

Simulation numérique de l'interaction entre un jet plasma et un jet aqueux.

Guillaume BALMIGERE^{1*}, Stéphane VINCENT², Erick MEILLOT¹, Jean-Paul CALTAGIRONE²

¹Laboratoire de Projection Thermique, CEA Le Ripault, BP16 – 37260 Monts

²Laboratoire TREFLE, 16, avenue Pey-Berland – 33607 PESSAC

* (auteur correspondant : balmigere@enscpb.fr)

Résumé – Nous présentons ici la simulation de l'interaction entre un jet de plasma et un jet liquide impliquée dans le procédé de projection plasma en phase humide. Nous détaillons la méthodologie numérique et présentons les premiers résultats de simulation. Ces derniers font intervenir un jet liquide fragmenté sous forme de gouttes de 300 μm de diamètre et un plasma Ar-H₂.

Nomenclature

C	fonction de phase	F_{TS}	Force de tension de surface, N
C_p	capacité calorifique, $J.kg^{-1}.K^{-1}$	<i>Symboles grecs</i>	
G	constante de gravité, $9,81 m.s^{-2}$	λ	conductivité thermique, $W.m^{-1}.K^{-1}$
U	vitesse, $m.s^{-1}$	ρ	masse volumique, $kg.m^{-3}$
P	pression, Pa	μ	viscosité dynamique, $kg.m^{-1}.s^{-1}$
t	temps, s	μ_t	viscosité turbulente, $kg.m^{-1}.s^{-1}$
T	température, K	χ	concentration d'espèces
D	diffusivité massique, $m^2.s^{-1}$		

1. Introduction

L'une des alternatives envisagées pour la production d'énergie repose sur l'utilisation de piles à combustible de type S.O.F.C. (Solid Oxide Fuel Cell). Parmi les procédés de fabrication existant, la projection thermique de nanoparticules en phase humide (SPS) fait l'objet de nombreuses études expérimentales [1-3]. Celles-ci visent à concilier les performances physicochimiques et mécaniques attendues, ainsi que les contraintes liées à la structure interne des dépôts. Dans cette optique, la compréhension des phénomènes thermocinétiques impliqués dans le procédé est capitale.

Le procédé SPS voit interagir un jet liquide chargé de particules nanométriques et un jet de gaz à haute vitesse et haute température issu d'une torche à plasma d'arc soufflé. En premier lieu nous assistons à une succession de fragmentations du jet liquide qui se traduit par une distribution de gouttes de tailles variables. Ces gouttes sont alors accélérées, transportées par le plasma, le temps de leur vaporisation. Il ne reste alors dans le plasma que les particules nanométriques, initialement présentes dans la suspension, dont les états d'agrégation et de fusion ne sont pas connus avec précision mais déterminants pour les propriétés physicochimiques du dépôt.

Les observations macroscopiques d'angles de dispersion et de déviation notamment permettent d'émettre des hypothèses sur la fragmentation du jet liquide afin de corréler les conditions de projection et les propriétés des dépôts obtenus. Toutefois, du fait des températures et des vitesses élevées que l'on rencontre dans un jet de plasma, il reste difficile

d'obtenir des mesures expérimentales précises sur le comportement des suspensions en vol. L'apport de la simulation numérique se révèle donc majeur dans la détermination de l'histoire thermocinétique des particules.

De nombreuses études de simulation ont été consacrées aux jets de plasma, dans différentes configurations. Les modèles de type Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) tels que le k-ε sont généralement utilisés pour modéliser la turbulence liée à l'engouffrement d'air ambiant dans le plasma [4-8]. Toutefois, des réserves sont émises sur l'hypothèse d'écoulement isotrope sous-jacente à ces modèles, et de plus ils ne donnent pas accès en toute rigueur à une représentation déterministe des champs de température et de vitesse.

Nous présentons ici la modélisation 3D d'un plasma Ar-H₂ et les premiers résultats de son interaction avec un jet liquide. Une approche de simulation des grandes échelles est adoptée afin de modéliser et de simuler l'écoulement de plasma turbulent instationnaire. La phase liquide est quant à elle suivie par une méthode de suivi d'interface mixte eulérienne - lagrangienne.

2. Modèles numériques

2.1. Hypothèses de travail

Le plasma est supposé être un milieu continu, newtonien, à l'équilibre thermodynamique local (E.T.L.). Une hypothèse de milieu optiquement mince nous permet de modéliser les effets radiatifs par un terme source volumique dans l'équation de l'énergie. Les réactions d'ionisation et de recombinaison sont prises en compte à travers un modèle global de coefficients thermodynamiques et de transport dépendant de la température et dérivé des formules de Wilke et Masson [9,10]. Enfin, l'écoulement est supposé incompressible et les effets de changement de phase ne sont pas pris en compte à cette étape des simulations.

2.2. Modèle physique

Les équations de conservation du système sont les équations de Navier-Stokes incompressibles et de l'énergie en formulation température. Une formulation 1-fluide permet la prise en compte des mouvements de l'interface entre la phase aqueuse et le milieu extérieur par l'introduction d'une équation d'advection de la fraction volumique locale C de la phase aqueuse. La modélisation du plasma requiert enfin la résolution d'une équation de transport de la concentration locale χ d'air. Le système d'équation final s'écrit :

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} \right) = \rho \vec{g} - \nabla p + \nabla \cdot (\mu + \mu_t) (\nabla \vec{u} + \nabla^T \vec{u}) + \vec{F}_{TS} \quad (2)$$

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (3)$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \chi = \nabla \cdot (D \nabla \chi) \quad (4)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) C = 0 \quad (5)$$

Les paramètres physiques ρ, μ, et λ sont fonction de T, C et χ. Leurs expressions sont tirées des lois thermodynamiques de Wilke et Masson [9,10] pondérées selon les phases en présence.

2.3. Modèle de turbulence

Nous obtenons la description instantanée de l'écoulement grâce aux champs fluctuants de vitesse, de température, de concentration d'espèce et de fonction de phase donnés par un modèle de simulation des grandes échelles. Celui-ci repose sur la résolution directe des grandes échelles de la turbulence et sur la modélisation des petites échelles, dites « sous-maille », à travers un terme dissipatif. La longueur de coupure, en dessous de laquelle la modélisation est activée, est généralement égale à la taille locale de la maille.

Nous utilisons dans ce travail un modèle sous-maille de Smagorisky [11] basé sur l'expression suivante de la viscosité turbulente :

$$\mu_t = C_s \bar{\Delta}^{-1/2} \Phi_s(u') \quad (6)$$

C_s est la constante du modèle de Smagorinsky, $\bar{\Delta}$ est la longueur de coupure, et $\Phi_s(u')$ est une fonction de la vitesse à la coupure u' .

2.4. Méthodes numériques

Le modèle physique (1-6) est implémenté dans la bibliothèque de calcul scientifique Aquilon développée au laboratoire TREFLE. Les équations sont discrétisées sur une grille orthogonale curviligne décalée par la méthode des volumes finis. Le couplage vitesse/pression est réalisé par un algorithme de type lagrangien augmenté. Les schémas hybride et upwind sont utilisés pour la discrétisation spatiale des équations, et le système linéaire est résolu par un solveur itératif BICG-Stab II. Une méthode hybride eulérienne-lagrangienne est utilisée pour le suivi des interfaces liquide/gaz. Pour de plus amples détails sur les méthodes numériques et leurs validations le lecteur se reportera par exemple aux travaux de Vincent et al. [12]

3. Description de l'étude

3.1. Caractéristiques du plasma

Nous avons choisi le cas d'un plasma Ar-H₂ pénétrant dans de l'air à température ambiante. Les principaux paramètres de projection sont résumés dans le Tableau 1.

Paramètres de projection	Valeurs
Gaz	Ar-H ₂ (45/25 slm)
Puissance d'entrée	32.5 kW
Intensité d'arc	600 A
Tension	65 V
Efficacité thermique	50%
Atmosphère	Air à 1 atm
Diamètre interne de la torche	6 mm

Tableau 1: Paramètres de projection choisis pour la simulation

3.2. Paramètres numériques

La méthodologie de simulation s'articule selon deux étapes. Nous commençons par simuler le jet de plasma en l'absence de liquide, dans un domaine de calcul dont les frontières restent suffisamment éloignées pour limiter leur influence sur le développement du jet. Nous

poursuivons cette simulation jusqu'à obtention de champs de vitesse, de température et d'espèce convergés en moyenne.

Ces champs sont interpolés sur un nouveau maillage correspondant à la zone d'interaction entre le liquide et le jet de plasma (fig. 2 et 3). Nous pouvons ainsi raffiner la grille au niveau de l'injection du liquide qui se fait radialement et sous forme de gouttes de 300 μm de diamètre à une vitesse de 30m/s. Le domaine de calcul s'étend sur 50 mm dans l'axe du jet (direction x) et 10 mm radialement (direction y et z). La grille de 68 x 81 x 56 points choisie (fig. 1) résulte d'un compromis entre la finesse de la résolution, et les temps de calcul rapidement prohibitifs en 3 dimensions monoprocasseur. La grille utilisée comprend des zones exponentielles permettant un raffinement de la zone d'injection de liquide, et des zones à pas constant. Le pas de temps de la simulation est de 10^{-7} s.

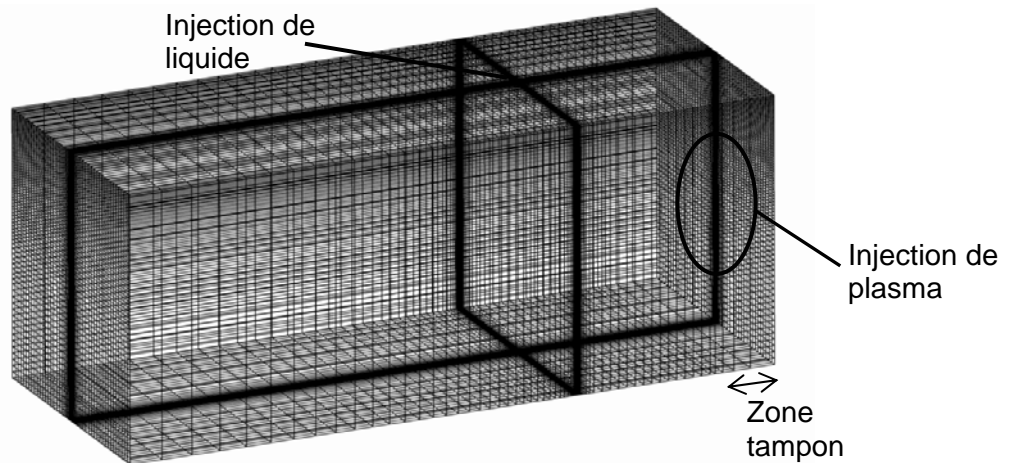


Figure 1: Grille 68 x 81 x 56

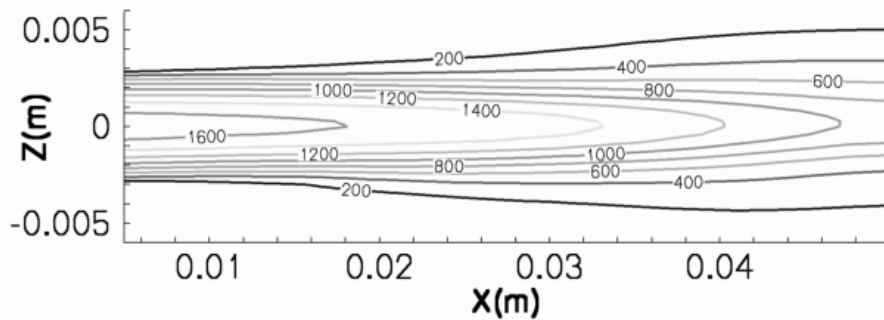


Figure 2: Coupe longitudinale du champ de vitesse axiale moyenne imposé comme condition initiale

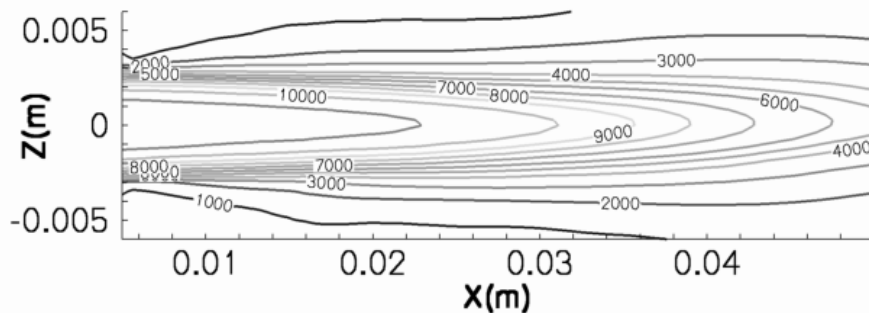


Figure 3 : Coupe longitudinale du champ de température moyenne imposé comme condition initiale

4. Résultats et discussion

Nous avons injecté quatre gouttes de liquide dans le plasma et suivi leur trajectoire et leur déformation au cours du temps. La figure 4 présente les premiers résultats d'interaction que nous avons obtenus. Les niveaux de gris symbolisent la température vue par la parcelle de fluide (du foncé au clair lorsque la température augmente). Il est important de noter que le changement de phase n'est pas pris en compte dans cette modélisation.

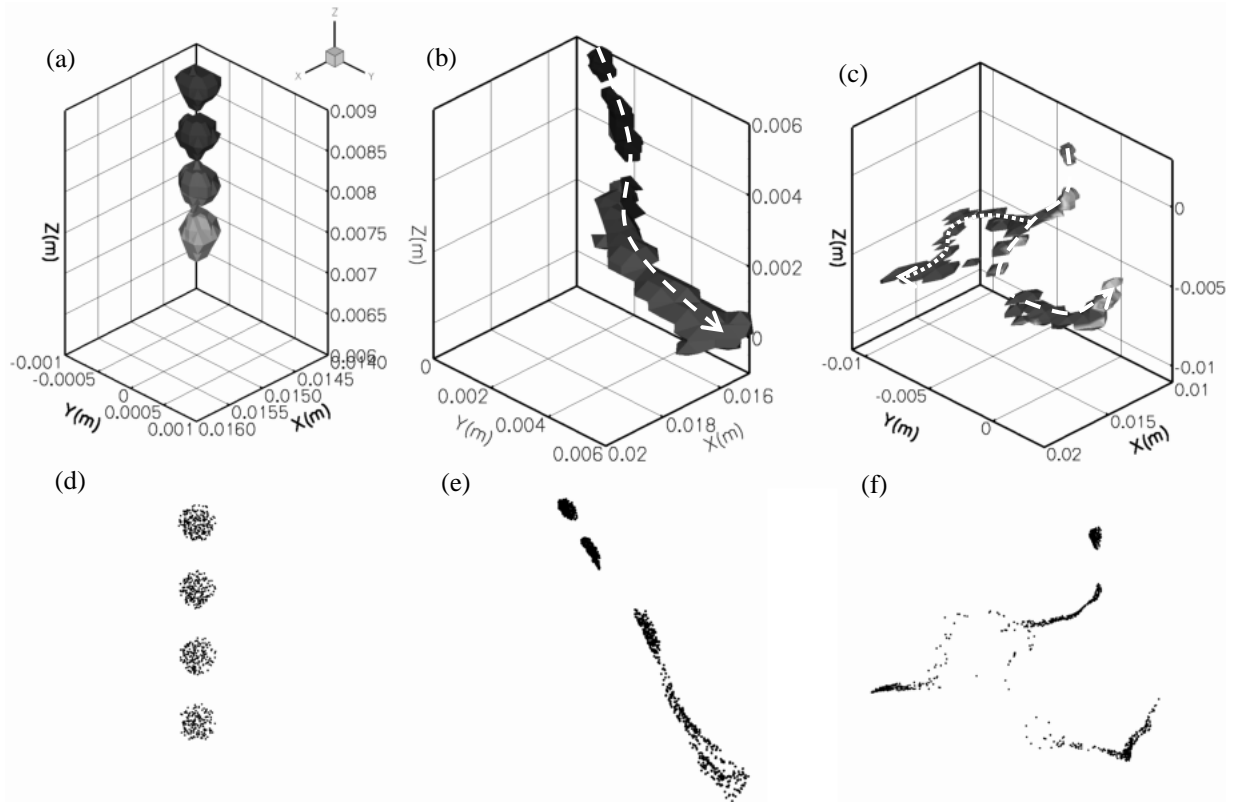


Figure 4: Iso-contours $C=0.001$ de la fraction volumique d'eau à $t=0.05ms$ (a), $t=0.125s$ (b) et $t=0.135s$ (c). Distributions des particules de la méthode hybride correspondantes, respectivement (d), (e) et (f)

Les gouttes d'eau sont chauffées et fragmentées lorsqu'elles approchent l'axe du jet de plasma. Cependant, on peut déjà, à l'échelle de quelques gouttes, constater des différences importantes de traitement thermocinétique entre elles. En effet, l'augmentation de température vue par la première goutte à $t=0.05ms$ (fig. 4a.) s'atténue (fig. 4b.). Cette goutte est donc éjectée vers des zones périphériques de gaz plus froides. Les gouttes suivantes connaissent un traitement différent et s'insèrent directement dans les zones chaudes et rapides. A partir de cet échantillon de gouttes, nous pouvons distinguer deux trajectoires produisant un traitement thermocinétique très différent (fig. 4c.). L'une amène les gouttes dans une zone chaude où elles se vaporiseront rapidement et permettront aux nanoparticules de se fondre correctement, l'autre les éjecte en périphérie froide, où les nanoparticules resteront à priori sous forme solide, réduisant ainsi les rendements de projection et modifiant aussi les caractéristiques du dépôt.

5. Conclusion

Nous avons mis en place la modélisation des interactions cinétiques et partiellement thermiques entre un jet de plasma et une phase liquide impliqués dans le procédé de projection plasma en voie humide. La prise en compte des changements de phase (vecteur liquide et des particules) sera l'étape suivante. Les calculs présentés ici seront poursuivis avec un nombre plus important de gouttes afin d'établir des statistiques de trajectoire et des cartographies de température, de vitesse et de granulométrie de gouttes. Une étude paramétrique basée sur les conditions de projection sera réalisée. Il est en effet essentiel de comprendre dans quelle mesure la vitesse et l'angle d'injection, le diamètre du jet liquide, la pénétration d'un jet continu et non pas fragmenté en gouttes influent sur la distribution granulométrique des gouttelettes formées.

Références

- [1] J. Oberste Berghaus, S. Bouaricha, J.-G. Legoux, C. Moreau, Injection conditions and in-flight particle states in suspension plasma spraying of alumina and zirconia nano-ceramics, *Proceedings of the International Thermal Spray Conference* (Basel, Switzerland, May 2-4 2005), ASM International (2005).
- [2] R. Siegert, J.-E. Doring, J.-L. Marques, R. Vassen, D. Sebold, D. Stover, Influence of the injection parameters on the suspension plasma spraying coating properties, *Proceedings of the International Thermal Spray Conference* (Basel, Switzerland, May 2-4 2005), ASM International, (2005).
- [3] C. Delbos, *Contribution à la compréhension de l'injection par voie liquide de céramiques (Y.S.Z., Perovskite,...) ou mélanges (Ni, ...) dans un plasma d'arc soufflé afin d'élaborer des dépôts finement structurés pour S.O.F.C.*, Thèse de l'université de Limoges (2004).
- [4] R.L. Williamson, J.R. Fincke, D.M. Crawford, S.C. Snyder, W.D. Swank, D.C. Haggard, Entrainment in high-velocity, high temperature plasma jets. Part II: computational results and comparison to experiment, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 46 (2003), 4215-4228.
- [5] F. Qunbo, W. Lu, W. Fuchi, 3D simulation of the plasma jet in thermal plasma spraying, *J. Mater. Process. Technol.*, 166 (2005), 224-229.
- [6] K. Cheng, X. Chen, Prediction of the entrainment of ambient air into a turbulent argon plasma jet using a turbulence-enhanced combined-diffusion-coefficient method, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 47 (2004), 5139-5148.
- [7] J.D. Ramshaw, C. H. Chang, Computational fluid dynamics modeling of multicomponent thermal plasmas, *Plasma Chem. Plasma Process.*, 3-12 (1992), 299-325.
- [8] E. Pfender, J. Fincke, R. Spores, Entrainment of cold gas into thermal plasma jets, *Plasma Chem. Plasma Process.*, 11-4 (1991), 529-543.
- [9] C.R. Wilke, A viscosity equation for a gas mixture, *J. Chem. Phys.*, 18-4 (1950), 517-519.
- [10] E.A. Mason, S.C. Saxena, Approximate formula for the thermal conductivity of gas mixture, *Phys. Fluids*, 5-1 (1958), 361-369.
- [11] P. Sagaut, *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows – An Introduction*, Pub. Springer-Verlag, Berlin, Germany (2002).
- [12] S. Vincent, J.-P. Caltagirone, One cell local multigrid method for solving unsteady incompressible multi-phase flows, *J. Comput. Phys.*, 163 (2000), 172-215.