Modèle zonal d'un échangeur avec changement de phase : formulation big M pour l'optimisation

Alix UNTRAU^{1*}, Sabine SOCHARD¹, Sylvain SERRA¹, Jean-Michel RENEAUME¹

¹Laboratoire de Thermique, Energétique et Procédés (LaTEP), Université de Pau et des Pays de l'Adour, E2S UPPA, Pau

*(auteur correspondant : <u>alix.untrau@univ-pau.fr</u>)

Résumé – Un modèle zonal est utilisé pour simuler le comportement d'un échangeur de chaleur en régime permanent avec potentiel changement de phase des deux fluides selon l'énergie échangée, sur le logiciel d'optimisation GAMS. Le modèle est formulé comme un problème d'optimisation non linéaire en variable mixtes (MINLP), dont les variables binaires qualifient l'existence d'une zone d'échange entre fluides à différents états (liquide, liquide/vapeur ou vapeur). Des corrélations empiriques sont utilisées pour le calcul des coefficients de transfert pour chaque phase. Le modèle est testé sur plusieurs cas d'étude considérant uniquement des corps purs, et validé avec des données de la littérature. La formulation permettra de l'utiliser pour des études d'optimisation par la suite.

Nomenclature

А	aire d'échange, m ²	W	taux de vaporisation
Bo	nombre d'ébullition	У	variable binaire
Ср	capacité thermique, J. kg ⁻¹ .K ⁻¹	Symb	poles grecs
Ď	diamètre, m	ρ	masse volumique, kg.m ⁻³
G	flux massique, kg.m ⁻² .s ⁻¹	μ	viscosité, Pa.s
h	coefficient d'échange thermique, W.m ⁻² .K ⁻¹	Indic	es et exposants
k	conductivité thermique, W.m ⁻¹ . K ⁻¹	с	courant chaud
L	chaleur latente, J.kg ⁻¹	e	entrée
ṁ	débit massique, kg.s ⁻¹	eq	équivalent
Μ	grand scalaire	f	courant froid
Nu	nombre de Nusselt	hvd	hydraulique
Pr	nombre de Prandtl	1	liquide
Ò	puissance thermique échangée, W	S	sortie
Ře	nombre de Reynolds	v	vapeur
Т	température, K	Z	zone
U	coefficient de transfert global. W.m ⁻² K ⁻¹		

1. Introduction

Les échangeurs de chaleur co-axiaux à contre-courant sont fréquemment utilisés dans les systèmes thermiques. L'échange de chaleur est amélioré lorsqu'un changement de phase se produit, les évaporateurs et condenseurs font donc l'objet d'un intérêt accru. Cependant, la modélisation précise et rapide de tels échangeurs, permettant de déterminer les températures de sortie de chaque courant ainsi que l'énergie échangée, reste un défi, en particulier lorsque les deux courants peuvent changer de phase.

En régime permanent, le modèle à un seul nœud est couramment utilisé pour des échangeurs de chaleur sensible. Lorsqu'un changement de phase a lieu, le modèle zonal est privilégié afin de considérer différents coefficients de transfert selon l'état du fluide. L'échangeur est alors divisé en plusieurs zones selon l'état de chaque fluide (liquide, vapeur ou diphasique). Le transfert de chaleur est ensuite modélisé dans chaque zone avec le modèle à un seul nœud [1]. Ce modèle a également été adapté pour des études en régime dynamique (Moving Boundary Model). Une autre approche consiste à diviser l'échangeur en nombreux segments (modèles

multinode ou volumes finis) pour améliorer la précision des résultats. Cependant cette approche requiert des temps de calcul beaucoup plus longs que le modèle zonal [2].

Ces modèles traditionnellement utilisés requièrent des structures conditionnelles pour évaluer l'existence des différentes zones d'échange, entre les deux courants présents sous différentes phases, ce qui limite leur intégration à des problèmes d'optimisation plus larges. De rares travaux ont tenté de répondre à cette problématique. Un réseau d'échangeurs avec potentiel changement de phase a été optimisé dans [3] mais chaque échangeur ne comporte qu'un seul nœud et emploie un coefficient d'échange moyen pour représenter les différentes phases. Un échangeur multi-courant avec potentiel changement de phase a été optimisé dans [4] mais le coefficient de transfert global entre les fluides n'est pas étudié.

Il semble qu'il n'existe actuellement dans la littérature aucun modèle d'échangeur avec potentiel changement de phase des deux côtés, adapté à l'optimisation numérique et utilisant des corrélations pour modéliser précisément les transferts convectifs dans chaque phase. Le modèle proposé dans cette étude vient compléter ce manque.

2. Modèle zonal

Le modèle développé représente un échangeur de chaleur co-axial à contre-courant, avec potentiel changement de phase des deux fluides. Un modèle zonal est implémenté pour calculer les températures de sortie des deux courants et l'énergie échangée, pour un design d'échangeur fixé avec une aire d'échange connue. La longueur de l'échangeur est divisée en segments selon les phases en présence. Plusieurs configurations sont possibles, la Figure 1 en présente un exemple, en 2D axisymétrique. Dans cet exemple, le courant chaud entre à l'intérieur de l'échangeur co-axial à l'état de vapeur surchauffée, se condense et sort à l'état liquide sousrefroidi, tandis que le courant froid entre à l'état liquide sous-refroidi, s'évapore et sort à l'état de vapeur surchauffée. Selon les températures et états des deux fluides, la configuration peut changer. En particulier, une zone peut ne pas exister. Par exemple, si le courant froid sur la Figure 1 sort à l'état diphasique, alors la zone 5 n'existe pas. Les zones n'ont donc pas d'états associés prédéfinis et leur nombre est compris entre 1 et 5. Les paragraphes suivants présentent l'élaboration du modèle adapté à l'optimisation.



Figure 1 : Exemple de configuration possible pour l'échangeur de chaleur

2.1. Hypothèses

Plusieurs hypothèses simplificatrices ont été adoptées pour développer le modèle zonal :

- Ecoulement piston
- Echangeur à contre-courant
- Régime permanent
- Orientation horizontale (force gravitationnelle négligeable)
- Géométrie cylindrique co-axiale avec une section de passage constante
- Pertes de charge négligeables
- Pas de pertes thermiques vers l'environnement

- Conduction thermique et transfert radiatif dans le fluide négligeables
- Résistance thermique de la paroi entre les deux fluides négligeable
- Propriétés thermophysiques constantes

2.2. Propriétés thermophysiques

Les propriétés thermiques des corps purs ont été déterminées avec le logiciel ProSim[®]. Dans cette étude, les propriétés sont supposées constantes et calculées à la température moyenne entre la température d'entrée du courant chaud et celle du courant froid.

2.3. Equations

En appliquant les hypothèses simplificatrices énoncées ci-dessus, les équations de conservation pour une zone donnée, nommée z, et pour chaque fluide, peuvent être simplifiées. Les symboles, indices et exposants utilisés dans les équations qui suivent sont listés dans la nomenclature. Le bilan d'énergie entre l'entrée et la sortie de chaque zone peut être écrit de la façon suivante, lorsque le fluide se trouve dans un état monophasique :

Courant chaud, resp. froid :

$$\dot{Q}_z = \dot{m}_c C p_{c,z} (T^e_{c,z} - T^s_{c,z}), \quad \text{resp.} \, \dot{Q}_z = \dot{m}_f C p_{f,z} (T^s_{f,z} - T^e_{f,z})$$
(1)

Les capacités calorifiques à pression constantes Cp sont calculées en fonction de l'état du fluide dans chaque zone. Pour une zone avec un écoulement diphasique, le bilan d'énergie s'écrit comme suit :

Courant chaud, resp. froid :

$$\dot{Q}_z = \dot{m}_c L_c (w_{c,z}^e - w_{c,z}^s), \quad \text{resp.} \, \dot{Q}_z = \dot{m}_f L_f (w_{f,z}^s - w_{f,z}^e)$$
(2)

Pour un échangeur à contre-courant, l'équation suivante permet de relier la puissance échangée à l'aire de la surface d'échange :

$$\dot{Q}_z = A_z U_z \Delta T_{LM,z} \tag{3}$$

La différence de température logarithmique moyenne $\Delta T_{LM,z}$ est calculée avec l'approximation de Chen [5] pour faciliter la convergence et éviter une singularité lorsque les deux fluides changent de phase dans la zone et ont donc une température constante (corps purs) :

$$\Delta T_{LM,z} = \left(\Delta T_{gauche,z} \cdot \Delta T_{droite,z} \cdot \frac{\Delta T_{gauche,z} + \Delta T_{droite,z}}{2}\right)^{\frac{1}{3}}$$
(4)

Avec $\Delta T_{gauche,z}$ et $\Delta T_{droite,z}$ les différences de température à gauche et à droite de la zone d'échange respectivement. Cette approximation est valide lorsque les différences de températures à droite et à gauche sont du même ordre de grandeur, avec une erreur inférieure à 0,1%. En revanche, lorsque ces différences ne sont pas du même ordre de grandeur, l'erreur augmente à quelques pourcents.

Le coefficient de transfert global U_z dans la zone est calculé à partir des coefficients de transfert convectifs pour chaque fluide, les autres modes de transferts au sein du fluide et de la paroi étant négligés. Les aires des surfaces d'échange intérieure et extérieure, chacune en contact avec un des fluides, sont supposées suffisamment proches.

$$\frac{1}{A_z U_z} = \frac{1}{A_{c,z} h_{c,z}} + \frac{1}{A_{f,z} h_{f,z}}, \qquad \frac{1}{U_z} \approx \frac{1}{h_{c,z}} + \frac{1}{h_{f,z}}$$
(5)

2.4. Corrélations pour les coefficients de transfert de chaleur

Les coefficients d'échange convectifs ont été calculés à partir de corrélations en fonction de l'état dans lequel se trouve le fluide dans chaque zone : monophasique, vapeur se condensant ou bien liquide s'évaporant.

2.4.1. Fluide monophasique

Pour les deux courants, qu'ils soient à l'état liquide ou vapeur, les coefficients de transferts sont calculés en fonction du régime d'écoulement, déterminés grâce au nombre de Reynolds. Dans les exemples traités dans cette étude, les nombre de Reynolds obtenus sont supérieurs à 10⁴, indiquant un régime d'écoulement turbulent.

La corrélation choisie est celle de Dittus-Boelter [6], qui est adaptée aux différences de températures faibles, ce qui est le cas dans les exemples traités. Cette corrélation nous fournit le nombre de Nusselt, qui est relié au coefficient de transfert convectif.

$$Nu_{D_{hyd}} = 0,023Re^{0,8}Pr^n = \frac{hD_{hyd}}{k}, \qquad Re > 10^4$$
(6)

Les propriétés du fluide sont calculées pour l'état dans lequel il se trouve (liquide ou vapeur). L'exposant n dans l'Equation (6) dépend du profil de température dans l'échangeur : il vaut 0,3 pour un fluide se refroidissant (courant chaud c) et 0,4 pour un fluide se réchauffant (courant froid f).

2.4.2. Condensation

Pour évaluer le coefficient de transfert convectif du fluide chaud lorsqu'il se condense, la corrélation de Cavallini et Zecchin [7] a été employée :

$$Nu_{D_{hyd}} = 0.05Re_{eq}^{0.8}Pr_l^{\frac{1}{3}}$$
(7)

Le nombre de Prandtl est calculé en utilisant les propriétés de la phase liquide. Un nombre de Reynolds équivalent est utilisé pour représenter l'écoulement diphasique, en utilisant le taux de vaporisation moyen du fluide dans la zone considérée w_z .

$$Re_{eq} = \frac{G_{eq}D_{hyd}}{\mu_l} \tag{8}$$

$$G_{eq} = G\left[(1 - w_z) + w_z \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_v}} \cdot \frac{\mu_v}{\mu_l} \right]$$
(9)

2.4.3. Ebullition

Le courant froid peut s'évaporer, la corrélation utilisée pour calculer le coefficient de transfert convectif dans cette situation est celle de Lazarek et Black [8], utilisant le nombre d'ébullition *Bo*. Cette corrélation fournit une bonne approximation du coefficient de transfert pour le fluide R290 utilisé dans les cas d'études présentés en partie 3, avec une déviation moyenne relative de -9,13% [9].

$$Nu_{D_{hyd}} = 30Re^{0.857}Bo^{0.714} = \frac{hD_{hyd}}{k_l}$$
(10)

$$Bo = \frac{\dot{Q}_z}{GLA_z} \tag{11}$$

2.5. Résolution adaptée à l'optimisation

Le modèle est implémenté dans le langage GAMS qui est un langage de modélisation pour l'optimisation mathématique, en particulier pour les modèles linéaires, non linéaires et en variables mixtes de grande taille et complexité. Le défi dans le modèle d'échangeur avec changement de phase est le basculement d'un système d'équations algébriques à un autre en fonction des phases présentes dans chaque zone. Dans notre modèle, des variables binaires sont introduites et des inégalités écrites avec la méthode Big M [10] permettent le basculement, sans utiliser de structures conditionnelles que l'optimiseur ne pourrait pas gérer.

2.5.1. Données d'entrée

Les données d'entrée du problème sont les températures et taux de vaporisation en entrée, les débits massiques et les températures de changement de phase de chaque courant. La géométrie de l'échangeur (surface d'échange et diamètres hydrauliques) est connue. Les propriétés thermophysiques de chaque courant et pour chaque phase peuvent être calculées en amont et intégrées aux données d'entrée du problème.

2.5.2. Variables binaires et formulations Big M

Afin de basculer d'un système d'équation à un autre, la méthode Big M a été employée [10]. 6 variables binaires ont été introduites dans chaque zone : 3 par courant pour représenter les 3 états physiques possibles (liquide, diphasique, vapeur). La variable binaire peut prendre les valeurs de 1 (lorsque le courant est dans l'état indiqué par cette variable binaire) ou 0 (lorsque le courant est dans un autre état). Par exemple, si le courant chaud est à l'état de vapeur surchauffée dans la zone z de l'échangeur, la variable binaire associée à l'état vapeur du courant chaud, $y_{c,v,z}$, vaudra 1 tandis que celles associées à l'état diphasique ou liquide vaudra 0. Un courant ne peut se trouver que dans un unique état par zone.

Ces variables binaires sont ensuite utilisées pour activer le système d'équations adapté. La méthode Big M fait intervenir un grand scalaire M (grand par rapport aux autres termes dans l'équation). A titre d'exemple, voici les inégalités permettant de calculer la puissance échangée pour le courant chaud dans la zone z s'il se trouve à l'état vapeur :

$$-M(1 - y_{c,v,z}) + \dot{m}_c C p_{c,v,z} \left(T_{c,z}^e - T_{c,z}^s \right) \le \dot{Q}_z \le \dot{m}_c C p_{c,v,z} \left(T_{c,z}^e - T_{c,z}^s \right) + M \left(1 - y_{c,v,z} \right) (12)$$

Lorsque $y_{c,v,z}$ vaut 1, les termes faisant intervenir M s'annulent et la valeur de \dot{Q}_z est alors égale à $\dot{m}_c C p_{c,v,z} (T_{c,z}^e - T_{c,z}^s)$. En revanche, lorsque $y_{c,v,z}$ vaut 0, la valeur de \dot{Q}_z est comprise entre une très petite valeur et une très grande valeur. Cela revient à désactiver cette contrainte. Cette méthode est utilisée pour les contraintes suivantes :

- Lier l'état physique aux températures : la phase liquide (resp. vapeur) existe si la température est inférieure (resp. supérieure) à la température de changement de phase. L'écoulement est diphasique dans une zone si les températures d'entrée et de sortie du courant sont égales à la température de changement de phase.
- Les bilans d'énergie comme pour l'Equation (12).
- L'attribution du coefficient d'échange convectif calculé avec la corrélation adaptée à l'état du fluide dans la zone.
- Le calcul des différences de températures à droite et à gauche de chaque zone.

Une variable binaire supplémentaire caractérise l'existence d'une zone d'échange. Si les deux courants ne passent pas par tous les états possibles dans l'échangeur, alors le modèle zonal comportera moins de 5 zones. Les zones non existantes seront toutes reportées du côté droit de l'échangeur. Des contraintes, écrites avec la méthode Big M elles-aussi, s'assurent qu'elles n'interviennent pas dans l'échange thermique : puissance échangée et aire nulles, températures et taux de vaporisation égaux en entrée et en sortie.

2.5.3. Contraintes

Des contraintes sont ajoutées pour assurer des résultats cohérents :

- Le sens de l'échange est garanti : le courant froid ne peut que se réchauffer tandis que le courant chaud ne peut que refroidir.
- La continuité des températures et taux de vaporisation à la frontière entre deux zones est imposée.
- Les transitions entre états se font toujours dans les ordres suivants : L-LV-V pour le courant froid ou V-LV-L pour le courant chaud, tout autre transition est interdite.
- Il n'est pas possible d'avoir un courant qui se trouve dans le même état physique dans plus de trois zones consécutives.
- L'aire totale de l'échangeur est égale à la somme des aires de chaque zone.

2.5.4. Résolution

Ce modèle a été développé pour s'intégrer à un modèle d'optimisation plus large, utilisant une fonction objectif adapté au problème (économique par exemple). Cependant, dans cette étude, le modèle est testé seul. Une fonction objectif fictive a donc été utilisée, visant à maximiser la puissance échangée dans l'échangeur de chaleur :

$$\max \dot{Q} \operatorname{avec} \dot{Q} = \sum_{z=1}^{z=5} \dot{Q}_z$$
⁽¹³⁾

Afin de faciliter la convergence du problème, toutes les variables sont initialisées à partir de valeurs moyennes pour les températures, coefficients d'échange, puissance échangée, aire d'échange et toute autre variable intervenant dans les corrélations présentées dans le paragraphe 2.4.

3. Résultats et discussions

Afin de valider le modèle ci-dessus, deux cas d'étude ont été traités, en considérant le même échangeur que celui étudié par [1], où la simulation est faite avec un modèle zonal et des coefficients de transfert constants. L'aire d'échange est de 3 m² et les deux fluides sont du n-Propane (R290). Les conditions opératoires sont détaillées dans le Tableau 1. Le système à résoudre compte 168 variables dont 35 variables binaires, et 441 contraintes.

	Débit massique <i>m</i>	Température d'entrée	Pression	Température d'ébullition
	kg.s ⁻¹	К	bar	К
Courant chaud	0,01	340	20	330
Courant froid	0,01	285	10	300

Tableau 1 : Conditions opératoires des cas d'étude

3.1. Validation : coefficients de transfert thermique constants

Dans un premier temps, les mêmes coefficients de transferts constants que ceux choisis par [1] sont utilisés (100 W.m⁻².K⁻¹ pour le liquide et la vapeur et 2000 W.m⁻².K⁻¹ pour l'écoulement diphasique). Les résultats obtenus avec le code GAMS sont présentés sur la Figure 2. Un bon accord entre ces résultats et ceux obtenus par [1] (figure 6 (b) dans la référence [1]) est constaté : 5 zones sont obtenues et les profils de température des deux courants ont des allures similaires.



Figure 2 : Résultats avec h constants

Une comparaison des valeurs numériques a été conduite. Les valeurs de [1] sont récupérées directement sur le graphique avec une précision de 0,01 pour la puissance échangée normalisée et de 1K pour les températures. Les écarts maximaux constatés entre les deux études concernent le courant froid dans les zones 4 et 5 et s'élèvent à 3,5K environ, soit un écart relatif de 1%. Les positions des zones sur l'axe de la puissance échangée normalisée présentent des écarts inférieurs à 0,02. Le modèle développé dans cette étude est donc validé. Le temps de résolution est de 2

secondes sur un ordinateur portable avec les caractéristiques suivantes : Intel Core i7-1065G7 1.3GHz. Les légères différences obtenues dans les températures de sortie et les tailles de chaque zone entre les deux études peuvent s'expliquer par des différences dans les valeurs des capacités thermiques et chaleurs latentes utilisées, ces valeurs n'étant pas précisées dans [1].

3.2. Coefficients de transfert thermique variables

Dans cette seconde étude, les coefficients de transfert thermiques sont calculés à l'aide des corrélations présentées dans la partie 2.4., ce qui nécessite les valeurs des diamètres hydrauliques. N'étant pas communiqués dans [1], une valeur de 0,01m est choisie pour les deux passages d'écoulement. Des valeurs de h différentes de celles utilisées dans la partie 3.1 sont obtenues dans chaque zone, présentées dans le Tableau 2 pour les courants chaud et froid.

Zone	1	2	3	4	5	
$h_c (W.m^{-2}.K^{-1})$	662	244	384	624	624	
$h_{f}(W.m^{-2}.K^{-1})$	635	635	2648	504	642	



Tableau 2 : Coefficients d'échange obtenus avec les corrélations

Cela conduit à des résultats de simulation légèrement différents, présentés sur la Figure 3. Les mêmes zones sont observées mais les profils de températures sont légèrement différents. En particulier, le courant froid dans les zones 4 et 5 est environ 10K plus chaud que dans les résultats de [1], soit un écart d'environ 3%. De plus, la zone 4 est plus grande d'environ 5%. Enfin, les températures des deux courants entre les zones 1 et 2 sont très proches, avec moins de 1K d'écart. Ces différences peuvent être dues aux corrélations utilisées et aux valeurs des paramètres choisis.

Figure 3 : Résultats avec h variables

Le temps de résolution est allongé à 3 secondes sur le même ordinateur. Cette étude confirme l'impact que les valeurs de h ont sur les résultats de modélisation de l'échangeur.

4. Conclusion

Dans cet article, un modèle zonal pour un échangeur coaxial à contre-courant avec changement de phase potentiel des deux fluides a été développé. Ce modèle a la particularité d'être adapté à l'optimisation numérique en remplaçant les tests conditionnels par des variables binaires et inégalités Big M. Des corrélations sont utilisées pour calculer le coefficient d'échange d'un fluide en fonction de son état. Le modèle a tout d'abord été validé avec des données de la littérature en considérant des coefficients d'échange constants. Puis, les corrélations ont été utilisées pour améliorer la modélisation du transfert thermique. De futurs travaux porteront sur l'utilisation de ce modèle pour optimiser le dimensionnement et le fonctionnement de l'échangeur. En perspective, le modèle pourrait être adapté à des fluides multi-constituants.

Références

- [1] I. H. Bell, S. Quoilin, E. Georges, J. E. Braun, E. A. Groll, W. T. Horton, V. Lemort, A generalized moving-boundary algorithm to predict the heat transfer rate of counterflow heat exchangers for any phase configuration, *Applied Thermal Engineering*, 79 (2015), 192-201.
- [2] S. Bendapudi, J. E. Braun, E. A. Groll, A comparison of moving-boundary and finite-volume formulations for transients in centrifugal chillers, *International Journal of Refrigeration*, 31-8 (2008), 1437-1452.
- [3] J. M. Ponce-Ortega, A. Jiménez-Gutiérrez, I. E. Grossmann, Optimal synthesis of heat exchanger networks involving isothermal process streams, *Computers & Chemical Engineering*, 32-8 (2008), 1918-1942.
- [4] R. S. Kamath, L. T. Biegler, and I. E. Grossmann, Modeling Multistream Heat Exchangers with and without Phase Changes for Simultaneous Optimization and Heat Integration, *AIChE Journal*, 58-1 (2012), 190-204.
- [5] Chen, J.J.J. Comments on improvements on a replacement for the logarithmic mean. *Chemical Engineering Science*, 42 (1987), 2488–2489.
- [6] F. W. Dittus et L. M. K. Boelter, Heat transfer in automobile radiators of the tubular type, *University of California Publications In Engineering*, 2 (1930), 443-461.
- [7] A. Cavallini et R. Zecchin, A dimensionless correlation for heat transfer in forced convection condensation, *Proceedings of the 6th international heat transfer conference* (Tokyo 1974), Vol 3 309-313.
- [8] G. M. Lazarek et S. H. Black, Evaporative heat transfer, pressure drop and critical heat flux in a small vertical tube with R-113, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 25 (1982), 945-960.
- [9] M. ElFaham, C.C Tang, A Comparative Analysis of Two-Phase Flow Boiling Heat Transfer Coefficient and Correlations for Hydrocarbons and Ethanol. *Energies*, 16 (2023), 5931.
- [10] F. Glover, Improved linear integer programming formulations of nonlinear integer problems, *Management Science*, 22-4 (1975), 455-460.

Remerciements

Les auteurs souhaitent exprimer leur gratitude aux stagiaires qui ont participé à ce travail : Mohd Sabri, Vitor Farias da Silva, Paulo Renato Capato Santos et Fernanda Santana Bulhões.