétés sont calculées comme une moyenne des propriétés des différentes substances qui constituent le GN, on citera :

✤ La chaleur spécifique Cp,

$$cp_{GN} = \sum_{i=1}^{n} x_i cp_i$$

* La densité ρ ,

$$\lambda_{GN} = \sum x_i \lambda_i$$

♦ *La viscosité dynamique* μ

$$\mu_{GN} = \sum x_i \mu_i$$

 \clubsuit La conductivité thermique λ

$$\lambda_{GN} = \sum x_i \lambda_i$$

On donne dans le tableau suivant les composition pour du GNL produit dans différente régions du monde :

		3	LNG COM	POSITION	NS (mole %)			
	CII.		$C_2\operatorname{H}_6$	C_3H_5	n-C4 H1 0	i-C4 H1 o	N ₇	n-C5 H1 0
Indonesian	86.81		8.23	3.87	0.53	0.46	0.06	0.04
Algerian (Arzew)	87.39		8.60	2.43	0.47	0.72	0.37	0.02
Venezuelan	87.30		10.10	2.10	0.10	0.10+	0.30	
Algerian (Skikda)	91.5		5.64	1.5	0.25	0.25	0.85	0.01
Alaskan	99.60						0.40	

Composition du GNL en (mole %)



1. Méthane

Les données suivantes sont extraites de l'encyclopédie des gaz, elles sont relatient au liquide à des températures voisines de la température de stockage

T(K)	p(Pa)	$\rho(kgm^{-3})$	$c_p(J k g^{-1} K^{-1})$	$\mu(kg m^{-1}s^{-1})$	$\lambda(Wm^{-1}K^{-1})$
106	0,621105	430,68	$3,43710^3$	$117,910^{-6}$	0,210
110	0,884105	424,98	$3,47910^3$	$106, 510^{-6}$	0,207
111,63 .	$1,01310^{5}$	422,62	$3,49510^3$	102,510-6	0,206
114	$1,22610^5$	419,21	$5,51610^3$	97,2510-6	0,203

Propriétés physiques du méthane liquide

Le point d'ébullition est à 111,63 K sous la pression atmosphérique

2. Ethane

On dispose des données suivantes, pour un équilibre liquide vapeur :

T(K)	p(Pa)	$\rho(kg m^{-3})$	$c_{p}(J k g^{-1} K^{-1})$	$\mu(kg m^{-1}s^{-1})$	$\lambda(W m^{-1} K^{-1})$
100	$(0,01110^{-2})10^{5}$	$\simeq 640$	$\simeq 2,310^{3}$	$\simeq 1000 10^{-6}$	$\simeq 0.8$
110	$(0,00710^{-2})10^{5}$	$\simeq 620$	$\simeq 2,310^{3}$	$\simeq 700 10^{-6}$	$\simeq 0.7$
120	$(0, 35 10^{-2}) 10^{5}$	$\simeq 610$	$\simeq 2,310^{3}$	$\simeq 500 10^{-6}$	$\simeq 0,55$

Propriétés physiques de l'éthane pour un équilibre liquide vapeur



LNG Materials & Fluids Data





LNG Materials & Fluids Data

ETHANE





3. Propane

Pour le propane en propose les courbes suivantes extraites aussi de l'encyclopédie des gaz.





LNG Materials & Fluids Data

Specific Heat - Temperature






14

4. Azote

On dispose du tableau suivant relatif au condition d'équilibre liquide vapeur.

T(K)	p(Pa)	$\rho(kgm^{-3})$	$c_p(J kg^{-1}K^{-1})$	$\mu(kg m^{-1}s^{-1})$	$\lambda(W m^{-1}K^{-1})$
106	11,54105	649,3	$2,50310^3$	$59,210^{-6}$	0,086
108	13,04105	635,0	$2,59510^3$	55,810-6	0,083
110	14,67105	620,0	$2,70910^3$	$52,610^{-6}$	0,079
112	16,45105	604,1	$2,85410^3$	$49,410^{-6}$	0,076
114	18, 37 105	587,2	$3,04610^3$	$46,210^{-6}$	0,073

Propriétés physiques de l'azote liquide