Modélisation tridimensionnelle des plasmas thermiques en écoulement *

P. L. Viollet, M. Gabillard et N. Méchitoua

EDF, Laboratoire National d'Hydraulique, 6 Quai Watier, 78400 Chatou, France.

I ■ INTRODUCTION ■

Un plasma en extinction se mélangeant avec un écoulement de dilution froid est un écoulement souvent rencontré dans les applications industrielles. Dans les applications de chauffage de gaz par plasma, qui ont été beaucoup explorées ces derniers temps, le gaz plasmagène et le gaz froid de dilution sont identiques, ce qui simplifie notablement le problème. Dans les applications à venir aux réacteurs chimiques à plasma, en revanche, on pourra rencontrer un plasma produit à partir d'un gaz A_1 réagissant avec un autre gaz A_2 , par exemple un plasma d'hydrogène-argon réagissant avec une injection de méthane.

Du point de vue de la mécanique des fluides, les écoulements résultant sont essentiellement des écoulements turbulents subsoniques, présentant de grandes différences de masse volumique (le rapport des densités R entre le plasma, généralement émis sous la forme d'un jet turbulent et l'écoulement de dilution peut dépasser largement 10). De tels types d'écoulements sont également rencontrés dans un certain nombre de problèmes industriels, problèmes de combustion et de propulsion ($R \sim 5$), de mélanges de gaz, etc...

Le présent article a d'abord pour objectif d'analyser les problèmes de modélisation posés par ces écoulements (paragraphe 2), notamment en ce qui concerne l'influence de la turbulence. On présente ensuite, au paragraphe 3, la

démarche de validation des logiciels tridimensionnels qui sont appliqués à ce type d'écoulements, en se restreignant aux problèmes dans lesquels la composition atomique est constante (le plasma obtenu à partir du gaz N se mélange avec ce même gaz N froid). L'analyse d'une flamme de diffusion turbulente permet par ailleurs une première validation concernant un écoulement réactif de composition atomique variable.

II ■ SUR LA MODÉLISATION D'UN ÉCOULEMENT TURBULENT RÉACTIF MULTICONSTITUANT ■

● 2.1 Equations générales d'un écoulement réactif à plusieurs constituants

Nous ne considérons ici que les phénomènes ayant lieu en phase gazeuse, en écrivant les équations de bilans des espèces et de l'énergie de la phase gazeuse, pouvant contenir des inclusions dispersées liquides (gouttelettes) ou solides (particules). Pour simplifier l'exposé, les équations de transport ci-dessous sont écrites en grandeurs instantanées vis-à-vis des fluctuations turbulentes, en supposant implicitement que le volume occupé par les inclusions est petit, et que ces inclusions sont petites par rapport aux échelles de la turbulence. Dans le cas d'un écoulement diphasique (injection de particules de charbon dans le plasma, par exemple), ces équations sont bien évidemment couplées

(*) Cet article a été pour la première fois publié dans La Revue de Physique appliquée 25 (1990), pp. 843-857.

Tridimensionnal modelling of thermal plasma flows

One of the main difficulties in modelling thermal plasma flows is the interaction between turbulence and reacting phenomena. In the less difficult case where both plasma and diluting flow are produced with the same gas, a validation study of a numerical modelling has been done. This validation study consists in incompressible flow situations, non-reacting flows with large density differences, and thermal plasma flows mixing with cold flow. In the case of plasma chemical reactors, the paper discusses some aspects of the problem of interaction between turbulence and chemical reactions.

aux équations de la phase dispersée (voir Simonin [1]), équations que nous n'écrirons pas ici.

2.1.1 Equations dynamiques

L'équation de conservation de la masse présente en phase gazeuse est l'équation dite de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} (\rho u) = \Gamma \quad (1)$$

Γ représente ici le flux de masse échangé avec les inclusions (particules, gouttelettes) qui peuvent être présentes au sein de la phase gazeuse.

Le bilan de quantité de mouvement est traduit quant à lui par l'équation de Navier-Stokes :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \text{grad} (u) = -\frac{1}{\rho} \text{grad} (p) + \frac{1}{\rho} \text{div} (\bar{T}) + g + \frac{1}{\rho} F, \quad (2)$$

où $\bar{T}$ désigne le tenseur des contraintes visqueuses ; F est de son côté la force (par unité de volume) exercée par les particules sur l'écoulement gazeux.

La masse volumique est donnée par l'équation d'état, que l'on écrit ici (par commodité de l'exposé) comme l'équation d'état du gaz parfait :

$$p = \rho \frac{R}{M} T. \quad (3)$$

Dans le cas où la phase gazeuse est constituée du mélange de n espèces chimiques différentes, que l'on numérottera dans la suite de $i = 1$ à n , la masse molaire du mélange s'exprime à partir des masses molaires M_i et des fractions massiques X_i des n espèces :

$$\frac{1}{M} = \sum_{i=1}^n \frac{X_i}{M_i}. \quad (4)$$

2.1.2 Bilans de masse et d'énergie en phase gazeuse

Le bilan de masse du constituant i s'écrit :

$$\frac{\partial X_i}{\partial t} + u \cdot \text{grad} X_i = \frac{1}{\rho} \text{div} (\rho D_i \text{grad} X_i) + Q_i + R_i. \quad (5)$$

Ici, D_i est le coefficient de diffusion du constituant i , Q_i est le taux d'apparition ou de disparition du constituant i par suite des échanges avec les particules solides ou les gouttelettes liquides transportées par l'écoulement gazeux, et R_i le taux d'apparition ou de disparition du constituant i par suite des réactions chimiques.

On a supposé ici, dans un but de simplification, que le flux diffusif du constituant i , de fraction massique X_i , ne dépend que du gradient de X_i , ce qui est inexact. En fait, dans le cas des écoulements turbulents, l'importance des flux diffusifs est faible par rapport aux flux turbulents, ce qui minimise les conséquences de cette approximation.

Le bilan d'énergie s'écrit, de son côté :

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \text{grad} T \right) - \left(\frac{\partial p}{\partial t} + u \cdot \text{grad} p \right) = \text{div} (\lambda \text{grad} T) + Q + E + S - \rho h_i R_i. \quad (6)$$

Ici, Q est le terme d'échange d'énergie avec particules ou gouttelettes, E est le terme d'effet Joule lié à la présence éventuelle de l'arc électrique (nul dans le cas où l'étude ne concerne que la zone de plasma en extinction), S est un terme d'échauffement ou de refroidissement par rayonnement, et le dernier terme correspond à l'énergie dégagée ou absorbée par les réactions chimiques. On a noté h_i l'enthalpie massique du constituant i qui ne dépend que de la température (et de la pression), et qui comprend l'énergie de formation du corps i , h_{i0} , ainsi que l'énergie stockée dans le corps i sous forme sensible, c'est-à-dire :

$$h_i(T) = h_{i0} + \int_0^T C_{pi} dT.$$

Dans la suite, on négligera les termes de variation de pression au premier membre de (6), qui ne sont importants que lorsque le nombre de Mach est supérieur à, disons, 0,5. D'une manière générale, l'analyse faite ici se limite aux cas pour lesquels la variation relative de pression est faible.

En faisant apparaître l'enthalpie massique totale du mélange, définie comme :

$$H(T, X_{j,j=1 \text{ à } n}) = \sum_{i=1}^n X_i h_i(T) \quad (7)$$

il est possible de faire disparaître du bilan d'énergie le terme de réaction chimique, en écrivant l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial t} + u \cdot \text{grad} H = & \frac{1}{\rho} \text{div} \left(\frac{\lambda}{C_p} \text{grad} H \right) \\ & - \frac{1}{\rho} \text{div} \left(\frac{\lambda h_i}{C_p} \text{grad} X_i \right) + \frac{h_i}{\rho} \text{div} (\rho D_i \text{grad} X_i) \\ & + \frac{Q + E + S + Q_i \cdot h_i}{\rho}. \end{aligned} \quad (8)$$

Au second membre, on vérifie facilement que la somme des deuxième et troisième termes est nulle si les propriétés physiques sont un peu particulières, à savoir :

- les C_{pi} sont constants et tous égaux entre eux,
- λ est constant,
- les coefficients de diffusion sont égaux entre eux, avec de plus : $D_i = D = \lambda / \rho C_p$. En fait, dans un écoulement turbulent, les termes de diffusion et de thermoconduction sont négligeables dans les équations moyennées vis-à-vis des flux turbulents, aussi cette hypothèse est-elle de peu de conséquences.

2.2 Le problème des écoulements turbulents

— Dans le cas des écoulements turbulents, que l'on rencontre dans pratiquement toutes les applications industrielles, les seules grandeurs accessibles au calcul sont les grandeurs moyennes.

— Dans les écoulements à masse volumique variable, on utilise habituellement les moyennes de Favre, ou moyennes pondérées par la masse volumique, définies comme suit (le symbole barre désigne ici la moyenne statistique classique) :

$$\bar{G} = \frac{\overline{\rho G}}{\bar{\rho}}. \quad (9)$$

On notera dans la suite G'' la fluctuation de G par rapport à la moyenne de Favre définie par (9), et G' la fluctuation de G par rapport à la moyenne statistique classique.

Pour obtenir des équations sur les grandeurs moyennes, il est nécessaire de moyenner les équations instantanées de bilan de masse, quantité de mouvement, énergie, et masse des différents constituants du mélange (voir paragraphe 2.4). C'est au cours de cette opération de moyennage qu'apparaissent les termes de diffusion turbulente, qui viennent souvent oblitérer l'effet des termes de diffusion moléculaire.

Ces termes de diffusion turbulente sont :

- dans (2), la divergence du tenseur de Reynolds $\bar{R}$ de composantes $R_{ij} = \rho \overline{u_i'' u_j''}$;
- dans (5), la divergence du flux turbulent de masse de i , Φ_i , de composantes $\Phi_{i,j} = \rho \overline{X_i'' u_j''}$;
- dans (8), la divergence du flux turbulent d'enthalpie Φ_H , de composantes $\Phi_{H,j} = \rho \overline{H'' u_j''}$.

Par ailleurs, tous les termes sources de (2, 5, 8) doivent être moyennés. Ceci pose un très gros problème pour le terme de réaction chimique R_i qui s'exprime de façon non linéaire en fonction de la température et de la concentration des différentes espèces réactives. Il serait ainsi tout à fait faux d'écrire :

$$\bar{R}_i = R_i(\bar{T}, \bar{X}_j). \quad (10 \text{ faux})$$

L'hypothèse d'équilibre chimique (lorsqu'elle se justifie) permet de contourner cette difficulté. Dans les cas où la prise en compte des cinétiques chimiques sera nécessaire, on recherchera à appliquer les types de méthodes actuellement développées pour la prise en compte des cinétiques dans les problèmes de combustion turbulente comme par exemple la méthode PEUL de BORCHI et POURBAIX [2].

2.3 Utilisation de l'hypothèse d'équilibre chimique

2.3.1. La composition atomique du mélange est constante

Si la composition atomique du mélange est constante (cas d'un plasma d'air injecté dans un écoulement d'air, par exemple), la composition du mélange est simplement (pour une pression donnée) une fonction de la température, $X_j^e(T)$, et la température peut être déduite de l'enthalpie totale grâce à l'existence d'une loi enthalpie totale - température biunivoque, selon (7) :

$$H(T) = H(T, X_j^e(T)) \quad (11)$$

et

$$\bar{H} = H(\bar{T}). \quad (12)$$

L'équation (12) résulte évidemment d'une approximation : la non-linéarité de la relation $H(T)$ est « faible ». C'est avec cette hypothèse qu'ont été faits tous les calculs de chauffage de gaz par plasma à ce jour (paragraphe 3.2).

2.3.2 La composition atomique résulte du mélange de deux gaz

Nous considérons ici le cas (fig. 1) où la composition atomique du mélange réactif en un point résulte du mélange de deux espèces notées A_1 et A_2 : par exemple,

mélange d'un plasma d'argon-hydrogène (A_1) avec du méthane froid (A_2). Ce cas présente une certaine similitude avec une flamme de diffusion, qui résulte du mélange d'un combustible et d'un oxydant. Nous pouvons alors nous inspirer de la démarche de modélisation des flammes de diffusion à cinétique rapide (voir [2]), en la généralisant largement pour tenir compte de la complexité des espèces présentes en milieu plasma.

1. Croquis de définition : flamme de diffusion au mélange de deux gaz plasmagènes A_1 et A_2 .

Si l'on suppose que tous les coefficients de diffusion D_i des différentes espèces entre eux ($D_i = D$) ou que l'écoulement est suffisamment turbulent pour que les termes de diffusion moléculaire soient négligeables, alors la composition atomique en chaque point peut être caractérisée par une grandeur unique f , appelée taux de mélange. Ce taux de mélange est défini à partir des fractions massiques en éléments y_j (ex. C , H , etc...), conventionnellement par :

$$f = \frac{y_j - y_{j2}}{y_{j1} - y_{j2}} \quad (13)$$

avec : $f = 1$ dans A_1 ,
 $f = 0$ dans A_2 .

y_{j1} et y_{j2} sont les fractions massiques de chaque élément j pour les deux gaz injectés A_1 et A_2 .

f est solution de l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \cdot \text{grad } f = \frac{1}{\rho} \text{div} (\rho D \text{ grad } f) + Q_f. \quad (14)$$

Q_f provient de l'échange de masse avec les particules ou les gouttes. Cette équation n'a pas d'autre terme source car, bien sûr, les fractions massiques locales en éléments ne sont pas directement affectées par les réactions chimiques.

Remarquons par ailleurs que toute fonctionnelle $Y(f)$ de f seul peut être moyennée si la fonction de densité de probabilité de f , $P(f)$, est connue :

$$\overline{Y(f)} = \int_0^1 Y(f) P(f) df. \quad (15)$$

La forme de cette fonction de densité de probabilité est en pratique (voir [2]) présumée sous la forme d'une fonction bêta (d'utilisation classique en statistiques), à partir de la donnée en chaque point de la moyenne et de la variance :

$$\tilde{f} \text{ et } f^{\pi^2},$$

qui sont chacune solution d'une équation de transport (Eqs. (14 bis) et (27), au paragraphe 2.4).

Revenons à notre mélange de gaz plasmagènes A_1 et A_2 . La fraction massique en éléments du mélange correspondant à une certaine valeur de f est caractérisée, pour chaque élément j , par : $y_j = (1 - f) y_{j2} + f y_{j1}$, d'après (13). On pourrait envisager de calculer l'équilibre chimique du mélange caractérisé par les y_j , et d'en déduire la température à partir de l'enthalpie locale moyenne, en écrivant :

$$\tilde{T} = T^e(\tilde{H}, \tilde{f}) \quad (\text{faux}),$$

où $T^e(H, f)$ est l'inverse de la fonctionnelle $H^e(T, f)$ donnée par les calculs d'équilibre chimique effectués pour différentes compositions atomiques du mélange (compositions caractérisées par f). Cette approximation reviendrait, compte tenu de la non-linéarité de $T^e(H, f)$, à négliger l'influence de la turbulence sur les taux de réaction (voir Eq. (10 faux) au paragraphe 2.2), ce qui, on le sait par l'analyse des problèmes de combustion, conduit à des températures moyennes de flamme beaucoup trop élevées et à des zones de réaction trop minces. On propose dans la suite une méthode approchée pour résoudre cette difficulté.

Le calcul exact de la température moyenne à partir des données d'équilibre $T^e(H, f)$ s'écrit :

$$\tilde{T} = \int_0^1 \int_{H_1}^{H_2} T^e(H, f) P(H, f) dH df \quad (16)$$

où $P(H, f)$ est la densité de probabilité conjointe de H et de f .

On ne dispose, en chaque point, que des valeurs moyennes :

$\tilde{H}$ et $\tilde{f}$, solutions des équations de transport correspondantes, ainsi que de la fonction de densité de probabilité $P(f)$, que l'on a déjà introduite plus haut.

Dans le cas où les équations et les conditions aux limites pour l'enthalpie H sont de la même forme que pour le taux de mélange f , en l'absence de termes sources (radiatif en particulier) dans le bilan énergétique, et pour des propriétés physiques un peu idéales (celles pour laquelle l'équation (3) se simplifie), on a :

$$f = \frac{H - H_2}{H_1 - H_2} \quad (17)$$

On formule alors l'hypothèse suivante, qui est une généralisation de ce résultat particulier.

Hypothèse : les fluctuations de H sont corrélées uniquement aux fluctuations de f , par une fonctionnelle $H(f)$, définie par :

a) $H_0 = H_1$ et $H_1 = H_2$ réalisabilité ;

$$b) \tilde{H} = \int_0^1 H(f) P(f) df \quad (18)$$

où la moyenne de H est solution de l'équation de transport (8bis), avec termes sources s'il y a lieu. Cette fonctionnelle $H(f)$ pourrait être approchée par une équation du second degré.

Avec cette hypothèse, $P(H, f)$ se ramène simplement à $P(f)$, car la probabilité de rencontrer un couple (H, f) qui ne soit pas sur la courbe $H(f)$ est nulle.

$P(H, f) = \delta(H(f)) P(f)$, et on peut alors écrire :

$$\tilde{T} = \int_0^1 T^e(H(f), f) P(f) df. \quad (19)$$

Numériquement, les calculs seront évidemment un peu lourds, les fonctions $T^e(H, f)$ étant nécessairement tabulées à partir des résultats des calculs d'équilibre chimique (qui donneront $H^e(T)$ pour un certain nombre de valeurs de f).

La composition détaillée du mélange en un point donné peut être calculée de la même façon : si on note par exemple $X_H = X_{H^e}(T, f)$ la fraction massique en radical H calculée à l'équilibre, on calculera la fraction massique moyenne en radical H par :

$$\tilde{X}_H = \int_0^1 X_H^e(T^e\{H(f), f\}) P(f) df. \quad (20)$$

Pour illustrer l'utilisation de cette méthode, le calcul d'une flamme de diffusion turbulente est présenté au paragraphe 3.3.

2. Croquis de définition, relatif aux équations (16) à (20).

2.4 Le modèle de turbulence

Les équations moyennées qu'il faut finalement résoudre sont les suivantes, pour un problème stationnaire « en moyenne » :

$$\text{div}(\rho \tilde{u}) = \tilde{\Gamma} \quad (1 \text{ bis})$$

$$\tilde{\rho} \tilde{u} \cdot \text{grad}(\tilde{u}) = -\text{grad}(\tilde{p}) + \text{div}(\tilde{T} - R) + \tilde{\rho} g + \tilde{F} \quad (2 \text{ bis})$$

$$\tilde{p} = \tilde{\rho} R \tilde{T} \sum_{i=1}^n \frac{\tilde{X}_i}{M_i} \quad (3 \text{ bis})$$

$$\tilde{\rho} \tilde{u} \cdot \text{grad} \tilde{X}_i = \text{div}(\tilde{\rho} \tilde{D} \text{grad} \tilde{X}_i - \Phi_i) + \tilde{\rho} \tilde{Q}_i + \tilde{\rho} \tilde{R}_i \quad (5 \text{ bis})$$

$$\tilde{\rho} \tilde{u} \cdot \text{grad} \tilde{H} = \text{div} \left(\frac{\lambda}{C_p} \text{grad} \tilde{H} - \Phi_H \right) + \tilde{Q} + \tilde{E} + \tilde{S} + \tilde{Q}_i \cdot h_i \quad (8 \text{ bis})$$

$$\bar{\rho} \tilde{u} \cdot \text{grad} \tilde{f} = \text{div} (\bar{\rho} D \text{grad} \tilde{f} - \Phi_f) + \bar{\rho} \tilde{Q}_f. \quad (14 \text{ bis})$$

Dans (14 bis), Φ_f est un flux turbulent de même nature que Φ_i ou Φ_H . L'écriture de ces équations moyennées ne va pas, remarquons-le, sans poser quelques problèmes : ainsi, on a supposé en écrivant (3 bis) que la masse molaire du mélange est non fluctuante (ce qui est inexact), et l'écriture moyennée des termes de diffusion moléculaire dans (8 bis), (5 bis), (14 bis) n'est pas très rigoureuse (mais de toute façon leur formulation même dans les équations instantanées n'est pas très exacte).

La modélisation la plus simple des transferts turbulents utilise le concept de viscosité turbulente pour exprimer les tensions de Reynolds et les flux turbulents de masse et d'énergie :

$$R_{ij} = \overline{\rho u_i'' u_j''} = -\mu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \delta_{ij} (\bar{\rho} k + \mu_T \text{div} (\tilde{u})) \quad (21)$$

$$\Phi_{i,j} = \overline{\rho X_i'' u_j''} = -\kappa_T \frac{\partial \tilde{X}_i}{\partial x_j} \quad (22)$$

$$\Phi_{H,j} = \overline{\rho H'' u_j''} = -\kappa_T \frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_j}. \quad (23)$$

Pour Φ_f , on adopte une modélisation identique à (23). L'égalité des coefficients de diffusion dans (22) et (23) résulte de l'analogie entre les transferts turbulents de masse et d'énergie.

La viscosité turbulente μ_T et la diffusivité turbulente κ_T sont donnés par le modèle à deux équations de transport, dit modèle $k-\varepsilon$:

$$\mu_T = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad \text{et} \quad \kappa_T = \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \quad (24)$$

A masse volumique variable, les équations de transport de l'énergie turbulente k et de sa dissipation ε s'écrivent (toujours pour un problème stationnaire « en moyenne ») :

(a) Énergie turbulente :

$$\bar{\rho} \tilde{u} \cdot \text{grad} k = \text{div} \left(\frac{\mu_T}{\sigma_k} \text{grad} k \right) + P - \bar{\rho} \varepsilon + \Pi_k, \quad (25)$$

où le terme de production s'écrit : $P = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\bar{\rho}' u_i' \partial \bar{p}}{\bar{\rho} \partial x_i}$.

Dans ce dernier terme, $\bar{\rho}' u_i'$ est modélisé comme : $-\frac{\kappa_T}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}$.

(b) Dissipation :

$$\bar{\rho} \tilde{u} \cdot \text{grad} \varepsilon = \text{div} \left(\frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \text{grad} \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{k} (c_{\varepsilon 1} P - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \varepsilon) + \Pi_\varepsilon. \quad (26)$$

(c) Variance des fluctuations de f :

$$\bar{\rho} \tilde{u} \cdot \text{grad} f^{\overline{f^2}} + \text{div} (\kappa_T \text{grad} f^{\overline{f^2}}) + P_f - \bar{\rho} \varepsilon_f + \Pi_f. \quad (27)$$

La « production » est ici : $P_f = -2 \overline{\rho u_i'' f''} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i}$, et la dissipation est modélisée comme : $\varepsilon_f = \frac{1}{R_f} \varepsilon \frac{f^{\overline{f^2}}}{k}$.

$\Pi_k, \Pi_\varepsilon, \Pi_f$ résultent de l'interaction avec les inclusions et ne sont pas analysés ici (voir [1]).

Ce modèle $k-\varepsilon$ (LAUNDER et SPALDING [4]), complété de l'équation de transport de la variance des fluctuations de f , a été très largement utilisé pour le calcul des écoulements incompressibles. Tous les calculs présentés au prochain paragraphe ont été effectués en utilisant ce modèle, avec un jeu tout à fait standard des constantes (sauf mention contraire). Les résultats sont cependant parfois améliorés en utilisant des valeurs « non standard » du nombre de Prandtl (ou de Schmidt) turbulent σ_T , qui définit les limites de modèle $k-\varepsilon$.

C_μ	σ_T	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	σ_k	σ_ε	R_f
0,09	1	1,44	1,92	1	1,3	0,8

Depuis quelques années, des méthodes numériques précises de résolution des équations de transport des tensions de Reynolds et des flux turbulents pour des écoulements elliptiques (avec recirculations potentielles) ont vu le jour : pour ce faire, de très importantes difficultés d'ordre numérique ont dû être résolues (difficultés d'autant plus importantes que l'on est plus exigeant quant à la minimisation de la diffusion numérique). Ces travaux ont été réalisés avec des algorithmes :

- de type Teach, à UMIST [5] ;
- de type Mac Cormack implicite [6], dans la direction principalement des écoulements à grand nombre de Mach ;
- à pas fractionnaires comme ceux utilisés dans les présents calculs (Kanniche, Baron, Viollet [7]).

La résolution complète des équations de transport des tensions de Reynolds et des flux turbulents sera probablement largement utilisée à l'avenir dans le calcul d'écoulements plasma.

2.5 Méthodes numériques et prise en compte de géométries tridimensionnelles complexes

La résolution numérique des équations ci-dessus est effectuée en utilisant des méthodes à pas fractionnaires, avec un algorithme instationnaire modifié par une technique de pas de temps local qui permet d'accélérer la convergence vers les solutions stationnaires. La résolution des équations comprend ainsi trois étapes (voir [8]) :

(a) étape de convection, où l'on utilise une méthode de caractéristiques (voir [9]) dans le but de minimiser la diffusion numérique ; cette diffusion numérique résulte d'une mauvaise discrétisation des termes non linéaires de convection, et, s'ajoutant en quelque sorte aux phénomènes de transport que l'on modélise, peut venir altérer notablement la qualité des résultats.

(b) étape de diffusion et d'application des termes sources ;

(c) étape de calcul de la pression, par une méthode de volumes finis, et de correction du champ de vitesse pour satisfaire à la conservation de la masse.

L'utilisation d'un maillage structuré pour représenter des écoulements en conduites (cas très fréquent de l'ac-

couplément d'une torche à plasma sur une conduite industrielle) est rendue possible par :

- l'utilisation de mailles de pas variable en espace, et de conditions aux limites sur des frontières « obliques » par rapport à la maille ;
- l'utilisation de mailles curvilignes pour suivre les courbes d'une conduite.

De nombreuses validations de cet outil de calcul (système Estet-Perséphone) ont été effectuées pour des écoulements isothermes ou présentant de faibles variations de masse volumique. On a en particulier vérifié, en écoulement isotherme, que le calcul prédit correctement les circulations secondaires dans une conduite coudée (Gabbillard et Viollet [10]).

Le développement récent de méthodes de calcul tridimensionnelles en éléments finis permet d'envisager pour le futur l'utilisation de ces méthodes aux calculs des écoulements des plasmas thermiques : ces méthodes permettront une prise en compte plus facile des géométries compliquées qui sont souvent rencontrées dans l'étude de procédés industriels.

III ■ DÉMARCHÉ DE VALIDATION ■

● 3.1 Etude d'écoulements non réactifs à masse volumique variable

3.1.1 Situation du sujet

Des tentatives ont été faites il y a quelques années au LNH pour aménager le modèle $k-\varepsilon$ en tenant compte des fluctuations de masse volumique (VIOLETT [11]). La plupart des travaux de modélisation plus récents ont été cependant effectués en utilisant des fermetures de corrélations du second ordre. Citons en particulier :

- les travaux récents de CHASSAING et HERRARD [12, 13], effectués en apportant une attention particulière à la modélisation des corrélations pression-déformation (on utilise des moyennes de Reynolds), appliqués au calcul d'un jet par une méthode parabolique ;
- des résultats présentés au colloque Euromech 237 [14, 15] qui montrent que des résultats très encourageants peuvent être obtenus dans des écoulements elliptiques par une fermeture du second ordre formulée en moyennes de Favre, en introduisant seulement les termes de corrélation densité-gradient de pression qui apparaissent naturellement dans l'écriture des équations moyennées.

3.1.2 Etude d'une couche de mélange plane à masse volumique variable

Un banc d'essai (« Echo ») de mélanges de gaz hélium- CO_2 a été installé au LNH, et des mesures sur un écoulement plan (couche de mélange) sont effectuées, sur la même géométrie qu'une expérience de combustion prémélangée réalisée à l'ONERA par MOREAU (16 (voir Figure 3)). Les résultats correspondant à un rapport de densités $R = 4,2$ sont portés figure 4 : ils montrent que le mélange est correctement prédit, et que les résultats sont

3. Croquis de définition : couche de mélange à densité variable.

meilleurs si une valeur du nombre de Schmidt turbulent plus basse que les valeurs standards (0,5 au lieu de 0,7 ou 1) est utilisée.

3.1.3 Etude d'une configuration tridimensionnelle

La configuration géométrique tridimensionnelle étudiée reproduit de manière un peu schématique un type de configuration habituel dans les applications industrielles des plasmas (préchauffage de l'air dans une tuyère de haut fourneau). Elle est représentée figure 5, et a fait l'objet d'une étude expérimentale sur la même installation « Echo » que pour le cas précédent (voir [19]). Le mélange $\text{He} + \text{CO}_2$ est émis ici par une buse épaisse faisant saillie à l'intérieur de la conduite, avec un angle d'incidence de 45° . Les comparaisons des résultats de calcul et des résultats expérimentaux pour les deux profils 2 et 3 repérés figure 5 sont portées figure 6 : les résultats de la comparaison sont très bons dans la section 2, ils se dégradent au point d'impact du jet sur la paroi.

● 3.2. Configurations de mélange plasma-courant de dilution à composition atomique constante

Les calculs présentés ici concernent le mélange d'un courant de dilution avec un plasma en extinction d'un même gaz. Ces calculs utilisent l'hypothèse d'équilibre avec l'approximation (12). Compte tenu des gaz plasmagènes utilisés, le rayonnement au sein du gaz est négligé.

3.2.1 Configurations axisymétriques

La première configuration (fig. 7) reproduit des essais effectués en 1983 à ISSAC par l'Aérospatiale, avec une torche Aérospatiale de 1,4 MW dont le jet (plasma d'air) est émis dans un convergent en tôle mince, avec un écoulement d'air froid périphérique, prolongé par un tube cylindrique de 0,18 m de diamètre. Dans le calcul, la température de sortie torche est supposée constante, égale à 4 000 K, et le profil de vitesse uniforme. Les températures sont mesurées sur l'axe de symétrie loin de la torche (à 2,35 m, environ, distance à laquelle le mélange est réalisé : la température sur l'axe dans l'expérience comme dans le calcul, n'est plus que de 1 130 K), ainsi que sur la paroi de la tôle. Dans le calcul, cette température de paroi est calculée comme résultant de l'équilibre entre l'échange par convection à l'intérieur du tube, et le refroidissement du tube d'acier par rayonnement et convection naturelle vers le local d'essai. La figure 7 montre le maillage de calcul utilisé, le champ de vitesse calculé, ainsi que la comparaison des températures de paroi calculées et

$x = 0.06 \text{ m}$

$x = 0.22 \text{ m}$

$x = 0.5 \text{ m}$

4. Couche de mélange à densité variable : comparaison de profils de concentration volumique en He mesurés et calculés par deux valeurs du nombre de Schmidt turbulent. (GABILLARD ET FLAMAIN [17]), à trois sections différentes en aval. Les vitesses des couches supérieure et inférieure sont respectivement 3,75 m/s et 7,6 m/s. Rapport des densités : $R = 4,2$. (***) mesures, (—) calcul, $\sigma_T = 0,5$, (----) calcul, $\sigma_T = 0,67$.

5. Croquis de définition de la configuration tridimensionnelle.

6. Profils de vitesse (en haut) et de concentration (en bas) moyennes mesurés et calculés dans les sections 2 et 3. (—) calculs avec $\sigma_T = 1$ (GABILLARD et DURANTE [18]), (***) points expérimentaux (VIOLETT, FLAMAIN, LAMA, OLIVIER [19]).

mesurées. Dans le calcul, l'effet de surchauffe locale en début de partie cylindrique du tube est sous-estimé.

La deuxième configuration reproduit une géométrie analogue à plus petite échelle, avec une torche à plasma SFEC de 10 kW, en argon. Les expériences et les calculs ont été réalisés par IZARRA [21], au GREMI pour les expériences, et à EDF-LNH pour les calculs.

Compte-tenu du caractère peu turbulent de l'écoulement en sortie de la torche, on tient compte dans le calcul de profils de température et vitesse paraboliques en sortie torche. Le mélange très rapide à l'intérieur du dispositif est bien reproduit par le calcul (fig. 8), avec des températures sur l'axe qui se comparent bien aux résultats expérimentaux, mais les températures au voisinage de la paroi sont, dans le calcul, un peu trop basses. Dans l'ensemble des cas étudiés par Izarra, l'écart calcul-mesure ne dépasse pas 300 K, ce qui peut paraître important, mais doit être comparé à l'écart de température important entre le plasma et le courant de dilution.

3.2.2 Configuration tridimensionnelle

Une expérimentation à l'échelle industrielle a été effectuée au laboratoire plasma des Renardières (EDF). Sa géométrie rappelle celle de la figure 5, avec une torche à plasma

inclinée à 45° par rapport à la conduite (de diamètre aval 0,28 m), avec une géométrie d'injection toutefois un peu plus complexe. La torche utilisée est une torche Aérospatiale de 2 MW.

Pour le cas qui est présenté, le rapport des débits massiques courant de dilution/plasma est de 6,5, et la torche fonctionne à une puissance de 1,1 MW. Dans la section (a), des mesures de vitesse ont été effectuées par ADL par l'ONERA, et des mesures de température ont été effectuées par DRASC (81 points de mesure) par une équipe EDF (voir [22-23]).

Les conditions de calcul sont les suivantes : débits d'air froid et de plasma, respectivement 0,680 kg/s et 0,110 kg/s (soit un rapport des débits masse de 6,2); les températures d'injection du plasma et de l'air froid sont prises à 4 000 K et 300 K, respectivement.

La figure 9 montre la géométrie du problème, avec des champs de vitesse et température calculés. Une vue dans l'espace du maillage de calcul est portée figure 12. Dans le présent calcul, les parois de la conduite ont été supposées adiabatiques, alors que dans l'expérience ces parois sont refroidies par circulation d'eau : les champs de température ne sont donc pas directement comparables. Ces derniers (fig. 10) montrent cependant, dans le calcul comme dans

7. Torche à plasma Aérospatiale dans un tube convergent. De gauche à droite : maillage de calcul et géométrie ; champ de vitesse calculé ; températures de paroi calculées et mesurées sur la partie cylindrique du tube AB (le calcul figure en trait plein) d'après SIMONIN et BÉCHART [20]. Les débits de plasma et d'air de dilution sont respectivement : 0,165 kg/s et 1,15 kg/s. Le diamètre du tube cylindrique est de 0,183 m.

l'expérience, que le jet issu de la torche a impacté la paroi opposée à cette dernière, et que le mélange est déjà largement réalisé à une distance de 0,5 m en aval de la torche, avec des températures maximales comparables entre le calcul et l'expérience (1 200 K et 1 100 K, environ). Les transferts thermiques gaz-paroi (non reproduits dans le présent calcul) ont pour conséquence de rendre l'homogénéisation de la température plus rapide. L'asymétrie observée sur les mesures de température peut être due à l'existence d'un coude en amont (non représenté dans le calcul). Les profils de vitesse calculés et mesurés (*fig. 11*), se comparent de leur côté assez bien.

3.3. Exemple d'un écoulement réactif de composition atomique variable : calcul d'une flamme de diffusion turbulente

Le domaine des flammes turbulentes, dans lequel de nombreux résultats d'études expérimentales sont disponibles,

se prête bien à une première évaluation de la capacité de l'hypothèse d'équilibre chimique à prédire la composition d'un mélange réactif complexe.

La *figure 13* présente ainsi les fractions volumiques mesurées (HASSAN, LOCKWOOD, MONEIB [24]) et calculées sur l'axe de symétrie d'une flamme de diffusion turbulente résultant de l'émission d'un jet de gaz naturel en air calme. Ce calcul fait suite à une série antérieure de calculs sur la même flamme, calculs qui supposaient la chimie réduite à une réaction unique rapide (voir [3]). Dans le présent calcul, la composition complète du mélange est calculée à partir de données d'équilibre chimique (PRADO [25]) et de la méthode exposée au paragraphe 2.3 (la composition du mélange est calculée en appliquant l'équation (20) à chaque espèce dominante). Les champs de température calculés sont proches de l'expérience et des résultats des calculs antérieurs [3]. Le pic de concentration volumique en CO est dans le calcul bien situé par rapport au pic de concentration en CO₂, mais de trop grande amplitude par

8. Plasma d'argon dans un écoulement d'argon annulaire (d'après IZARRA [21]). Géométrie de l'expérience et profil de température sur l'axe. Débits de gaz plasmagène et du courant de dilution : respectivement 0,6 g/s et 6,67 g/s. (—) calcul. (***) mesures.

9. Expérimentation à l'échelle industrielle au laboratoire plasma des Renardières. Champs de vitesse et température calculés dans le plan de symétrie du calcul. Le maillage de calcul est porté figure 12. Le diamètre de conduit aval est de 0,28 m.

10. Cartes de température dans la section *a* (située à 50 cm en aval torche) mesurée (à gauche) et calculée (à droite).

11. Cartes de vitesse longitudinale dans la section *a* (située à 50 cm en aval de la sortie torche calculée (à gauche) et mesurée (à droite)). Ces cartes de vitesse sont tracées ici dans le rectangle inscrit dans une demi-section de conduite.

12. Vue tridimensionnelle du maillage de calcul de l'expérience à l'échelle industrielle du laboratoire plasma des Renardières.

rapport à l'expérience. L'existence dans les mesures d'oxygène à ce niveau indique sans doute que l'hypothèse de cinétique rapide n'est pas très valide dans cette zone (la vitesse d'écoulement est forte). Dans la partie supérieure de la flamme, les concentrations mesurées et calculées concordent bien. On observe dans les résultats de calcul une décomposition rapide du méthane liée à une importante production d'hydrogène.

IV ■ CONCLUSION ■

Parmi les difficultés de modélisation des écoulements de plasma thermiques en extinction, la turbulence et son inter-

13. Calcul d'une flamme turbulente en utilisant l'hypothèse d'équilibre chimique instantané (Eq. (19, 20)). La flamme étudiée expérimentalement par HASSAN, LOCKWOOD et MONEIB [24] résulte d'un jet de méthane en air calme, par une buse de 8 mm de diamètre, avec une petite flamme pilote d'hydrogène. Dans le présent calcul, la flamme pilote n'est pas représentée, et méthane et hydrogène sont supposés prémélangés (20 % vol H₂ + 80 % vol CH₄). A gauche : isothermes calculées dans le domaine $0 < z < 1,5$ m. A droite : profils de concentration volumique mesurés [23] et calculés sur l'axe Oz de la flamme.

action avec les phénomènes réactifs est une des plus aiguës. Dans le cas où plasma et courant de dilution sont produits à partir du même gaz, cas qui minimise cette difficulté, une démarche de validation de la modélisation numérique a été effectuée. Cette démarche comprend des cas de validation en écoulement incompressible, en écoulement non réactif à masse volumique variable, enfin des cas de mélange plasma courant de dilution. Les résultats présentés permettent de juger de la concordance obtenue entre résultats expérimentaux et résultats de calcul, pour ce type d'écoulement qui présente des difficultés de modélisation en même temps que de métrologie.

Dans le cas des réacteurs chimiques à plasma, le problème de l'interaction entre la turbulence et les réactions chimiques se pose de façon plus aiguë, et nous avons tenté ici de discuter de quelques aspects de ce problème. Les résultats présentés sur une flamme turbulente suggèrent que l'hypothèse d'équilibre chimique instantané peut fournir des éléments intéressants sur la composition d'un mélange réactif, si l'on prend des précautions sur l'exploitation des résultats dans les zones où les temps caractéristiques de la chimie deviennent du même ordre que ceux de l'écoulement (par exemple, zones de trempe dans le cas d'un réacteur chimique à plasma).

L'étude de la colonne d'arc, des transferts radiatifs, des réacteurs chimiques ou des problèmes de combustion assistée par plasma fonctionnant avec une phase solide,

enfin, qui n'ont pas été évoqués dans le présent article, sont également des directions de recherches dans lesquelles un effort de modélisation se poursuit.

Références

- [1] SIMONIN O., VIOLLET P.L. — *Numerical study on phase dispersion mechanisms in turbulent bubbly flows*, Int. Conf. on Mechanics of Two-Phase Flows, Taiwan (June 1989).
- [2] BORGHI R., POURBAIX E. — *La Recherche Aérospatiale* 4 (1983), 245-255.
- [3] VIOLLET P.L., GARRETON D., MECHITOUA N. — *Computation of turbulent diffusion flames with radiation*, Proc. rencontre SFT 87, Ecole Centrale des Arts et Manufactures (mai 1987).
- [4] LAUNDER B.E., SPALDING B. — *The numerical computation of turbulent flows*, Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. vol. 3 (1974).
- [5] HUANG P.G., LECHZINER M. — *Stabilization of recirculating flow computations performed with second-moment closure and third-order discretization*, 5th Symp. on Turbulent Shear Flow, Ithaca N.Y. (août 1985).
- [6] VANDROMME D., HA MINH H. — *About the coupling of turbulence closure models with averaged Navier-Stokes equations*, J. Computational Phys. (août 1986).

- [7] KANNICHE M., BARON F., VIOLLET P.L. — *Second moment closure prediction of recirculating flow and of countergradient heat flux in stratified flow*, 7th Int. Symp. on Turbulent Shear Flows, Stanford (Aug. 21-23, 1989).
- [8] DEWAGENAERE Ph., ESPOSITO P., LANA F., VIOLLET P.L. — *Three dimensional computations of non-isothermal wall-bounded complex flows*, 9th Int. Conf. on Numerical Methods in Fluid Dynamics, Saclay (juin 1984).
- [9] ESPOSITO P. — *Résolution des équations de transport par la méthode des caractéristiques*, rapport EDF-LNH HE 41/81.16.
- [10] GABILLARD M., VIOLLET P.L. — *The numerical computation of secondary flow and density currents in a curved pipe*, proc. 3rd Int. Symp. on Refined Flow Modelling and Turbulence Measurements, Tokyo (July, 1988).
- [11] VIOLLET P.L. — *Modélisation numérique du mélange d'un jet de plasma en extinction dans un écoulement froid en conduite*, EDF. Bulletin de la Direction des Etudes et Recherches, Série A, n° 2, (1985), pp. 7-32.
- [12] HÉRARD J.M. — *Modélisation et calcul d'écoulements turbulents isothermes de gaz à densité variable*, Thèse Institut National Polytechnique de Toulouse, mars 1986.
- [13] CHASSAING P., HÉRARD J.M. — *Second-order modelling of variable density turbulent mixing*, Proc. 6th Symp. on Turbulent Shear Flow, Toulouse (sept. 1987).
- [14] JONES W.P., PASCAU A. — *Calculation of variable density flow with a second moment closure*, Euromech 237, Marseille (juillet 1988), pp. 49-53.
- [15] ANSELMET F., SCHIESTEL R., BAHAROU E.M., ZAHIBO I., FULACHIER L. — *Experimental investigation and turbulent flux modelling of a strongly heated turbulent jet*, Euromech 237, Marseille (juillet 1988), pp. 33-37.
- [16] MAGRE P., MOREAU P., COLLIN G., BORCHI R., PÉALAT M. — *Further studies by CARS of premixed turbulent combustion in a high velocity flow*, Combustion and Flame 71 : 147-168 (1988).
- [17] GABILLARD M., FLAMAIN D. — Résultats non publiés (1989).
- [18] GABILLARD M., DURANTE N. — Résultats non publiés (1989).
- [19] VIOLLET P.L., FLAMAIN D., LANA F., OLIVIER J.C. — *Etude du mélange d'un jet émis à 45° dans un écoulement gazeux plus dense*, Rapport EDF HE44/87.22 (oct. 1988).
- [20] SIMONIN O., BÉCHART J. — Résultats non publiés (1987).
- [21] DE IZARRA C. — *Contribution à l'étude de colonnes de plasma d'argon dans un domaine étendu de température*, Thèse, université d'Orléans, novembre 1988.
- [22] LANA F., VIOLLET P.L., KASABJI F. — *Mélange d'un jet de plasma dans un écoulement froid : validation des calculs tridimensionnels et applications industrielles*, Proc. 8th Int. Symp. on Plasma Chemistry, Tokyo (juillet 1987, 31-36) (rapport EDF HE44/87.35).
- [23] CAHEN F., SPIBERG P., DESCHAMPS P., KASSABJI F. — *Méetrologie optique de la torche à plasma des Renardières : mesures de température par DRASC*, Rapport EDF HP/119/88/008.
- [24] PRADO G. — Communication personnelle.
- [25] HASSAN M., LOCKWOOD F., MONEIB H. — *Fluctuating temperature and mean concentration measurements in a vertical turbulent free jet diffusion flame*, La Rivista dei Combustibili 34 fasc. 9-12 (sept. 1980) 357-372.